最小二乗問題の新解法
New Solvers for Least Squares Problems

保國 惠一　Keiichi Morikuni
総合研究大学院大学 複合科学研究科 情報学専攻
5 年一貫制博士課程 2 年生

崔 小可
Xiaoke Cui
総合研究大学院大学 複合科学研究科 情報学専攻

速水 謙
Ken Hayami
国立情報学研究所 情報学プリンシプル研究系

最小二乗問題に対する内部反復を用いたクリロフ部分空間法
Inner iteration preconditioned Krylov subspace methods for least squares problems

なにが分かる？

最小二乗問題 $\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$

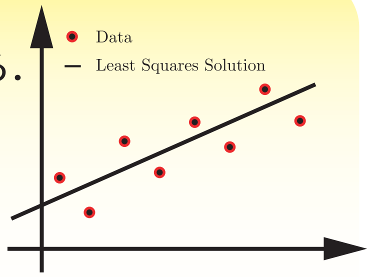
を解く計算手法の性質

どんな研究？

- 最小二乗問題を解く計算手法の開発
- 理論的な性質の解明
- 実装上の数値実験での検証

概要 Abstract

科学・工学に現れる実際問題の多くは，最小二乗問題に帰着する．
測地・制御・信号処理・統計・画像処理・物理モデリング
といった場面が挙げられる．
問題が大規模で悪条件の場合も有効な，
安定・高速な効率の良いアルゴリズムを提案する．
本手法は内部反復による前処理を用いたクリロフ部分空間法に基づいている．
手法の有効性を数値実験により明らかにする．



手法 Method

クリロフ部分空間法

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ に対する反復解法

$$\text{input } \boldsymbol{x}^{(k)} \rightarrow \boxed{\text{update}} \rightarrow \text{output } \boldsymbol{x}^{(k+1)}$$

repeat

適当な写像 $B \in \mathbb{R}^{n\times m}$ を使って

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{b} - AB\boldsymbol{z}\|_2, \quad \mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(AB)$$

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} \|B\boldsymbol{b} - BA\boldsymbol{x}\|_2, \quad \mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(B^T BA)$$

とすれば，クリロフ部分空間法のひとつ
一般化最小残差 (GMRES) 法を適用できる (Hayami, Yin, and Ito 2007).

ポイント　直接 B を計算する代わりに，内部反復を用いる

AB_j-GMRES(k) method with inner iteration

1. Choose $\boldsymbol{x}_0$
2. Compute $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$, $\beta = \|\boldsymbol{r}_0\|_2$, $\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{r}_0/\beta$
3. for $j = 1, 2, \ldots, k$, do
4. Roughly solve $A\boldsymbol{z}_j = \boldsymbol{v}_j$ to obtain $\boldsymbol{z}_j = B_j\boldsymbol{v}_j$
5. $\boldsymbol{w}_j = A\boldsymbol{z}_j = AB_j\boldsymbol{v}_j$
6. for $i = 1, \ldots, j$, do
7. $h_{i,j} = (\boldsymbol{w}_j, \boldsymbol{v}_i)$
8. $\boldsymbol{w}_j = \boldsymbol{w}_j - h_{i,j}\boldsymbol{v}_i$
9. end do
10. $h_{j+1,j} = \|\boldsymbol{w}_j\|_2$
11. $\boldsymbol{v}_{j+1} = \boldsymbol{w}_j / h_{j+1,j}$
12. Compute $\min_{\boldsymbol{y}\in\mathbf{R}^j} \|\beta\boldsymbol{e}_1 - \bar{H}_j\boldsymbol{y}\|_2$
13. if converges go to 15, else set $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_j$ go to 2
14. end do
15. $\boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{x}_0 + [\boldsymbol{z}_1, \ldots, \boldsymbol{z}_j]\,\boldsymbol{y}_j = \boldsymbol{x}_0 + B_j[\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_j]$

B_jA-GMRES(k) method with inner iteration

1. Choose $\boldsymbol{x}_0$
2. Roughly solve $A\tilde{\boldsymbol{r}}_0 = \boldsymbol{r}_0$ to obtain $\tilde{\boldsymbol{r}}_0 = B_0\boldsymbol{r}_0$
3. $\beta = \|\tilde{\boldsymbol{r}}_0\|_2$, $\boldsymbol{v}_1 = \tilde{\boldsymbol{r}}_0/\beta$
4. for $j = 1, 2, \ldots, k$, do
5. Roughly solve $A\boldsymbol{w}_j = A\boldsymbol{v}_j$ to obtain $\boldsymbol{w} = B_jA\boldsymbol{v}_j$
6. for $i = 1, \ldots, j$, do
7. $h_{i,j} = (\boldsymbol{w}_j, \boldsymbol{v}_i)$
8. $\boldsymbol{w}_j = \boldsymbol{w}_j - h_{i,j}\boldsymbol{v}_i$
9. end do
10. $h_{j+1,j} = \|\boldsymbol{w}_j\|_2$
11. $\boldsymbol{v}_{j+1} = \boldsymbol{w}_j / h_{j+1,j}$
12. Compute $\min_{\boldsymbol{y}\in\mathbf{R}^j} \|\beta\boldsymbol{e}_1 - \bar{H}_j\boldsymbol{y}\|_2$
13. if converges go to 15, else set $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_j$ go to 2
14. end do
15. $\boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{x}_0 + [\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_j]\,\boldsymbol{y}_j$

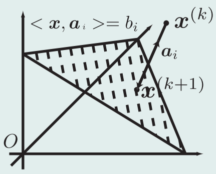
内部反復 inner iteration

$\boldsymbol{a}_i^T$ を行列 A の i 行目のベクトル，$i = 1, \ldots, m$ とする

Row Action method

1. Choose $\boldsymbol{x}^{(0)} \in \mathbf{R}^n$
2. for $k = 0, 1, \ldots$ do
3. for $i = 1, 2, \ldots, m$
4. $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \lambda_k \dfrac{b_i - \boldsymbol{a}_i^T\boldsymbol{x}^{(k)}}{\|\boldsymbol{a}_i^T\|_2^2}\boldsymbol{a}_i$
5. end do
6. end do

where λ_k is a relaxation parameter



CDAOR method

行列 $A \in \mathbf{R}^{m\times n}$ とベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbf{R}^n$ とブロックに分解する

$$A = [A_1, A_2, \ldots, A_N],\ \boldsymbol{x} = (X_1^T, X_2^T, \ldots, X_N^T)^T.$$

1. for $p = 1, 2, \cdots$
2. for $i = 1, 2, \cdots, N$
3. Get $\hat{X}_i^{p+1}$ by solving
$A_1\tilde{X}_1^{p+1} + \cdots + A_{i-1}\tilde{X}_{i-1}^{p+1} + A_i\hat{X}_i^{p+1} + A_{i+1}X_{i+1}^p + \cdots + A_NX_N^p = \boldsymbol{b}$
4. $\tilde{X}_i^{p+1} = \gamma\hat{X}_i^{p+1} + (1-\gamma)X_i^p$
4. $X_i^{p+1} = \omega\hat{X}_i^{p+1} + (1-\omega)X_i^p$
6. end do
7. end do

where γ and ω are relaxation and acceleration parameters

数値実験 Numerical Experiment

正規分布にしたがって生成されたランダムな行列によるテストケース

problem	RANDL1	RANDL2	RANDL3	RANDL4	RANDL5	RANDL6	RANDL7
条件数	1.0×10	1.6×10^2	1.3×10^3	2.0×10^4	1.3×10^5	1.3×10^6	1.3×10^7

劣決定問題　$3000\{\overbrace{\boxed{A}}^{30000}\boxed{\boldsymbol{x}} = \boxed{\boldsymbol{b}}$

非零要素の密度は 0.1%

過決定問題　$30000\{\overbrace{\boxed{A}}^{3000}\boxed{\boldsymbol{x}} = \boxed{\boldsymbol{b}}$

図 1. 収束履歴

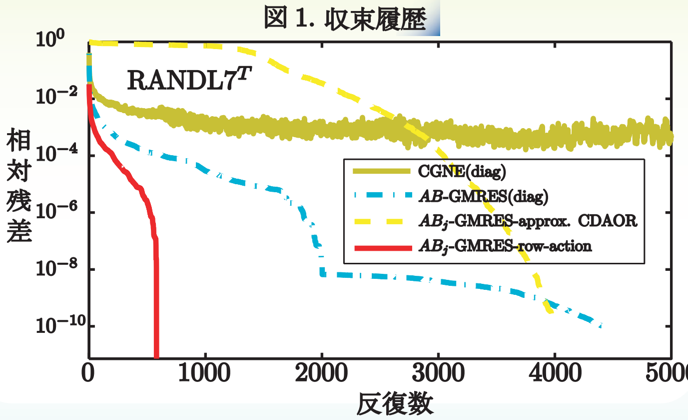


図 2. 収束履歴

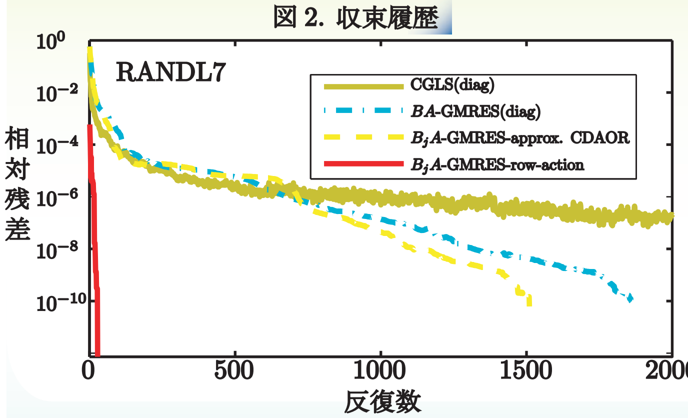


表 1：反復回数と計算時間

method -precond. \ problem	RANDL1^T	RANDL2^T	RANDL3^T	RANDL4^T	RANDL5^T	RANDL6^T	RANDL7^T
CGNE	81	236	725	2868	5506	13561	70086
-(diag)	0.286	0.861	1.891	7.292	14.167	33.343	203.89
ABGMRES	80	223	650	1479	1613	1830	†5000
-NE(diag)	0.246	0.932	4.720	19.698	24.196	33.787	266.021
AB_jGMRES	16(48)	25(150)	101(404)	234(1673)	470(1410)	570(1710)	580(2320)
-Row Action	0.128	0.370	1.089	4.272	5.228	6.857	8.287

first row: outer iteration number(inner iteration number)
second row: cpu time[sec]

表 2：反復回数と計算時間

method -precond. \ problem	RANDL1	RANDL2	RANDL3	RANDL4	RANDL5	RANDL6	RANDL7
CGLS	80	228	688	2816	5485	13471	68148
-(diag)	0.296	0.313	1.501	6.131	15.496	28.609	175.472
BAGMRES	84	214	608	1467	1615	1467	1917
-(diag)	0.237	0.781	3.858	17.791	21.365	20.838	33.416
B_jAGMRES	70(70)	189(189)	583(583)	1198(1198)	1326(1326)	1505(1505)	>4000
-Approx. CDAOR	0.394	1.212	5.562	17.034	19.781	24.232	-
B_jAGMRES	7(7)	14(14)	15(15)	35(35)	38(38)	19(19)	41(41)
-Row Action	0.068	0.128	0.136	0.313	0.340	0.172	0.366

first row: outer iteration number(inner iteration number)
second row: cpu time[sec]

結論 Conclusion

row-action 法により GMRES 法に対して反復前処理を行ったときが，最も有効である