

# 劣決定最小二乗問題に対する前処理付きクリロフ部分空間法

Preconditioned Krylov Subspace Methods for Solving Underdetermined Least Squares Problems

保國 恵一  
Keiichi Morikuni  
総合研究大学院大学

速水 謙  
Ken Hayami  
国立情報学研究所

## 何がわかる？

最小二乗問題

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_2, \quad A \in \mathbf{R}^{m \times n}, \quad \mathbf{b} \in \mathbf{R}^m$$

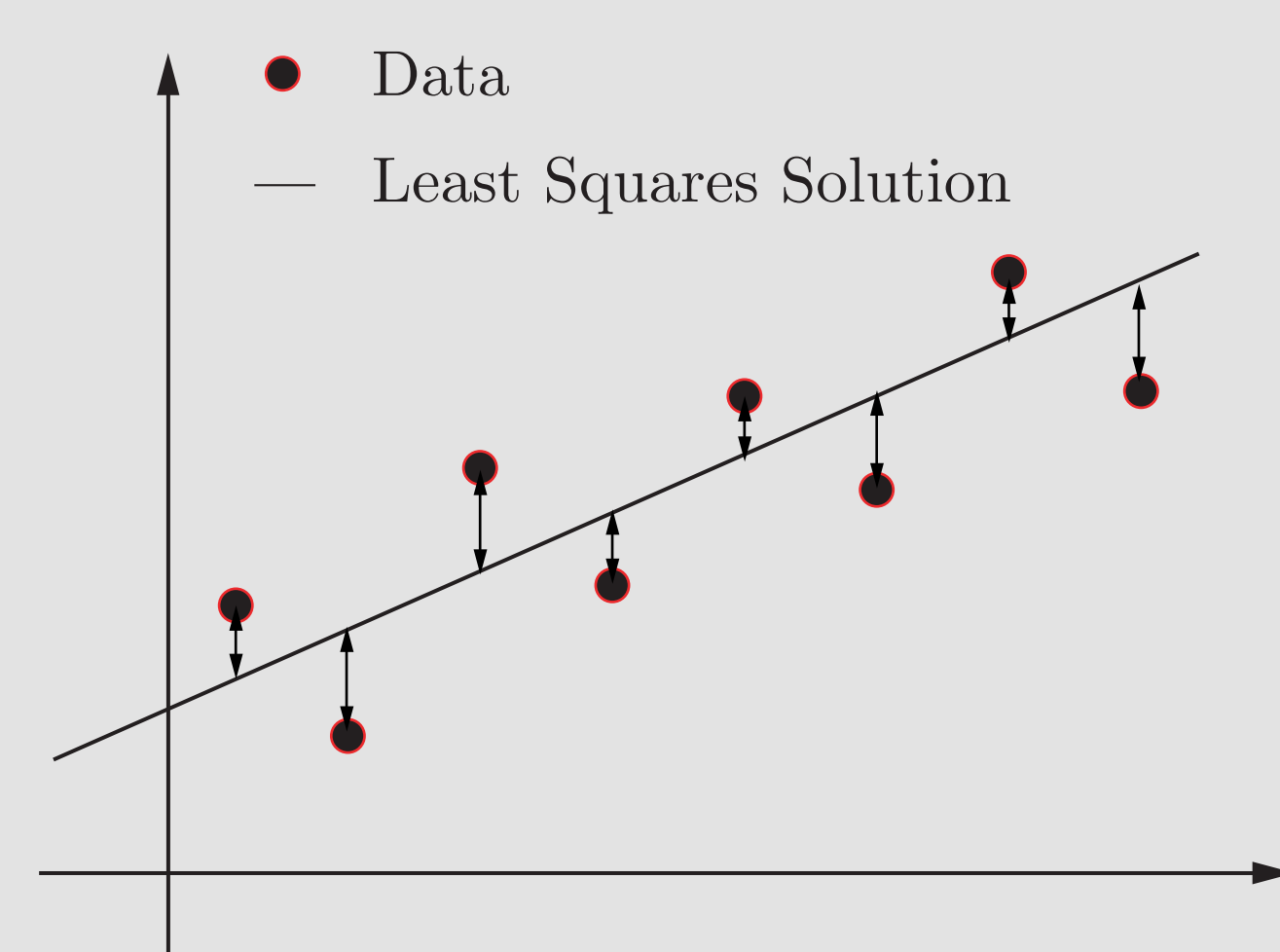
を解く計算手法の性質

## どんな研究？

- 最小二乗問題を解く計算手法の開発
  - 高速に・正確に・効率良く
- 手法の理論的性質の解明
- アルゴリズムの実装
- 数値実験による検証

## 概要

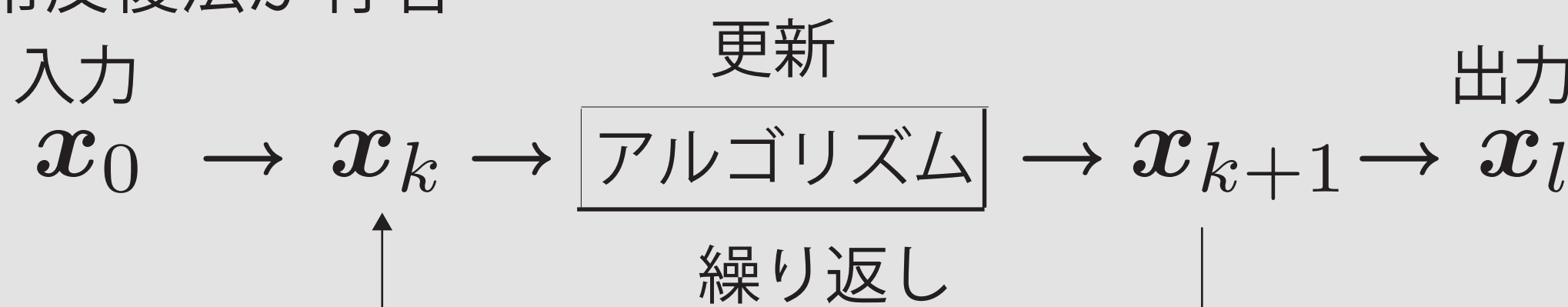
- 大規模な最小二乗問題を解く要請は、統計・工学・信号／画像処理・制御・最適化等といった様々な応で生じます。
- 反復法は近似解を更新して真の解に収束させますが、問題の条件が悪いと収束が遅くなります。反復法の収束を速めるため、我々は効率的な前処理法を開発しました。
- この手法は定常反復法を用い、内部反復前処理と呼ばれ、従来の手法と比べて計算時間および記憶量の改善を実現しました。
- さらに、劣決定問題に対するクリロフ部分空間法の性質を検討しました。



## 反復法

大規模な疎(スパース)行列問題に対しては反復法が有効

連立一次方程式に対しては、ヤコビ (Jacobi) 法やガウス・ザイデル (Gauss-Seidel) 法、SOR法といった定常反復法が有名



どのように解を更新するか、アルゴリズムが決め手

クリロフ部分空間の構成

- 正方行列  $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$  と初期残差  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$  からクリロフ部分空間  $\mathcal{K}_k(A, \mathbf{r}_0) = \text{span} \{ \mathbf{r}_0, A\mathbf{r}_0, \dots, A^{k-1}\mathbf{r}_0 \}$  を構成します

クリロフ部分空間での解の構成

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + \mathbf{z}_k, \quad \mathbf{z}_k \in \mathcal{K}_k(A, \mathbf{r}_0)$$

- 一般化最小残差法 (generalized minimal residual, GMRES)

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_2, \quad A \in \mathbf{R}^{n \times n}$$

- 共役勾配法[最小二乗問題向け] (conjugate gradient least squares, CGLS)

$$\min_{\mathbf{x}} \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_*, \mathbf{x} - \mathbf{x}_*)_{A^T A}, \quad A \in \mathbf{R}^{m \times n}$$

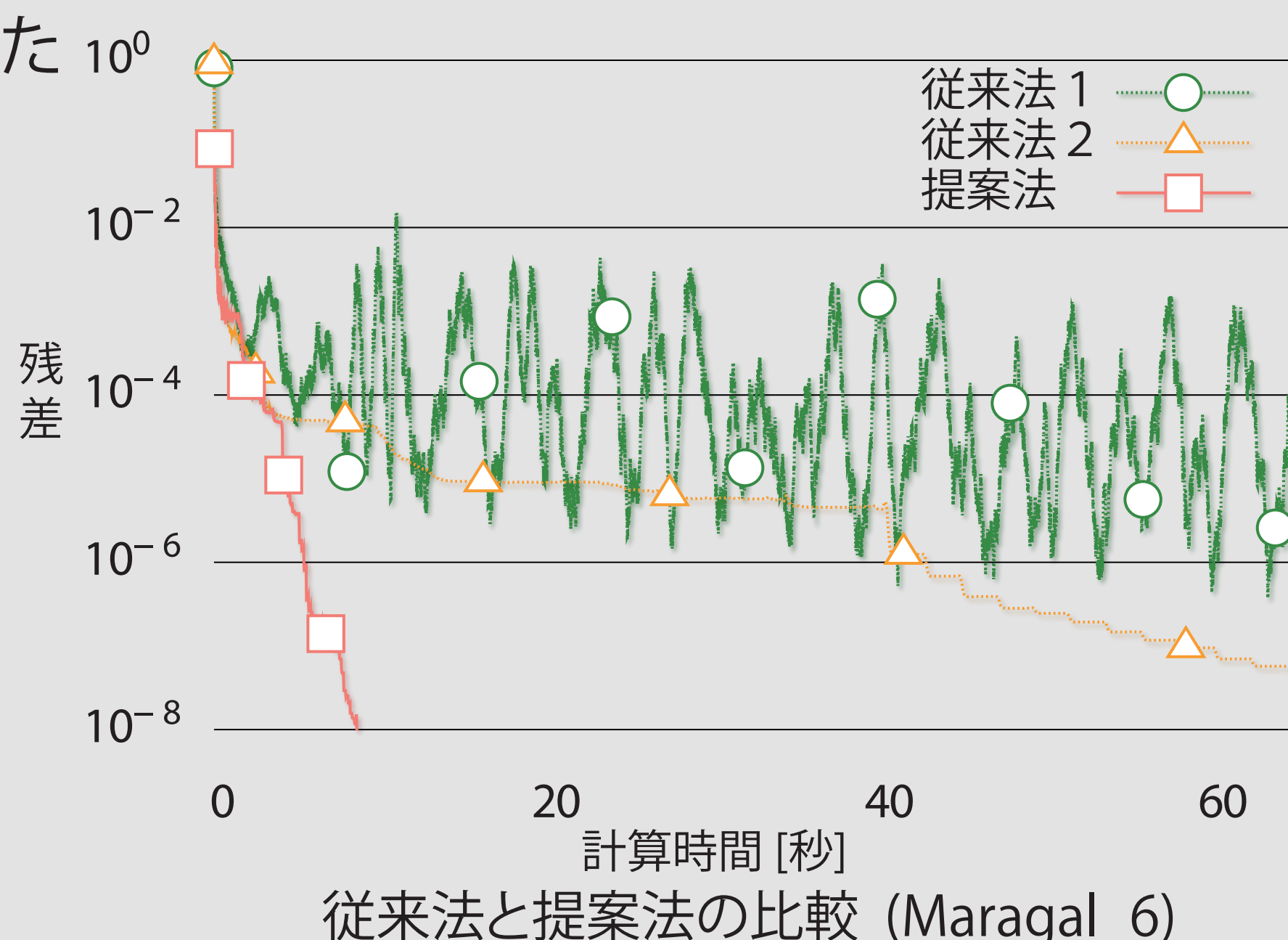
前処理による収束の加速

- 前処理行列  $P$  を用いて、元の問題と等価な、解きやすい問題にして収束を速くする

$$A \longrightarrow P^{-1}A, \quad AP^{-1}, \quad P_1^{-1}AP_2^{-1}$$

数値実験例

- 問題によっては、提案法NR-SOR内部反復前処理付きBA-GMRES は従来法の40倍以上の高速化を達成しました



アルゴリズム 内部反復前処理付き AB-GMRES( $l$ ).

- 1 Let  $\mathbf{x}_0$  be the initial approximate solution.
- 2 Compute  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0, \beta = \|\mathbf{r}_0\|_2, \mathbf{v}_1 = \mathbf{r}_0/\beta$
- 3 For  $j = 1, 2, \dots, l$ , Do
- 4 Roughly solve  $\min_{\mathbf{u}_j \in \mathbf{R}^m} \|\mathbf{v}_j - AA^T \mathbf{u}_j\|_2$  to obtain  $\mathbf{z}_j = A^T \tilde{\mathbf{u}}_j = B_j \mathbf{v}_j$  by using an inner iteration.
- 5  $\mathbf{w}_j = A\mathbf{z}_j (= AB_j \mathbf{v}_j)$
- 6 For  $i = 1, 2, \dots, j$ , Do
- 7  $h_{i,j} = (\mathbf{w}_j, \mathbf{v}_i)$
- 8  $\mathbf{w}_j = \mathbf{w}_j - h_{i,j} \mathbf{v}_i$
- 9 EndDo
- 10  $h_{j+1,j} = \|\mathbf{w}_j\|_2$
- 11  $\mathbf{v}_{j+1} = \mathbf{w}_j / h_{j+1,j}$
- 12 Find  $\mathbf{y}_j \in \mathbf{R}^j$  that minimizes  $\|\beta \mathbf{e}_1 - \tilde{H}_j \mathbf{y}\|_2$ .
- 13  $\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_0 + [\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_j] \mathbf{y}_j$
- 14 If  $\|A^T(\mathbf{b} - A\mathbf{x}_j)\|_2 < \varepsilon \|A^T \mathbf{r}_0\|_2$ , then stop.
- 15 EndDo
- 16  $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_l$  and go to 2

アルゴリズム 内部反復前処理付き BA-GMRES( $l$ ).

- 1 Let  $\mathbf{x}_0$  be the initial approximate solution.
- 2 Roughly solve  $A^T A \mathbf{z} = A^T \mathbf{r}_0 = A^T(\mathbf{b} - A\mathbf{x}_0)$  to obtain  $\mathbf{z} \simeq \tilde{\mathbf{r}}_0 = B \mathbf{r}_0$  by using an inner iteration.
- 3 Compute  $\beta = \|\tilde{\mathbf{r}}_0\|_2, \mathbf{v}_1 = \tilde{\mathbf{r}}_0/\beta$
- 4 For  $k = 1, 2, \dots, l$ , Do
- 5 Roughly solve  $A^T A \mathbf{z} = A^T A \mathbf{v}_k$  to obtain  $\mathbf{z} \simeq \mathbf{w}_k = B A \mathbf{v}_k$  by using an inner iteration.
- 6 For  $i = 1, 2, \dots, k$ , Do
- 7  $h_{i,k} = (\mathbf{w}_k, \mathbf{v}_i)$
- 8  $\mathbf{w}_k = \mathbf{w}_k - h_{i,k} \mathbf{v}_i$
- 9 EndDo
- 10  $h_{k+1,k} = \|\mathbf{w}_k\|_2$
- 11  $\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{w}_k / h_{k+1,k}$
- 12 Find  $\mathbf{y} \in \mathbf{R}^k$  that minimizes  $\|\beta \mathbf{e}_1 - \tilde{H}_k \mathbf{y}\|_2 = \|B \mathbf{r}_k\|_2$ .
- 13  $\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k] \mathbf{y}_k$
- 14 If  $\|A^T(\mathbf{b} - A\mathbf{x}_k)\|_2 < \varepsilon \|A^T \mathbf{r}_0\|_2$ , then stop.
- 15 EndDo
- 16  $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_l$  and go to 2