不完全QR-GMRES(k)法による線形最小二乗問題の解法*

伊藤 徳史[†]，速水 謙[‡]
東京大学[†]，国立情報学研究所[‡]

1 はじめに

本稿では，

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n} ||\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}||_2 \tag{1}$$

という形の線形最小二乗問題について考える．ここで，A は大規模で疎な $m\times n$ の長方行列であり，$m\geq n$ で，A はフルランクであるとする．

問題 (1) を解くための従来の手法として，直接法と，正規方程式に CG 法を適用する反復法がある．この反復法は，CGLS 法と呼ばれ，

$$A^TA\boldsymbol{x}=A^T\boldsymbol{b} \tag{2}$$

を解くことになる．

直接法は確実であるが，大規模な問題の場合，計算量と作業領域が膨大になる．一方，反復法は一般に消費する作業領域も少なく，実行時間という点でも速くなる可能性がある．しかしこれは，収束が十分速く進む場合に限る．A^TA の条件数は，A の条件数の二乗なので，そのままでは収束が遅くなり，前処理の工夫が必要になる．

一方，Zhang ら [1] は，正規方程式ではなく，写像行列 B を導入して (1) に Orthomin(k) 法を適用することにより，正規方程式を解くよりも条件数を小さくして，反復法の収束を改善する方法を提案している．写像行列 B を適切に選ぶことによって，反復法の収束が改善されることが期待される．

本稿では，正方行列に対する GMRES(k) 法に，写像行列 B を適用した線形最小二乗問題に対するアルゴリズムを検討する．特に，写像行列 B として不完全 QR 分解を利用することにより，収束が改善されることを示し，そのための不完全 QR 分解の手法を示す．

*A key to solution of linear least squares problem by incomplete QR-GMRES(k) method

†Tokushi Ito, Graduate School of Information Science and Technology, Tokyo University

‡Ken Hayami, National Institute of Informatics

2 GMRES(k)-LS 法

GMRES(k) 法 [2] を，A が矩形行列の線形最小二乗問題にそのまま適用しようとすると，A の次元が $m\times n$，$\boldsymbol{r}_0$ の次元が $m\times 1$ なので，Krylov 部分空間を生成することができない．

そこで，[1] にならって，$n\times m$ の写像行列 B を用いることにより，m 次元ベクトルを n 次元ベクトルに変換し，Krylov 部分空間 $\{r_0, ABr_0, ..., (AB)^{i-1}r_0\}$ を構成する．

この Krylov 部分空間を用いた GMRES(k) 法のアルゴリズムは次のようになる．

$\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_0$

$\beta=||\boldsymbol{r}_0||_2,\quad \boldsymbol{v}_1=\dfrac{\boldsymbol{r}_0}{\beta}$

for $i=1,2,...,k$

  $\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1}=AB\boldsymbol{v}_i$

  for $j=1,2,...,i$

    $h_{j,i}=(\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1},\boldsymbol{v}_j)$

    $\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1}=\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1}-h_{j,i}\boldsymbol{v}_j$

  end for

  $h_{i+1,i}=||\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1}||_2$

  $\boldsymbol{v}_{i+1}=\dfrac{\hat{\boldsymbol{v}}_{i+1}}{h_{i+1,i}}$

  Compose $\bar{H}_i$ from $h_{11},...,h_{(i+1),i}$

  $\boldsymbol{e}_i=(1,0,...,0)^T\cdots(i+1)\times 1$

  Find $\boldsymbol{y}_i\in\boldsymbol{R}^i$ which minimizes $||\beta\boldsymbol{e}_i-\bar{H}_i\boldsymbol{y}||_2$

  $(||\boldsymbol{r}_i||_2=||\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}_i||_2)$

  if $||\boldsymbol{r}_i||_2\leq\epsilon$, then

$$\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{x}_0 + B\sum_{j=1}^{i} y_j \boldsymbol{v}_j,$$

stop

end if

end for

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + B\sum_{j=1}^{k} y_j \boldsymbol{v}_j,$$

$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_k$,

repeat

3 B の選択法

GMRES(k)-LS 法のアルゴリズムにおいて，BA は非対称の正方行列となる．アルゴリズムは,

$$BA\boldsymbol{x} = B\boldsymbol{b} \tag{3}$$

を解くことと等価である．反復法の収束が改善されることを期待する場合，$BA \approx I$ となるように写像行列 B を選ぶのが自然である．

そこで，まず考えられるのが，対角行列スケーリングである．ただし，A が $m \times n$ であるのに対し，B は $n \times m$ であるので，工夫が必要となる．Zhang らは，$B = (\mathrm{diag}(A^TA))^{-1}A^T$ と置く方法を提案している [1].

本稿では，不完全行列分解を利用することを考える．行列 A の不完全 QR 分解は,

$$A = QR + E \tag{4}$$

のようになる．ここで，E は誤差行列であり，Q は $m \times n$ の行列，R は $n \times n$ の上三角行列である．行列 Q は，完全な直交行列ではない．不完全 QR 分解を最小二乗問題 (1) に利用する場合，従来考えられていた方法は，行列 R を正規方程式 (2) の前処理行列として利用する方法である [3]．これは,

$$R^{-T}A^TAR^{-1}R\boldsymbol{x} = R^{-T}A^T\boldsymbol{b} \tag{5}$$

を解くことになる．すなわち，$C = (R^T)^{-1}A^TAR^{-1}$, $\boldsymbol{z} = R\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{d} = (R^T)^{-1}A^T\boldsymbol{b}$ として,

$$C\boldsymbol{z} = \boldsymbol{d}, \quad \boldsymbol{z} = R\boldsymbol{x} \tag{6}$$

を解けばよいことになる．C は正定対称行列となるので，$C\boldsymbol{z} = \boldsymbol{d}$ を解くのには CG 法が使える．

今回新たに提示する方法は，GMRES(k)-LS 法のアルゴリズムにおいて，$B = R^{-1}Q^T$ とおく方法である．すなわち,

$$R^{-1}Q^TA\boldsymbol{x} = R^{-1}Q^T\boldsymbol{b} \tag{7}$$

を解くことと等価となる．

(4) において，$E = O$ すなわち，QR 分解を完全に行って後の計算を進めていくと，反復数は 1 回で済むが，これは結局 QR 分解自体が元の問題を直接法で解いていることになるので，意味がない．そこで，$E \neq O$ すなわち，不完全 QR 分解を行う．不完全 QR 分解の Q，R が，QR 分解の Q，R と近ければ近いほど，反復数は少なくて済むが，そのような不完全 QR 分解を行うことはより時間がかかるという関係がある．そのため，不完全 QR 分解をうまく行う必要が生じる．

そこで，今回新たに提案する不完全 QR 分解の方法は，QR 分解を行う修正 Gram-Schmidt 法の過程において，新たに作る Q の列ベクトルを直前の l 本の列ベクトルのみと直交するように計算していくことにより，不完全な QR 分解を実現する手法である．l はパラメータであり，l の大小によって，不完全 QR 分解の不完全さを調整することができる．$l = n$ とすると，QR 分解と等価となる．これにより，不完全 QR 分解にかかる計算時間が短くなり，GMRES(k)-LS 法の収束もよくなる．特に，悪条件問題に対しては，従来の手法よりも高速に解けることが，計算実験によって，確かめられた．

参考文献

[1] S. L. Zhang and Y. Oyanagi, Orthomin(k) method for linear least squares problem, *J.Inf. Proc.,* **14-2** (1991), 121-125.

[2] Y. Saad and M. H. Schultz, GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.,* **7-1** (1986), 856-869.

[3] A. Jennings and M. A. Ajiz, Incomplete methods for solving $A^TAx = b$, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.,* **5-4** (1984), 978-987.