

最小二乗問題に対する反復解法の基礎から応用

最小二乗問題に対する内部反復前処理法と 画像再構成問題への応用

保國 恵一 Keiichi Morikuni

速水 謙 Ken Hayami

どんな研究？

- ・大規模でタチが悪い最小二乗問題を
効率よく解くための汎用的な解法の開発
- ・計算機実験による性能評価
- ・理論的な収束解析
- ・実問題に対する応用

何がわかる？

- ・効率的な計算を実現
→ 問題によっては約 1/40 の計算時間
- ・どんな問題条件でもきちんと解を与える
- ・いままで「見えなかった」ものが
「見える」ように

最小二乗問題とは

産業や工学、社会科学に広くあらわれる重要な基礎問題

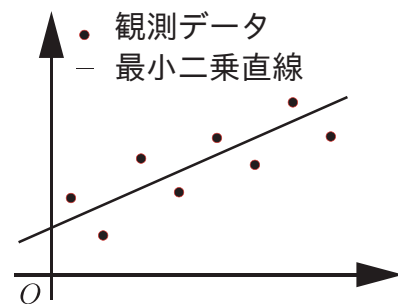
$$\min_{x \in \mathbf{R}^n} \|b - Ax\|_2, \quad A \in \mathbf{R}^{m \times n}, \quad b \in \mathbf{R}^m$$

方程式の数より未知数の数が多い / 少ない場合に
実用的に意味がある答えを推定します。

たとえば、信号処理、測地、画像処理 (CT) ,
天体補償光学といった応用があります。

従来は共役勾配法 (CG 法) に基づいた CGLS 法や
その安定化版の LSQR 法といった反復法が用いられました。

問題が悪条件な場合には、これらの収束が遅くなる欠点がありました。



図．最小二乗直線の当てはめ

前処理とは

適切な前処理を用いることで、反復法の収束は劇的に改善されます

前処理行列 $B \in \mathbf{R}^{n \times m}$ を用いて $\min_{x \in \mathbf{R}^n} \|b - Ax\|_2$ を等価で解きやすい連立一次方程式に変換。

$$\min_{x \in \mathbf{R}^n} \left\| \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} A \\ 0 \end{bmatrix} x \right\|_2 \iff \begin{bmatrix} BA \\ 0 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} Bb \\ 0 \end{bmatrix} \iff \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ 0 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

$\uparrow$
 $\mathcal{R}(B^T) = \mathcal{R}(A)$

もしくは

$$\min_{x \in \mathbf{R}^n} \|x\|, \quad \mathcal{S} = \left\{ x \in \mathbf{R}^n \mid \begin{bmatrix} A \\ 0 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \right\} \iff \begin{bmatrix} AB \\ 0 \end{bmatrix} u = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix} u$$

$\updownarrow$
 $\mathcal{R}(B) = \mathcal{R}(A^T)$

前処理された問題に対してクリロフ部分空間法のひとつ、一般化最小残差法 (GMRES 法) を適用。

BA-GMRES 法

$$x_k \in x_0 + \mathcal{K}_k(BA, Br_0), \quad \min \|Br_k\|_2$$

もしくは

AB-GMRES 法

$$x_k \in x_0 + \mathcal{K}_k(AB, Br_0), \quad \min \|r_k\|_2$$

内部反復前処理とは

従来法は, 前処理行列を陽に構成.
提案法は, 前処理を陽に構成する必要がない.

提案する内部反復前処理では, B を陽につくらずに, 反復法によって $B^{(\ell)}$ を陰的に与える.

アルゴリズム. 内部反復前処理付き BA-GMRES 法.

1. Choose x_0 and $r_0 = b - Ax_0$
2. Apply ℓ inner iterations to $A^T Az = A^T r_0$ to obtain $z_0 = B^{(\ell)} r_0$. Set $\beta = \|z_0\|_2$, $v_1 = z_0/\beta$.
3. for $k = 1, 2, \dots$ until convergence
4. $u_k = Av_k$. Apply ℓ inner iterations to $A^T Az = A^T u_k$ to obtain $z_k = B^{(\ell)} u_k$
5. for $i = 1, \dots, k$
6. $h_{i,k} = (z_k, v_i)$, $z_k = z_k - h_{i,k} v_i$
7. end
8. $h_{k+1,k} = \|z_k\|_2$, $v_{k+1} = z_k/h_{k+1,k}$
9. end
10. $y_k = \arg \min_{y \in \mathbb{R}^k} \|\beta e_1 - \bar{H}_k y\|_2$
11. $x_k = x_0 + [v_1, \dots, v_k] y_k$

$$\bar{H}_k = \{h_{i,j}\} \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k}$$

2 および 4 行目では正規方程式 $A^T Az = A^T c$ を定常反復法で近似的に解く.

$$A^T A = M - N, \quad H = M^{-1} N \text{ とする.}$$

ただし, M は正則, H は反復行列.

ℓ 反復目の近似解は $z^{(\ell)} = H z^{(\ell-1)} + M^{-1} A^T c$.

$$z^{(0)} = 0 \text{ ならば, } B^{(\ell)} = \sum_{k=0}^{\ell-1} H^k M^{-1} A^T.$$

定理

内部反復行列が semi-convergent ならば, 内部反復前処理付き BA-GMRES 法が任意の b および任意の x_0 に対して破綻することなく最小二乗解を与える.

H が semi-convergent $\stackrel{\text{def}}{\iff} \lim_{i \rightarrow \infty} H^i$ が存在.

計算機実験

成果はこの分野のトップジャーナル SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications に掲載.
2013 年 6 月現在, 20 Most Read Articles. 保國は日本人で初めて SIAM Student Paper Prize を受賞.

悪条件およびランク落ち最小二乗問題に対して特に有効

→ 従来法は「ランク落ち」だと破綻 (ゼロ割り) することも.

Maragal_6

- $21,251 \times 10,144$
- $\text{rank} A = 8,331$
- $\text{cond}_2 A = 2.9 \cdot 10^6$
- 非ゼロ密度 0.1%
- New York Power Authority (NYPA)).

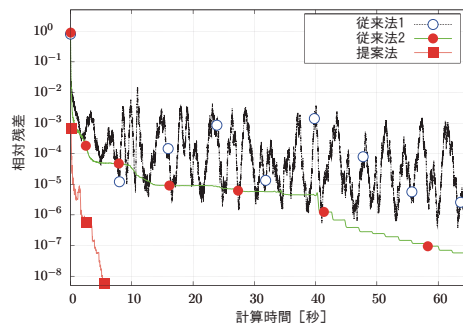


図. 計算時間の比較.

提案法の前処理パラメータの準最適値を

自動的に見つける手法を考案.

→ 従来法では調整は困難.

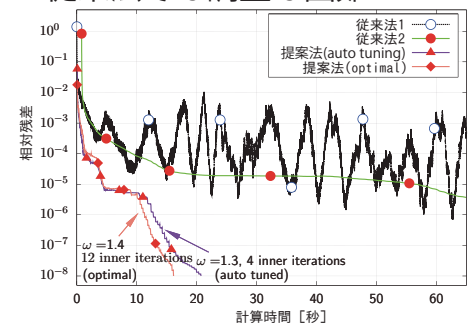


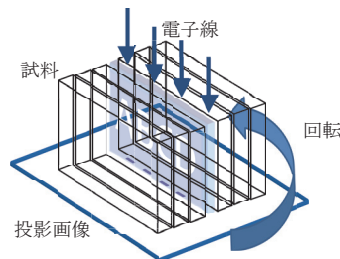
図. 自動パラメータチューニングの結果.

応用

細田 陽介 (福井大学), 寺西 大 (広島工業大学),
村田 和義 (生理学研究所) との共同研究

提案法の性能を実問題で評価するために
電子顕微鏡の画像再構成へ適用

- 最大仰俯角 70° から 70° 方向
- 電子線 1,024 本
- 画素 $1,024 \times 119$ ピクセル
- A : $71,680 \times 121,856$



Tikhonv 正則化

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \|b - Ax\|_2^2 + \mu^2 \|Lx\|_2^2 \right\}$$

$\iff$

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} A \\ \mu L \end{bmatrix} x \right\|_2^2$$

μ : 正則化パラメータ
 L : 離散ラプラシアン

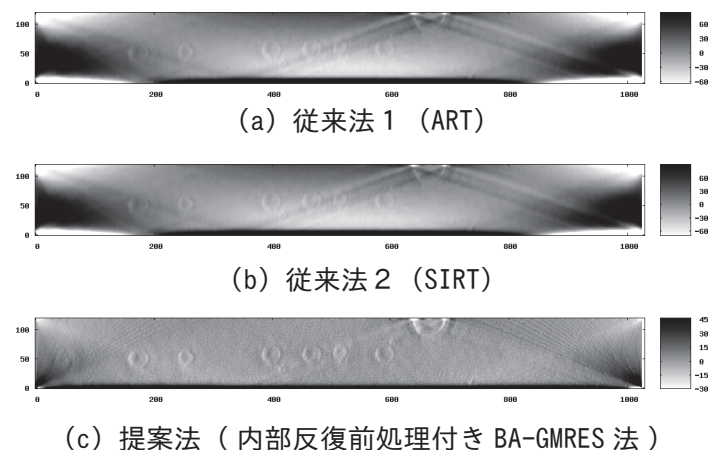


図. 実測データを用いた再構成画像比較