Vol.2010-HPC-126 No.36
2010/8/4

線形悪条件問題に対するGMRES法の反復終了条件

黒　岩　奈　保[†1]　　野　寺　　隆[†2]

第一種 Fredholm 積分方程式の離散化から導かれる連立 1 次方程式に対して GMRES 法を用いる際に適用する，新たな反復終了条件を提案する．第一種 Fredholm 積分方程式とは，逆問題の 1 つとして知られ，離散型線形悪条件問題に分類される．今回提案する反復終了条件は，悪条件問題に対する古典的な手法の 1 つである Tikhonov 正則化に注目した閾値を利用したもので，従来用いられている残差ノルムを利用したものに比べ，解の精度，近似解の決定の面で有利に働く．本稿では，提案手法の導出と，それを用いた GMRES 法の修正を示し，数値実験によってその有効性を示す．

A new stopping criterion of GMRES medthod for linear discrete ill-posed problems

Nao Kuroiwa[†1] and Takashi Nodera[†2]

In this paper, a new threshold of GMRES for linear discrete ill-posed problems (LDIPs), which are linear systems of equations derived from as the Fredholm integral equation of the first kind, is proposed. The new threshold uses a concept of Tikhonov regularization. It works better than usual one using residual norms in terms of accuracy and determination of approximate solutions. We show the derivation of the new threshold and propose a modified GMRES using it. Some numerical experiments will illustrate the effectiveness of proposed algorithm.

†1 慶應義塾大学大学院理工学研究科
Graduate School of Science and Technology, Keio University
†2 慶應義塾大学理工学部
Faculty of Science and Technology, Keio University

1. はじめに

GMRES 法[13] は連立 1 次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1}$$

に対する反復解法の 1 つであり，係数行列 A が非対称である場合に有利とされる．以降，$A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ とする．本稿では特に，離散型線形悪条件問題の一つである，第一種 Fredholm 積分方程式から導かれる連立 1 次方程式を対象とし，GMRES 法を適用する際の改良法を提案する．悪条件問題とは，解の一意性，存在性，安定性が保証されていない問題であり，多くの場合，意味のある近似解を生成するために，正則化手法を適用する．小規模な問題に対しては，特異値分解に関連した正則化手法がが用いられることが多いが，計算コストの面で大規模問題に適用することは現実的ではない．そこで近年，それ自体が正則化の性質を持つ Krylov 部分空間法を中心とした反復法を適用することについて，多くの研究が行われている．Björck[2] や Hanke[7] [Ch.4]，Hansen[9] らは，離散型線形悪条件問題に対して，Krylov 部分空間法の一つとして知られる共役勾配法を適用し，その有効性を示した．しかし，係数行列 A が非対称である場合，共役勾配法に属する手法では，正規方程式導出の過程で問題の条件が更に悪くなり不利になる．そのため，本稿では，非対称問題の場合にも行列に操作を加えずに用いることのできる GMRES 法に注目する．

本稿では，まず離散型線形悪条件問題について述べ，その性質や従来用いられてきた GMRES 法に関連した手法を記述する．次に，今回提案する修正法について述べ，数値実験により提案手法の有効性を確かめる．最後に，まとめと今後の課題について述べる．

第一種 Fredholm 積分方程式

$$\int_a^b K(s,t)f(t)dt = g(s), c <= s <= d, \tag{2}$$

を数値積分により離散化すると，連立 1 次方程式 (1) が導かれる．ここで，$K(s,t), g(s)$ は既知の連続関数，$f(t)$ は未知関数とする．第一種 Fredholm 積分方程式は，逆問題に現れる代表的なモデルの一つであり，多くの場合非適切な問題（ill-posed problem）となるため，離

散化によって得られる連立 1 次方程式は，離散型線形悪条件問題に分類される．逆問題においては，モデルを構成する際に未知の法則を予測で補う部分があり，モデル自体が不完全である場合が多い．そのため，解が不安定で，観測データにおける小さな誤差により，得られる近似解の精度が著しく低下することが知られている．さらに，逆問題の性質上，観測データを表す右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$ は測定誤差を含むことが想定されており，解の安定性は常に脅かされることとなる．また，

$$\tilde{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{b} + \boldsymbol{b}_{\mathrm{error}}$$

となり，正確な右辺ベクトル$\boldsymbol{b}$は利用できないと考えられる．ここで，ベクトル $\boldsymbol{b}_{\mathrm{error}}$ は測定誤差を表す．つまり，既知であり誤差を含む $\tilde{\boldsymbol{b}}$ については

$$A\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{b} \tag{3}$$

となるため，実際には連立 1 次方程式

$$A\tilde{\boldsymbol{x}} = \tilde{\boldsymbol{b}} \tag{4}$$

を解くことになる．ここで得られる近似解を $\tilde{\boldsymbol{x}}_*$ とする．近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}_*$ は連立 1 次方程式 (4) の解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ を近似したものであり，必ずしも真の解 $\boldsymbol{x}$ の近似とはならない．そこで，近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}_*$ がなるべく真の解 $\boldsymbol{x}$ に近づくような工夫が必要となる．

つまり，GMRES 法を用いる場合，各反復回数 $j, 1 <= j <= n$ に対し，最小二乗問題

$$\|\tilde{\boldsymbol{b}} - A\tilde{\boldsymbol{x}}_j\|_2 = \min_{\tilde{\boldsymbol{x}}_0 + \mathcal{K}_j(A,\tilde{\boldsymbol{r}}_0)} \|\tilde{\boldsymbol{b}} - A\tilde{\boldsymbol{x}}\|_2 \tag{5}$$

$$\mathcal{K}_j(A, \tilde{\boldsymbol{r}}_0) = \mathrm{span}(\tilde{\boldsymbol{r}}_0, A\tilde{\boldsymbol{r}}_0, \ldots, A^{j-1}\tilde{\boldsymbol{r}}_0) \tag{6}$$

を解いて得られる各近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}_j, 1 <= j <= n$ について，最小二乗問題

$$\|\,\tilde{\boldsymbol{x}}_* - \boldsymbol{x}\,\|_2 = \min_{\tilde{\boldsymbol{x}}_{j,1<=j<=n}} \|\,\tilde{\boldsymbol{x}}_j - \boldsymbol{x}\,\|_2 \tag{7}$$

を解くことになる．ここで，$\mathcal{K}_j(A, \tilde{\boldsymbol{r}}_0)$ は Krylov 部分空間を表す．

しかしながら，最終的な近似解の決定に真の解 $\boldsymbol{x}$ を用いることは現実的とは言えない．これまでに，離散型線形悪条件問題に対し，Calvetti ら[3] によって GMRES 法の適用や，GMRES 法の改良版である RRGMRES 法[4] が提案されている．RRGMRES 法とは，近似解構成に用いる Krylov 部分空間を，係数行列 A の値域に制限することで，近似解の安定性を高めたものである．また，Baglama ら[1] による Augmented GMRES/RRGMRES 法は，Krylov 部分空間に対して，近似解の持つ既知の性質を補うような任意の空間を付加することで，近似解の精度向上，反復回数の減少を実現した．

近年，我々は Augmented 手法における付加空間の選択を自動化した適応的な Augmented GMRES/RRGMRES 法を提案している[10]．これらの算法は標準的な GMRES 法に比べて高い性能を示しているが，どれも最終的な近似解の決定に関しては最小二乗問題 (7) を用いている．

ところで，理想的には，最大反復回数 $j <= n$ に対する最小二乗問題 (6) における近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}_j$ と最小二乗問題 (7) における近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}_*$ が一致することが望ましい．実際に一致させることは困難であるが，最小二乗問題 (7) を用いずに，それらを近づけるための工夫はなされている．Calvetti ら[5] は最終的な近似解の決定のために，式 (7) によらない Condition L-Curve を提案している．しかし，Condition L-curve を利用すると，各反復において行列の条件数を計算する必要があり，計算コストの面で有効とは言えない．また，最適解の決定を自動的に行えない点も問題となる．そこで本稿では，式 (7) の最小二乗問題を用いずに，低コストで最適な近似解を決定するために，GMRES 法における反復終了条件に注目し，新たに定義した Simpler Tikhonov 閾値を用いた手法を提案する．

2. 離散型線形悪条件問題に対する修正 GMRES 法

古典的な GMRES 法を用いて連立 1 次方程式を解く場合，j 回目の反復における近似解 $\boldsymbol{x}_j$ について，相対残差ノルム $\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j\|_2/\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0\|_2$ が十分小さくなることを反復終了条件とすることが多い．しかし，既に述べたように，離散型線形悪条件問題では，右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$ が測定誤差を含む形でしか得られない場合が多いことから，式 (6) の最小二乗問題を解くため，相対残差ノルム $\|\tilde{\boldsymbol{b}} - A\tilde{\boldsymbol{x}}_j\|_2/\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0\|_2$ を用いたのでは，近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}_j$ を真の解 $\boldsymbol{x}$ に近づけることはできない本稿では，積分方程式に関連した悪条件問題に対して従来より適用されてきた Tikhonov 正則化に注目し，新たな指標を提案し，これまでに提案されている RRGMRES 法

や Augmented GMRES/RRGMRES 法への適用を考える．

2.1 Tikhonov 正則化

悪条件問題は，その非適切性を改善するために，問題を正則化してから解く必要がある．GMRES 法が正則化の性質をもつことについては，Calvetti(J[6] らが示している．

ところで，従来より，逆問題で現れる積分方程式の正則化手法としては，Tikhonov 正則化[14] が知られている．連立 1 次方程式 (4) に適用した場合には，最小化問題

$$\min\left\{\|\tilde{\boldsymbol{b}} - A\tilde{\boldsymbol{x}}\|_2 + \lambda\|L\tilde{\boldsymbol{x}}\|_2\right\} \tag{8}$$

によって近似解を得ることで，真の解 $\boldsymbol{x}$ に近い適切な近似解を得ることができる．ただし，$\lambda \in \mathbb{R}, L \in \mathbb{R}^{n\times n}$ であり，λ は Tikhonov 正則化パラメータと呼ばれる．これらのパラメータ λ, 行列 L にはあらゆる求め方が提案されているが，各問題に依存する部分も大きく，決定的な手法は存在しない．Krylov 部分空間法に関連したものとしては，Lewis ら[12] による RRAT 法がある．RRAT 法では，反復の中で正則化パラメータ λ を決定し，高精度な近似解の構成を試みている．一方，我々は式 (8) の形に注目し，Tikhonov 正則化を新たな反復終了条件に活用することを考える．

2.2 残差ノルムの近似値

最初に，従来の GMRES 法の残差ノルムの性質について考えることにする．

古典的な GMRES 法では，Arnoldi 法の適用によって得られる $AV_j = V_{j+1}H$ を用い，残差ベクトルを以下のように変形できる[13]．ここで，$V_j \in \mathbb{R}^{n\times j}$ は正規直交行列，$H \in \mathbb{R}^{j+1\times j}$ は上 Hessenberg 行列，$\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^j$ は任意のベクトルとする．また，$\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ は初期近似解，$\boldsymbol{r}_0 \in \mathbb{R}^n$ は初期残差である．

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j &= \boldsymbol{b} - A(\boldsymbol{x}_0 + V_j\boldsymbol{y}_j) \\
&= \boldsymbol{r}_0 - V_{j+1}H\boldsymbol{y}_j \\
&= V_{j+1}(\|\boldsymbol{r}_0\|_2\boldsymbol{e}_1 - H\boldsymbol{y}_j) \\
&= V_{j+1}G^TG(\|\boldsymbol{r}_0\|_2\boldsymbol{e}_1 - H\boldsymbol{y}_j) \\
&= V_{j+1}G^T(\boldsymbol{g} - R\boldsymbol{y}_j)
\end{aligned}$$

ただし，Givens 回転行列 Ω_i に対し，行列 G は $G = \Pi_1^{i=j}\Omega_i$ であり，直行行列となる．従って，ベクトル $\boldsymbol{g}$ の最後の要素を $|\gamma|$ とすると，ベクトル $\boldsymbol{g}$，行列 R からそれぞれ最終行を除いたベクトル $\boldsymbol{g}'$，行列 R' を用いて，残差ノルムは次のようになる．

$$\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j\|_2 = \|\boldsymbol{g}' - R'\boldsymbol{y}_j\|_2 + |\gamma|.$$

一方，改良版である RRGMERS 法や，Augmented GMRES/RRGMERS 法においては，Arnoldi 分解 $A\widehat{V}_j = \widehat{V}_{j+1}\widehat{H}$ を用いて以下のように残差ベクトルの変形が可能である．

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j &= \boldsymbol{b} - A(\boldsymbol{x}_0 + \widehat{V}_j\boldsymbol{y}_j) \\
&= \boldsymbol{r}_0 - \widehat{V}_{j+1}H_R\boldsymbol{y}_j
\end{aligned}$$

ここで，両辺に左側から $\widehat{V}_{j+1}^T$ を掛けると次式を得ることができる．

$$\begin{aligned}
\widehat{V}_{j+1}^T(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j) &= \widehat{V}_{j+1}^T\boldsymbol{r}_0 - \widehat{H}\boldsymbol{y}_j \\
&= \widehat{G}^T\widehat{G}(\widehat{V}_{j+1}^T\boldsymbol{r}_0 - \widehat{H}\boldsymbol{y}_j) \\
&= \widehat{G}^T(\widehat{\boldsymbol{g}} - \widehat{R}\boldsymbol{y}_j).
\end{aligned}$$

同様に，残差ノルムは次のようになる．

$$\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j\|_2 = \|\widehat{\boldsymbol{g}}' - \widehat{R}'\boldsymbol{y}_j\|_2 + |\widehat{\gamma}|.$$

以上より，GMRES 法における残差ノルムは，改良版である RRGMRES 法，Augmented GMRES/RRGMERS 法のものも含め，一般に次式のようになる．

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{r}_j\|_2 &= \|\boldsymbol{g}' - R'\boldsymbol{y}_j\|_2 + |\gamma| \\
\boldsymbol{y}_j &= \underset{\boldsymbol{y}}{\operatorname{argmin}}\|\boldsymbol{g}' - R'\boldsymbol{y}_j\|_2.
\end{aligned}$$

ただし，$\|\boldsymbol{g}' - R'\boldsymbol{y}_j\|_2$ の値は，行列 R の条件によって多少大きくなる場合がある．RRGMRES 法や Augmented 手法において，近似残差ノルム γ の振る舞いが不安定であることについては Kuroiwa ら[11] を参照してほしい．ここでは，ベクトル $\boldsymbol{y}_j$ に関する連立 1 時方程式 $R'\boldsymbol{y}_j = mbg'$ を解くことでベクトル $\boldsymbol{y}_j$ を求めるため，$\|\boldsymbol{g}' - R'\boldsymbol{y}_j\|_2 \ll$ は十分小さいと仮定し，

$$\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j\|_2 \approx |\gamma| \tag{9}$$

という関係を得る．よって，GMRES 法だけでなく，改良版である RRGMRES 法や Augmented GMRES/RRGMERS 法においても γ を残差ノルムの近似値として用いることができる．

Vol.2010-HPC-126 No.36
2010/8/4

2.3 Simpler Tikhonov 閾値

我々の提案する Simpler Tikhonov 閾値においては，まず，簡単のために Tikhonov 正則化式 (8) において $\lambda = 1, L = I$ とする．

次に，Tikhonov 正則化で現れる残差ノルムと近似解のノルムの和について考える．式 (9) の関係から次式を得ることができる．

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j\|_2 + \|\boldsymbol{x}_j\|_2 &= \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j\|_2 + \|\boldsymbol{x}_0 + V_j\boldsymbol{y}_j\|_2 \\ &\approx |\gamma| + \|\boldsymbol{x}_0 + V_j\boldsymbol{y}_j\|_2 \\ &\leq |\gamma| + \|\boldsymbol{x}_0\|_2 + \|V_j\boldsymbol{y}_j\|_2. \end{aligned}$$

さらに，行列 V は正規直行行列なので

$$\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j\|_2 + \|\boldsymbol{x}_j\|_2 \leq |\gamma| + \|\boldsymbol{x}_0\|_2 + \|\boldsymbol{y}_j\|_2 \tag{10}$$

という関係が得られる．我々は，この式 (10) の右辺値を Simpler Tikhonov 閾値と呼び，離散型線形悪条件問題のための新たな反復終了条件に用いることを提案する．Tikhonov 正則化とは，残差ノルムと近似解のノルムの和

$$\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_j\|_2 + \|\boldsymbol{x}_j\|_2$$

を最小化するような $\boldsymbol{x}$ を近似解とする手法であった．つまり，Simpler Tikhonov 閾値が減少するように反復を進めることで，Tikhonov 正則化に似た効果を得ることが可能である．具体的には，j 回目の反復において Simpler Tikhonov 閾値が増加した場合には，1 つ前の反復における $\boldsymbol{x}_{j-1}$ を計算し，$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}_{j-1}$ としてステップ 1 からやり直すというリスタートを行う．そのリスタート後も再び Simpler Tikhonov 閾値が増加した場合には反復を打ち切り，その時点で近似解を決定することにする．つまり，Simpler Tikhonov 閾値を用いることで，適応的なリスタートと，最適な近似解の自動決定を実現している．また，Simpler Tikhonov 閾値には近似残差ノルム γ を用いているため，1 反復につき 1 回分，行列ベクトル積の計算コストを抑えることができる．**図 1** に，Simpler Tikhonov 閾値を用いた Augmented GMRES/RRGMRES 法として算法を示す．ここで用いる付加空間は p 次の多項式 $\sum_{i=1}^{p} w^i, w \in \mathbb{R}, i = 0, 1, 2, \ldots$ を表す空間であり，$p = 0$ のときは通常の GMRES 法，または RRGMRES 法となる．

ステップ 17 で Simpler Tikhonov 閾値を計算し，ステップ 18, 19 で Simpler Tikhonov 閾値の増加を，ステップ 23, 24 で Simpler Tikhonov 閾値の連続増加をチェックしている．

Input	$A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \tilde{\boldsymbol{x}}_0 = \boldsymbol{0}, \tilde{\boldsymbol{b}} \in \mathbb{R}^n, W \in \mathbb{R}^{n\times p}$, maximum iteration number $k <= n$
Output	$\tilde{\boldsymbol{x}}_j$
01:	$\tilde{\boldsymbol{r}}_0 := \tilde{\boldsymbol{b}} - A\tilde{\boldsymbol{x}}_0, \boldsymbol{v}_{p+1} := \tilde{\boldsymbol{r}}_0$
02:	if RRGMRES then
03:	$\quad \boldsymbol{v}_{p+1} := A\tilde{\boldsymbol{r}}_0$
04:	if $p > 0$ then
05:	$\quad AW = V_{p_i}H_i$ (QR factorization)
06:	$\quad \boldsymbol{v}_{p+1} := (I - V_pV_p^T)\,\boldsymbol{v}_{p+1}$
07:	$\boldsymbol{v}_{p+1} := \boldsymbol{v}_{p+1}/\|\boldsymbol{v}_{p+1}\|_2$
08:	for $j = p+1, \ldots, k$ do
09:	$\quad \boldsymbol{w}_j := A\boldsymbol{v}_j$
10:	$\quad$ for $i = 1, \ldots, j$ do
11:	$\quad\quad h_{ij} := (\boldsymbol{w}_j, \boldsymbol{v}_i)$
12:	$\quad\quad \boldsymbol{w}_j := \boldsymbol{w}_j - h_{ij}\boldsymbol{v}_i$
13:	$\quad$ end for
14:	$\quad h_{j+1,j} := \|\boldsymbol{w}_j\|_2$
15:	$\quad \boldsymbol{v}_{j+1} := \boldsymbol{w}_{j+1}/h_{j+1,j}$
16:	$\quad$ Compute $\boldsymbol{y}_j$ of $\min_{\boldsymbol{y}\in\mathcal{R}^{p+j}} \|V_{p+j+1}^T\tilde{\boldsymbol{b}} - H\boldsymbol{y}\|$
17:	$\quad tik_j = |\gamma| + \|\tilde{\boldsymbol{x}}_0\|_2 + \|\tilde{\boldsymbol{y}}_j\|_2$
18:	$\quad$ if $tik_j > tik_{j-1}$ then
19:	$\quad\quad$ *set* $j = j - 1$ and break
20:	end for
21:	$\tilde{\boldsymbol{x}}_j := \tilde{\boldsymbol{x}}_0 + [WV_{p+1:p+j}]\,\boldsymbol{y}_j$
22:	$\tilde{\boldsymbol{r}}_j := \tilde{\boldsymbol{b}} - A\tilde{\boldsymbol{x}}_j$
23:	if *tik* increases successively then
24:	$\quad$ stop iteration and determine approx.
25:	else set $\tilde{\boldsymbol{x}}_0 = \tilde{\boldsymbol{x}}_j$ and restart

図 1 Simpler Tikhonov 閾値を用いた修正 Augmented GMRES/RRGMRES 法
Fig. 1 The modified Augmented GMRES/RRGMRES method using Simpler Tikhonov threshold

3. 数値実験

Simpler Tikhonov 閾値を用いた修正 GMRES 法の有効性を確かめるため，数値実験を行っ

た．実験環境は

プログラム言語： C 言語

コンパイラ： gcc 3.3.3

精度： 倍精度

CPU： Dual-Core Intel Itanium 2 1.4GHz

OS： SUSE Linux Enterprise Server 9 SP3

である．また，最大反復回数 $k = 20$，空間付加にパラメータ $p = 2$ とし，ベクトル $\boldsymbol{b}_{\mathrm{error}}$ の要素は，平均 0，分散 1.0×10^{-5} となる正規乱数で構成した．

3.1 数値積分による連立 1 次方程式の導出

第一種 Fredholm 積分方程式 (2) から連立 1 次方程式を導くために，数値積分を適用する．数値積分の手法は，関数の近似に用いる多項式により大きく 2 つに分けられる．ラグランジュの補間公式を用いるニュートン・コーツ形の積分公式と，直行多項式を用いるガウス求積法である．ここでは，ニュートン・コーツ形に比べて少ない分点で高い精度を得られるとされる，ガウス求積法を適用する．関数近似に用いる直行多項式はルジャンドルの直行多項式とする．

まず，積分区間 $[a, b]$ を n 個の小積分区間 $[t_{i-1}, t_i], 1 <= i <= n$ に分割する．区間 $[c, d]$ についても同様に n 分割し，分点 $s_j, 1 <= j <= n$ を得るとする．次に，各小積分区間における積分核 $K(s, t)$ 対してルジャンドル・ガウス求積法を適用することを考える．積分核 $K(s, t)$ は全区間で積分可能であるとする．ルジャンドル・ガウス求積法は積分区間 $[-1, 1]$ で定義されているため，区間 $[t_{i-1}, t_i]$ に対応するように変数変換を行う必要がある．$t_{i-1} <= t <= t_i, -1 <= \xi <= 1$ とすれば，以下が得られる．

$$t = t(xi) = \frac{1-\xi}{2} t_{i-1} + \frac{1+\xi}{2} t_i \tag{11}$$

$$dt = \frac{t_i - t_{i-1}}{2} d\xi \tag{12}$$

よって，

$$\int_{t_{i-1}}^{t_i} K(s, t) dt = \frac{t_i - t_{i-1}}{2} \int_{-1}^{1} K(s, t(\xi)) \tag{13}$$

となる．さらに，小積分区間 $[t_{i-1}, t_i]$ において q 個の分点をとるようなルジャンドル・ガウス求積法を適用するとすれば，分点 $\xi_k, 1 <= k <= q$ として，

$$\int_a^b K(s, t) f(t) dt \approx \frac{2}{1} \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{q} (t_i - t_{i-1}) w_k K(s, t(\xi_k)) \tag{14}$$

を得る．w_k はルジャンドル・ガウス求積法において分点 ξ_k に対応する重みである．本稿の数値実験においては，$a <= t <= b, c <= s <= d$ はそれぞれ n 等分するとしたので，

$$\frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{k=1}^{q} w_k K(s_j, t(\xi_k)) \right) f(t_i) = g(s_j), 1 <= j <= n, \tag{15}$$

により，連立 1 次方程式 (1) を導いた．

3.2 数 値 例 1

まずは，Hansen[8] の Regularization Tools にてテスト問題として採用されている離散型線形悪条件問題 deriv2 のケース 1

$$\int_0^1 K(s, t) f(t) dt = \frac{\left(s^2 - s\right)}{6},$$

$$K(s, t) = \begin{cases} s(t-1) & , \quad s < t \\ t(s-1) & , \quad s \geq t \end{cases}$$

を扱うことにする．真の解は $f(t) = t$ である．$n = 2000, q = 3$ としてルジャンドル・ガウス求積法を用いた数値積分により離散化を行った．従来の GMRES 法，付加空間 $\mathcal{W}_\epsilon$ を用いた Augmented GMRES 法について，従来の手法と Simpler Tikhonov 閾値を用いた修正法と 3 種類の手法について，各結果を比較する．

図 2 は，GMRES 法，Augmented RRGMRES 法，Simpler Tikhonov 閾値を用いた提案手法の結果を，それぞれの相対誤差ノルム $\|\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{x}}\|_2 / \|\boldsymbol{x}\|_2$ と $\|A\tilde{\boldsymbol{x}} + \tilde{\boldsymbol{b}}\|_2 + \|\tilde{\boldsymbol{x}}\|_2$，提案手法については Simpler Tikhonov 閾値について比較したものである．従来の手法では，反復の途中，GMRES 法では 9 反復目，Augmented RRGMRES 法では 2 反復目にて相対誤差ノルムが最小値をとった後，徐々に相対誤差ノルムは増加している様子がわかる．一方，Simpler Tikhonov 閾値を用いた修正法においては，相対誤差ノルムが従来の手法における最小値とほぼ同じ値をとるところで反復を終了し，近似解を決定している．

表 1 は，相対誤差ノルムの比較である．Simpler Tikhonov 閾値を用いた提案手法で得られる最終的な近似解の相対誤差ノルムは，従来の Augmented RRGMRES 法で得られる最小相対誤差ノルムと同程度となっている．よって，近似解の自動決定が適切に働いていることが分かる．

表 1 数値例 1：反復終了時点での相対誤差ノルム

Table 1 Numerical experiment 1：Relative error norms at the end of iteration

手法	反復回数	相対誤差ノルム	最小相対誤差ノルム（反復回数）
GMRES	20	3.050	$1.493 \times 10^{-1}(9)$
Augmented RRGMRES	20	2.985×10^{-2}	$4.236 \times 10^{-4}(2)$
提案手法	3	4.295×10^{-4}	$4.289 \times 10^{-4}(2)$

Vol.2010-HPC-126 No.36
2010/8/4

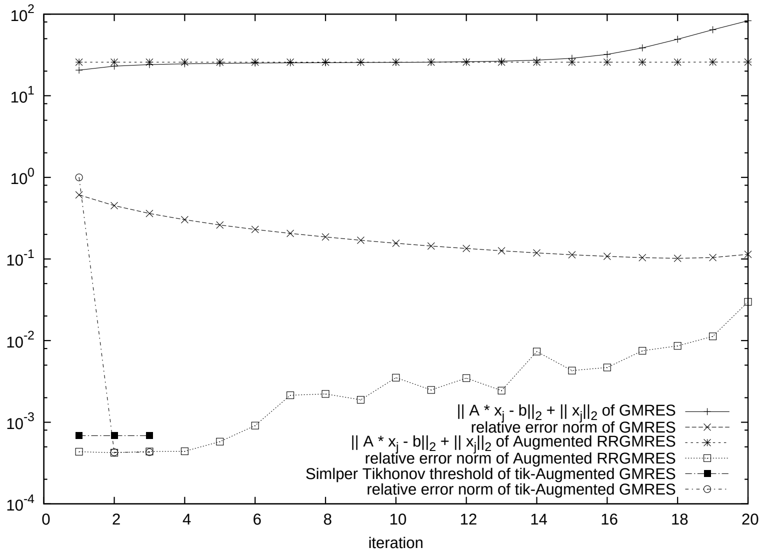

図 2 数値例 1：GMRES 法，Augmented RRGMRES 法，Simpler Tikhonov 閾値を用いた修正法の比較 (GMRES 法における $\|A\tilde{\boldsymbol{x}} - \tilde{\boldsymbol{b}}\|_2 + \|\tilde{\boldsymbol{x}}_j\|_2$（＋），相対誤差（×），Augmented GMRES 法における $\|A\tilde{\boldsymbol{x}} - \tilde{\boldsymbol{b}}\|_2 + \|\tilde{\boldsymbol{x}}_j\|_2$（＊），相対誤差（□），Simpler Tikhonov 閾値を用いた提案手法における Simpler Tikhonov 閾値 (■)，相対誤差（○））

Fig. 2 Numerical experiment 1 : GMRES, augmented RRGMRES vs. modified method using simpler Tikhonov threshold ($\|A\tilde{\boldsymbol{x}} - \tilde{\boldsymbol{b}}\|_2 + \|\tilde{\boldsymbol{x}}_j\|_2$ (+, ∗) and relative error norms(×, □) of GMRES and augmented RRGMRES respectively, simpler Tikhonov threshold (■) and relative error norm (○) of the modified method using simpler Tikhonov threshold)

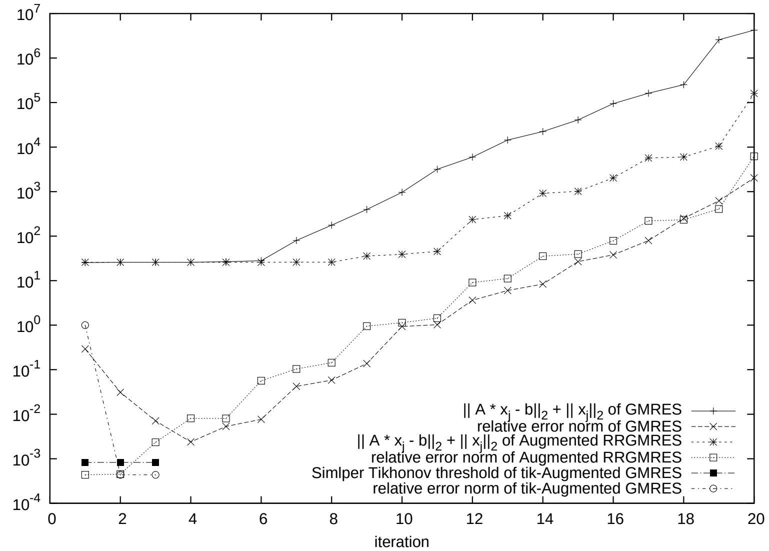

図 3 数値例 2：GMRES 法，Augmented RRGMRES 法，Simpler Tikhonov 閾値を用いた修正法の比較 (GMRES 法における $\|A\tilde{\boldsymbol{x}} - \tilde{\boldsymbol{b}}\|_2 + \|\tilde{\boldsymbol{x}}_j\|_2$（＋），相対誤差（×），Augmented GMRES 法における $\|A\tilde{\boldsymbol{x}} - \tilde{\boldsymbol{b}}\|_2 + \|\tilde{\boldsymbol{x}}_j\|_2$（＊），相対誤差（□），Simpler Tikhonov 閾値を用いた提案手法における Simpler Tikhonov 閾値 (■)，相対誤差（○））

Fig. 3 Numerical experiment 2 : GMRES, augmented RRGMRES vs. modified method using simpler Tikhonov threshold ($\|A\tilde{\boldsymbol{x}} - \tilde{\boldsymbol{b}}\|_2 + \|\tilde{\boldsymbol{x}}_j\|_2$ (+, ∗) and relative error norms(×, □) of GMRES and augmented RRGMRES respectively, simpler Tikhonov threshold (■) and relative error norm (○) of the modified method using simpler Tikhonov threshold

3.3 数 値 例 2

次に，Hansen[8] で紹介されている Regularization Tools のテスト問題より，離散型線形悪条件問題 foxgood

$$\int_0^1 \left(s^2 + t^2\right)^{\frac{1}{2}} f(t)dt = \frac{1}{3}\left(\left(1 + s^2\right)^{\frac{3}{2}} - s^3\right)$$

を扱うことにする．真の解は $f(t) = t$ である．$n = 2000, q = 3$ として，ルジャンドル・ガウス求積法を用いた数値積分により離散化を行った．付加空間 $\mathcal{W}$ を用いた Augmented GMRES 法について，従来の手法と Simpler Tikhonov 閾値を用いた修正法との結果を比較する．

図 3 は，GMRES 法，Augmented RRGMRES 法と Simpler Tikhonov 閾値を用いた提案手法の結果を，

表 2 数値例 2：反復終了時点での相対誤差ノルム
Table 2 Numerical experiment 2：Relative error norms at the end of iteration

手法	反復回数	相対誤差ノルム	最小相対誤差ノルム（反復回数）
GMRES	20	1.642×10^{5}	$6.740 \times 10^{-3}(3)$
Augmented RRGMRES	20	6.211×10^{3}	$4.362 \times 10^{-4}(1)$
提案手法	3	4.295×10^{-4}	$4.361 \times 10^{-4}(2)$

それぞれの相対誤差ノルムと $\|x - \tilde{x}\|_2/\|x\|_2$，$\|A\tilde{x} - \tilde{b}\|_2 + \|\tilde{x}\|_2$，提案手法似ついては Simpler Tikhonov 閾値について比較したものである．従来の手法において相対誤差ノルムは，GMRES 法では 3 度目の反復，Augmented RRGMRES 法では 1 度目の反復で最小値をとり，その後の反復では増加している．一方，Simpler Tikhonov 閾値を用いた修正法においては，相対誤差ノルムは著しい増加はみせずに反復を自動終了している．

表 2 は，相対誤差ノルムの比較である．提案手法により，従来の Augmented RRGMRES 法を実行した際に生成される最適な近似解と同程度の精度をもつ近似解を自動決定していることがわかる．

4. おわりに

本稿では，離散型線形悪条件に GMRES 法に関連した手法を用いる場合に，新たな反復終了の指標として，Simpler Tikhonov 閾値を提案した．これは，離散型線形悪条件問題に対しては残差ノルムよりも正確な指標となるもので，従来の手法に比べ，高精度解の構成と，近似解の自動決定を可能にするものであった．

今後の課題は，実際の画像復元等への適用，並列化手法を用いた大規模問題への適用，また，更なる性能向上を実現する算法の考案である．

参 考 文 献

1) Baglama, J. and Reichel, L.: Augmented GMRES-type method, *Numerical Linear Algebra with Applications*, Vol.14, pp.337–350 (2007).
2) Björck, A.: A bidiagonalization algorithm for solving large and sparse ill-posed systems of linear equations, *BIT*, Vol.28, No.3, pp.659–670 (1988).
3) Calvetti, D., Lewis, B. and Reichel, L.: GMRES-type method for inconsistent systems, *Linear Algebra and its Applications*, Vol.316, pp.157–169 (2000).
4) Calvetti, D., Lewis, B. and Reichel, L.: On the choice of subspace for iterative methods for linear discrete ill-posed problems, *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci*, Vol.11, pp.1069–1092 (2001).
5) Calvetti, D., Lewis, B. and Reichel, L.: GMRES, L-curves, and discrete ill-posed problems, *BIT Numerical Mathematics*, Vol.42, No.1, pp.44–65 (2002).
6) Calvetti, D., Lewis, B. and Reichel, L.: On the regularization properties of the GMRES method, *Numerische Mathematik*, Vol.91, No.4, pp.605–625 (2002).
7) Hanke, M.: *Conjugate Gradient Type Methods for Ill-posed Problems*, CRC Press, 2 edition (1995).
8) Hansen, P.C.: Regularization tools: A Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems, *Numerical Algorithms*, Vol.6, pp.1–35 (1994).
9) Hansen, P.C.: *Rank Deficient and Discrete Ill-Posed Problems*, SIAM, Philadelphia (1998).
10) Kuroiwa, N. and Nodera, T.: Adaptive Augmented GMRES method for solving ill-posed problems, *ANZIAM J.*, Vol.50, pp.C654–C667 (2009).
11) Kuroiwa, N. and Nodera, T.: Some Improvements of the GMRES Methods for Linear Discrete Ill-posed Problems, *Adv. Appl. Math. and Mech.*, Vol.1, pp.816–829 (2009).
12) Lewis, B. and Reichel, L.: Arnoldi-Tikhonov regularization methods, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol.226, pp.92–102 (2009).
13) Saad, Y. and Schultz, M.H.: GMRES: A generalized minimal residual method for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.7, pp.856–869 (1986).
14) Tikhonov, A.N.: Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method, *Soviet Math. Dokl.*, Vol.4, pp.1035–1538 (1963).