

離散型線形悪条件問題に対する修正 GMRES 法

黒岩 奈保^{†1,†2} 野寺 隆^{†3}

近年、第一種 Fredholm 積分方程式の離散化から導かれる連立 1 次方程式の近似解法として GMRES 法が注目を集めている。この連立 1 次方程式は離散型線形悪条件問題に分類される。対象となる問題は幅広く、古くから活発な研究が行われている。また、悪条件問題としての困難な性質を持つため、克服すべき点は多い。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 正則化に基づく値を利用したものである。通常、GMRES 法における従来の反復終了条件には、相対残差ノルムを利用することが多い。しかし、離散型線形悪条件問題に対して用いる場合には、適切な反復終了条件として働かないため、他の基準が必要となる。そこで、適当なタイミングで反復終了を可能とする Simplified Tikhonov 値を GMRES 法の新たな反復終了条件として提案する。最後に、数値実験を用いて提案手法の有効性を示す。

A Modified GMRES Method for Linear Discrete Ill-posed Problems

NAO KUROIWA^{†1,†2} and TAKASHI NODERA^{†3}

Recently, the GMRES method is a popular numerical method for a linear system derived from the Fredholm integral equation of the first kind. Such linear system is classified into linear discrete ill-posed problems. It has been studied by many researchers because it can describe various phenomenon. However, its properties as an ill-posed problem remain a lot of things to be conquered. Our proposed stopping rule is based on Tikhonov regularisation, which is one of classical regularisation methods for the ill-posed problem. Standard way to stop iteration of the GMRES method is using relative residual norm. But it does not work for the ill-posed problem. We will propose a simplified Tikhonov value for a new stopping rule of the GMRES method to stop iteration appropriately. At last, some numerical experiments will illustrate the effectiveness of proposed algorithm.

1. はじめに

GMRES 法¹⁾ は連立 1 次方程式

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, b, x \in \mathbb{R}^n \quad (1)$$

に対する反復解法の 1 つである。特に、係数行列 A が非対称である場合に有効である。本稿では、離散型線形悪条件問題に分類される線形な第一種 Fredholm 型積分方程式を離散化した場合に現れる連立 1 次方程式を対象とする。主な応用分野は、衛星画像や CT 画像といった非鮮明画像から元の鮮明な画像を得るような画像復元や、石油探査、重力測定などである。

悪条件問題とは、解の一意性、存在性、安定性のいずれかが保証されていない問題であり、多くの場合、意味のある解を得るために正則化手法を適用することになる。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代表的であるが、問題の規模が大きくなると計算コストや精度の面で不利になる。そういった点を考慮し、近年、それ自体が正則化の性質を持つ Krylov 部分空間法と呼ばれる反復解法を用いる研究が多く行われている。Björck²⁾ や Hanke⁶⁾ [Ch.4], Hansen⁸⁾ らは、離散型線形悪条件問題に対して、Krylov 部分空間法の 1 つであ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、共役勾配法に関連する手法では、正規方程式を導出する過程で問題の条件がさらに悪くなり不利になる。一方、もう 1 つの代表的な Krylov 部分空間法に GMRES 法がある。GMRES 法は、非対称問題の場合にも行列に操作を加えずに利用できるという点で、共役勾配法に比べて有利に働く。これまでに、離散型線形悪条件問題に対し、Calvetti ら³⁾ は GMRES 法の適用や、GMRES 法の改良版である RRGMRRES 法⁴⁾ を提案した。すなわち、RRGMRES 法は、近似解の構成に用いる 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。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

^{†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} 日本学術振興会特別研究員
JSPS Research Fellow

^{†3} 慶應義塾大学理工学部
Faculty of Science and Technology, Keio University

GMRES/RRGMRES 法を提案した⁹⁾。これらの算法は、標準的な GMRES 法に比べて近似解の精度や反復回数に関して高い性能を示している。しかし、いずれも離散型線形悪条件問題において最終的な近似解の決定を自動的に行うことはできず、解法としては不完全なものであった。本稿では、離散型線形悪条件問題における新たな反復終了条件を提案することで、近似解の自動決定に焦点を当てた GMRES 法の改良を行う。

2章では、離散型線形悪条件問題について述べる。3章では、新たな反復終了の指標となる Simplified Tikhonov 値を提案し、それを用いた GMRES 法の改良を提案する。4章では、数値実験により提案手法の有効性を示す。最後の5章では、まとめと今後の課題について述べる。

2. 離散型線形悪条件問題

線形な第一種 Fredholm 型積分方程式

$$\int_a^b K(s,t)f(t)dt = g(s), \quad c \leq s \leq d \quad (2)$$

を数値積分により離散化すると、式(1)で表現できる連立1次方程式を導くことができる。ただし、 $K(s,t)$ 、 $g(s)$ は既知の連続関数、 $f(t)$ は未知関数である。また、 $f(t)$ が直接観測することのできない未知の情報、 $g(s)$ が観測値、 $K(s,t)$ が $f(t)$ に影響を与える現象に相当する。第一種 Fredholm 型積分方程式は、逆問題に現れる代表的なモデルの1つであり、多くの場合に、非適切な問題 (ill-posed problem) であるため、離散化によって得られる連立1次方程式は悪条件問題となる。特に、積分方程式を離散化して得られる式(1)の係数行列 A は、次元数 n が大きいほど、その特異値がゼロ付近に密集するという性質がある。これは、行列 A の条件数が大きくなることを意味し、結果として式(1)は摂動に弱くなる。また、離散型線形悪条件問題において観測値に相当する右辺ベクトル b は、測定誤差による摂動が生じる。よって、正確な右辺ベクトル b を得ることは困難であり、次式の \tilde{b} が既知の観測値として用いられることが多い。

$$\tilde{b} = b + b_{\text{error}}$$

ただし、ベクトル b_{error} は測定誤差を表すものとする。すると、誤差を含む \tilde{b} について求められる近似解には、次の関係が成り立つ。

$$Ax \neq \tilde{b} \quad (3)$$

そのため、既知の A, \tilde{b} に対して GMRES 法を適用する場合、次の連立1次方程式を解く

ことになる。

$$A\tilde{x} = \tilde{b} \quad (4)$$

GMRES 法は、Krylov 部分空間を用いて、連立1次方程式における残差ノルムを最小化するように近似解を構成する手法である。よって、離散型線形悪条件問題に GMRES 法を適用する場合、残差ノルムに関する最小化問題に、 \tilde{x} に対する近似解 \tilde{x}_j を真の解 x に近づけるような制約条件 Ψ を設けることで、適当な近似解 \tilde{x}_j を決定することができる。つまり、次の問題を解けばよいことになる。

$$\min_{\tilde{x} \in \tilde{x}_0 + \mathcal{K}_j(A, \tilde{r}_0)} \|\tilde{b} - A\tilde{x}\|_2 \quad \text{subject to } \tilde{x}_j \text{ satisfies } \Psi \quad (5)$$

ただし、 \tilde{r}_0 は、式(4)における初期残差ベクトル $\tilde{b} - A\tilde{x}_0$ である。また、 $\mathcal{K}_j(A, \tilde{r}_0)$ は次の Krylov 部分空間を表すものとする。

$$\mathcal{K}_j(A, \tilde{r}_0) = \text{span}\{\tilde{r}_0, A\tilde{r}_0, \dots, A^{j-1}\tilde{r}_0\} \quad (6)$$

ここで、理想的な制約条件 Ψ は次式で与えることができるが、真の解 x を用いているため現実的とはいえない。

$$\Psi: \min \|\tilde{x}_j - x\|_2 \quad (7)$$

通常であれば、GMRES 法における制約条件 Ψ には、「相対残差ノルムが十分に小さくなる」という条件が用いられる。しかしながら、先に述べたように、離散型線形悪条件は右辺ベクトル b に摂動が生じやすく、かつ係数行列 A の条件数が大きく摂動に弱いという性質を持つ。さらに、GMRES 法では、各反復において係数行列 A と Krylov 部分空間の基底ベクトルとの掛け算を行う必要がある。そのため、反復を進めるごとに近似解 \tilde{x}_j に対する摂動の影響は増加していき、真の解 x との差は開いていく。また、反復を進めるほど近似解 \tilde{x}_j の滑らかさは失われ、摂動が大きくなることが考えられる。これは、残差ノルムが小さくなったとしても誤差ノルムは増大していく可能性を示唆する。よって、離散型線形悪条件問題では、残差ノルムを反復終了条件の指標として用いることは適当ではない。

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 を制約条件に用いることを提案している。しかし、Condition L-curve を利用するには、各反復において行列の条件数を計算する必要があり、行程が煩雑で計算コストがかかる。そこで本稿では、式(7)の最小二乗問題を用いる代わりに、新たに定義する Simplified Tikhonov 値を用いる手法を提案する。これは、GMRES 法に Tikhonov 正則化に基づいた制約条件を設けたもので、Simplified Tikhonov 値は反復終了条件に用いることができる。

3. Simplified Tikhonov 値を用いた GMRES 法の修正

古典的な GMRES 法を用いて連立 1 次方程式 (1) を解く場合, j 回目の反復における近似解 x_j について, 相対残差ノルム $\|b - Ax_j\|_2 / \|b - Ax_0\|_2$ 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, すでに述べたように, 離散型線形悪条件問題は摂動に弱く不安定である. さらに, 測定誤差を含む右辺ベクトル \tilde{b} に対して連立 1 次方程式を解いた場合, 相対残差ノルム $\|\tilde{b} - A\tilde{x}_j\|_2 / \|b - Ax_0\|_2$ が小さくなることは, 必ずしも近似解 \tilde{x}_j が真の解 x に近づくことを意味するものではない. 本稿では, 相対残差ノルムに代わる反復終了のための指標として, Tikhonov 正則化に基づいた値を新たに提案する. また, その値を式 (5) で表される問題における制約条件 Ψ に用いることで, 適当な近似解 \tilde{x}_j の決定を可能とする GMRES 法の算法を提案する.

3.1 Tikhonov 正則化

悪条件問題に対する正則化手法として従来から用いられている代表的なものに, Tikhonov 正則化¹²⁾ がある. 式 (4) に適用した場合には, 最小化問題

$$\min_{\tilde{x}} \{ \|\tilde{b} - A\tilde{x}\|_2^2 + \lambda \|L\tilde{x}\|_2^2 \} \quad (8)$$

を解くことで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, それぞれ Tikhonov 正則化パラメータ, Tikhonov 正則化行列と呼ばれている. 行列 L については, 単位行列 I や対角行列, 1 次または 2 次の微分を与えるようなものが用いられることが多い. I 以外は, \tilde{x} における摂動の影響を抑えることを目的としたものである. 適切な L の選定は, 問題に依存するため, 経験的に決定されることが多い. 本稿では議論を簡単にするため, L は I とする. λ に関しても, 定性的な決定法は存在せず, 問題によって適した値は異なる. そのため, 実際に Tikhonov 正則化を適用する際には, 細かく λ の値を変化させ, 近似解が滑らかになる値を探っていくこととなる. Krylov 部分空間法に関連した手法には, Lewis¹⁰⁾ 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, 我々は離散型線形悪条件問題に対する GMRES 法における制約条件 Ψ に式 (8) で表される Tikhonov 正則化を利用することを考える. ここで, GMRES 法の反復回数を j とし, 次のような値を提案する.

$$\log_j \|\tilde{r}_j\|_2^2 + \log_j \|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2^2 \quad (9)$$

Tikhonov 正則化は, パラメータを用いてバランスをとった残差ノルムと近似解ノルムの

和が最小となるように近似解を決定する手法である. つまり, 残差ノルムと近似解ノルムの影響力を, パラメータを用いて適切に調整することが重要となる. GMRES 法を用いる場合, 残差ノルムは反復回数の増加に応じて減少する. 一方, 離散型線形悪条件問題の特徴である, 係数行列 A の特異値がゼロ付近に多く分布する性質から, 反復回数が増えると, 右辺ベクトル \tilde{b} に含まれる誤差である摂動が, 小さな特異値によって増幅される. その結果, 近似解 \tilde{x}_j は増幅された摂動の影響で細かく大きな振動を持つことになり, ノルムは増大していく. そのため, 反復を進めるほど両者の大きさは離れていくことになる. 残差ノルムはゼロに近づいていくが, 近似解ノルムは発散していく. そこで, 両者の対数をとることで大きさのバランスをとることとした. その際, 残差ノルム, 近似解ノルムのいずれも反復回数 j に応じて一定の変化をする点に考慮し, 対数の底を j とした. また, 近似解のノルムを指標として用いるのは, 反復を進めることで生じる摂動の影響を測るためであった. そのため, GMRES 法で与える初期近似解 \tilde{x}_0 と反復で得られる近似解 \tilde{x}_j との差についてのノルム $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$ を測定することで, より純粋な摂動の影響を予測することにした.

ところで, 式 (9) は次のように変形できる.

$$\begin{aligned} & \log_j \|\tilde{r}_j\|_2^2 + \log_j \|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2^2 \\ &= 2 \log_j \|\tilde{r}_j\|_2 + 2 \log_j \|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2 \\ &= 2 (\log_j \|\tilde{r}_j\|_2 \|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2) \end{aligned}$$

ここで, Tikhonov 値 τ_j を次のように定義する.

$$\tau_j = \log_j \|\tilde{r}_j\|_2 \|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2 \quad (10)$$

さらに, 式 (10) の Tikhonov 値 τ_j に関する制約条件 Ψ_j を次式のように設定すれば, Tikhonov 正則化に基づいた正則化が可能となる.

$$\Psi_j : \tau_j < \tau_{j-1} \quad (11)$$

3.2 Simplified Tikhonov 値

本節では, 前節で与えた制約条件 Ψ_j を GMRES 法に組み込むことを考える. 制約条件 Ψ_j で利用される式 (10) の Tikhonov 値 τ_j は, 残差ノルム $\|\tilde{r}_j\|_2$ と, 近似解に関するノルム $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$ を要素とする値であった. これらの値について, GMRES 法を適用する過程で得られる近似値を用いることで, Tikhonov 値 τ_j の計算を簡素化できることを示す. さらに, 簡素化された Tikhonov 値を用い, GMRES 法の修正を提案する.

3.2.1 残差ノルムの近似値

まず, GMRES 法における残差ノルム \tilde{r}_j の近似を与える. 方程式 (4) に古典的な GMRES

法を適用した場合、係数行列 A と初期残差ベクトル \tilde{r}_0 を用いた Arnoldi 分解を次式で表す。

$$AV_j = V_{j+1}H_j \quad (12)$$

ただし、 $V_j \in \mathbb{R}^{n \times j}$ は Krylov 部分空間 $\mathcal{K}(A, \tilde{r}_0)$ の正規直交基底を列ベクトルに持つ行列、 $H_j \in \mathbb{R}^{(j+1) \times j}$ は上 Hessenberg 行列である。また、近似解 \tilde{x}_j は、行列 V_j を用いて次式で表すことができる。

$$\tilde{x}_j = \tilde{x}_0 + V_j \mathbf{y}_j \quad (13)$$

すると、残差ベクトルは、任意ベクトル $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^j$ 、初期近似解 \tilde{x}_0 を用いて、以下のように変形できる¹¹⁾。

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{b}} - A\tilde{x}_j &= \tilde{\mathbf{b}} - A(\tilde{x}_0 + V_j \mathbf{y}) \\ &= \tilde{\mathbf{r}}_0 - V_{j+1}H_j \mathbf{y} \\ &= V_{j+1}(\|\tilde{\mathbf{r}}_0\|_2 \mathbf{e}_1 - H_j \mathbf{y}) \\ &= V_{j+1}G_j^T G_j(\|\tilde{\mathbf{r}}_0\|_2 \mathbf{e}_1 - H_j \mathbf{y}) \\ &= V_{j+1}G_j^T(\tilde{\mathbf{g}}_j - R_j \mathbf{y}) \end{aligned}$$

ここで、Givens 回転行列 Ω_i に対し、行列 G_j は $G_j = \prod_{i=1}^j \Omega_i$ であり、直交行列となる。したがって、ベクトル $\tilde{\mathbf{g}}_j$ の最後の要素を $|\gamma_j|$ とすると、ベクトル $\tilde{\mathbf{g}}_j$ 、行列 R_j からそれぞれ最終行を除いたベクトル $\tilde{\mathbf{g}}'_j$ 、行列 R'_j を用いて、残差ノルムは次式のようになる。

$$\|\tilde{\mathbf{b}} - A\tilde{x}_j\|_2 = \|\tilde{\mathbf{g}}'_j - R'_j \mathbf{y}_j\|_2 + |\gamma_j| \quad (14)$$

$$\mathbf{y}_j = \underset{\mathbf{y}}{\operatorname{argmin}} \|\tilde{\mathbf{g}}'_j - R'_j \mathbf{y}\|_2 \quad (15)$$

ただし、ベクトル \mathbf{y}_j はノルム $\|\tilde{\mathbf{g}}'_j - R'_j \mathbf{y}\|_2$ を最小化する \mathbf{y} を表す。つまり、連立 1 次方程式 $R'_j \mathbf{y} = \tilde{\mathbf{g}}'_j$ の近似解である。よって、その残差ノルムである $\|\tilde{\mathbf{g}}'_j - R'_j \mathbf{y}_j\|_2$ は十分小さいと仮定でき、次の関係式が得られる。

$$\|\tilde{\mathbf{b}} - A\tilde{x}_j\|_2 \approx |\gamma_j| \quad (16)$$

すなわち、式 (16) は残差ノルムを $|\gamma_j|$ によって近似できることを示している。

3.2.2 近似解ノルムの近似

次に、近似解に関するノルム $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$ について考える。すでに述べたように、近似解 \tilde{x}_j は、式 (12) の Arnoldi 分解で得られる行列 V_j を用いて式 (13) で表すことができる。よって、次の関係が得られる。

$$\begin{aligned} \|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2 &= \|\tilde{x}_0 + V_j \mathbf{y}_j - \tilde{x}_0\|_2 \\ &\leq \|V_j \mathbf{y}_j\|_2. \end{aligned}$$

ただし、行列 V_j は正規直交行列であり、そのノルムは $\|V_j\|_2 = 1$ となる。よって、次式が成り立つ。

$$\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2 \leq \|\mathbf{y}_j\|_2 \quad (17)$$

3.2.3 Tikhonov 値の簡素化

残差ノルム $\|\tilde{\mathbf{r}}_j\|_2$ と近似解に関するノルム $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$ について、それぞれ式 (16)、式 (17) の関係が得られた。よって、Tikhonov 値 τ_j は、次のように近似することができる。

$$\begin{aligned} \tau_j &= \log_j (\|\tilde{\mathbf{r}}_j\|_2 \|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2) \\ &\approx \log_j (|\gamma_j| \|\mathbf{y}_j\|_2) \end{aligned}$$

ここで、Simplified Tikhonov 値 τ_j^S を次のように定義する。

$$\tau_j^S = \log_j (|\gamma_j| \|\mathbf{y}_j\|_2) \quad (18)$$

こうして、GMRES 法を適用する過程で現れる近似値を用いて Simplified Tikhonov 値 τ_j^S を表現することで、Tikhonov 値 τ_j を用いるよりも計算を簡素化することができる。具体的には、反復終了時以外の反復において、次の計算を省くことができる。

- 連立 1 次方程式 $R'_j \mathbf{y} = \tilde{\mathbf{g}}'_j$ を解く ($O(j^2)$)
- $\tilde{x}_j - \tilde{x}_0 = V_j \mathbf{y}_j$ を求める ($O(jn)$)
- ノルム $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$ を求める ($O(n)$)

3.3 算法の修正

Simplified Tikhonov 値を用いた制約条件 Ψ_j^S を、次式のように定義する。

$$\Psi_j^S : \tau_j^S < \tau_{j-1}^S \quad (19)$$

この制約条件 Ψ_j^S を用いて、次のように問題を定義する。

$$\min_{\tilde{x} \in \tilde{x}_0 + \mathcal{K}_j(A, \tilde{r}_0)} \|\tilde{\mathbf{b}} - A\tilde{x}\|_2 \quad \text{subject to } \tilde{x}_j \text{ satisfies } \Psi_j^S \quad (20)$$

つまり、Simplified Tikhonov 値 τ_j^S が増加しないように反復を進めることで、Tikhonov 正則化に基づいた近似解 \tilde{x}_j の構成を行う。Simplified Tikhonov 値 τ_j^S 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。すなわち、Simplified Tikhonov 値を GMRES 法の反復終了の指標とし、最適な近似解の自動決定を実現できることになる。

図 1 に、Simplified Tikhonov 値を用いて修正を行った GMRES 法を示す。ステップ 4 から 14 までが、Krylov 部分空間の正規直交基底を生成する過程である。その中で、まずステップ 11 で Simplified Tikhonov 値 τ_j^S を計算する。さらに、ステップ 12 で Krylov 部分空間の次元数が 2 より大きく、かつ Simplified Tikhonov 値が増加する場合、ステップ 14 で Krylov 部分空間の次元数を 1 つ落としたうえで反復を打ち切る。Simplified Tikhonov

```

Input    $A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \tilde{\mathbf{x}}_0, \tilde{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^n, m$ 
Output   $\tilde{\mathbf{x}}_j$ 
01:      $\tilde{\mathbf{r}}_0 := \tilde{\mathbf{b}} - A\tilde{\mathbf{x}}_0, \mathbf{v}_1 := \tilde{\mathbf{r}}_0$ 
02:     For  $j = 1, \dots, m$  do
03:          $\mathbf{w}_j := A\mathbf{v}_j$ 
04:         For  $i = 1, \dots, j$  do
05:              $h_{ij} := (\mathbf{w}_j, \mathbf{v}_i)$ 
06:              $\mathbf{w}_j := \mathbf{w}_j - h_{ij}\mathbf{v}_i$ 
07:         End for
08:          $h_{j+1,j} := \|\mathbf{w}_j\|_2$ 
09:          $\mathbf{v}_{j+1} := \mathbf{w}_j/h_{j+1,j}$ 
10:         Compute  $\mathbf{y}_j$  of (15)
11:         Compute  $\tau_j^S$  of (18)
12:         If  $j > 2$  and  $\tau_j^S > \tau_{j-1}^S$  then
13:             Set  $j = j - 1$  and break
14:         End for
15:          $\tilde{\mathbf{x}}_j := \tilde{\mathbf{x}}_0 + V_j \mathbf{y}_j$ 
    
```

図 1 Simplified Tikhonov 値を用いた修正 GMRES 法
 Fig. 1 The modified GMRES using Simplified Tikhonov value.

値 τ_j^S が増加しない場合には、設定した最大反復回数 m まで反復を続ける。そして、ステップ 16 で、最終的な近似解 $\tilde{\mathbf{x}}_j$ を計算する。以上が、Simplified Tikhonov 値を反復終了の指標とした GMRES 法となる。

4. 数値実験

本章では、数値実験を用いて、図 1 に示した Simplified Tikhonov 値を用いた修正 GMRES 法の有効性を確かめる。実験は次の計算環境で行った。

- 計算機：ThinkPad X201s
 - CPU：Intel(R) Core(TM) i7 2.13 GHz
 - OS：Ubuntu 10.10
 - プログラム言語：C 言語
 - コンパイラ：gcc 4.4.5
 - 精度：倍精度
 - 初期近似解： $\tilde{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{0}$
 - ベクトル $\mathbf{b}_{\text{error}}$ の要素：平均 0，分散 1.0×10^{-5} となる正規乱数
- 数値例として用いたのは、Hansen⁷⁾ の Regularization Tools で、テスト問題として用意

表 1 各数値例の性質

Table 1 Properties of numerical experiments.

	関数名	行列 A	条件数 $\ A^{-1}\ _2 \ A\ _2$
数値例 1	foxgood	対称	1.85×10^{19}
数値例 2	baart	非対称	2.55×10^{19}
数値例 3	gravity	非対称	1.80×10^{22}

された第一種 Fredholm 型積分方程式である。Regularization Tools は、離散型線形悪条件問題の解析に用いることのできる各種関数をまとめた MATLAB パッケージである。本稿では、用意されたテスト問題の中から、固有の現象を表すものではない標準的な第一種 Fredholm 型積分方程式として、係数行列 A が対称になるものと非対称になるものを 1 題ずつ選び、それぞれ数値例 1, 2 とした。さらに、実際の現象を表し、かつ係数行列 A が非対称となるものを数値例 3 で扱うことにした。各数値例の性質は、表 1 に示す。いずれの数値例においても、Regularization Tools の関数を用い、次元数 $n = 2048$ として得られた離散化データ A, b, x について、式 (20) の問題について考える。Regularization Tools の各関数の実行と、条件数の計算 (関数 cond) は、Octave3.2.4 上で行った。

各数値例において、Tikhonov 値 τ_j と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S の比較を行う。また、GMRES 法に対して、式 (7) の Ψ 、式 (11) の Ψ_j 、式 (19) の Ψ_j^S で示した各制約条件を適用した場合の、近似解決定の性能比較を行う。

4.1 数値例 1

次式で表される標準的な第一種 Fredholm 型積分方程式を考える。真の解は $f(t) = t$ である。

$$\int_0^1 (s^2 + t^2)^{\frac{1}{2}} f(t) dt = \frac{1}{3} \left((1 + s^2)^{\frac{3}{2}} - s^3 \right), \quad 0 \leq s \leq 1 \quad (21)$$

Octave 上で、foxgood(2048) を実行し、離散化データ A, b, x を得る。

まず、図 2、図 3、図 4 に従来の GMRES 法を適用した場合の結果を示す。図 2 は、相対残差ノルム $\|\tilde{\mathbf{r}}_j\|_2 / \|\tilde{\mathbf{r}}_0\|_2$ と、ノルム $\|\tilde{\mathbf{x}}_j - \tilde{\mathbf{x}}_0\|_2$ の反復回数に応じた変移である。前者が減少後に停滞しているのに対し、後者は増加し、両者の差が開いていく様子が分かる。図 3 は、反復回数に応じた Tikhonov 値 τ_j と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S の差 $|\tau_j - \tau_j^S|$ の変移を示している。反復回数が増えるごとに差は大きくなっているが、反復回数 20 回以内での差は 1.0×10^{-9} 以内に収まっている。よって、図に示す範囲では Simplified Tikhonov 値 τ_j^S の Tikhonov 値 τ_j に対する近似精度は十分といえる。図 4 は、真の解に対する相対誤差

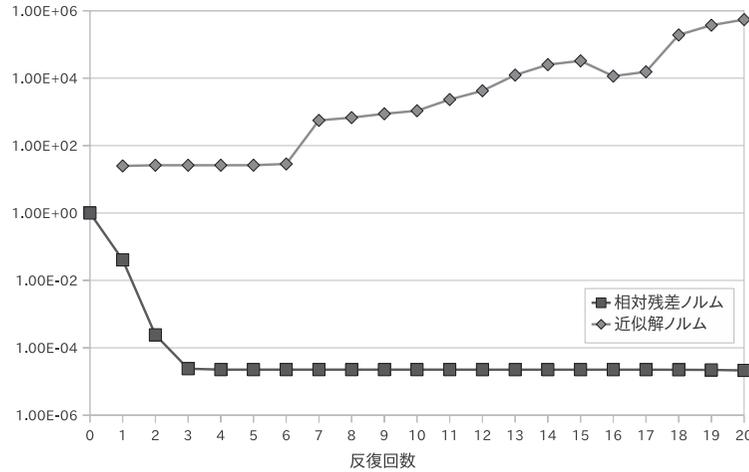


図 2 数値例 1 — GMRES 法における相対残差ノルム $\|\tilde{r}_j\|_2/\|\tilde{r}_0\|_2$ とノルム $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$
 Fig. 2 Numerical experiment 1: relative residual norm $\|\tilde{r}_j\|_2/\|\tilde{r}_0\|_2$ and norm $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$ by GMRES.

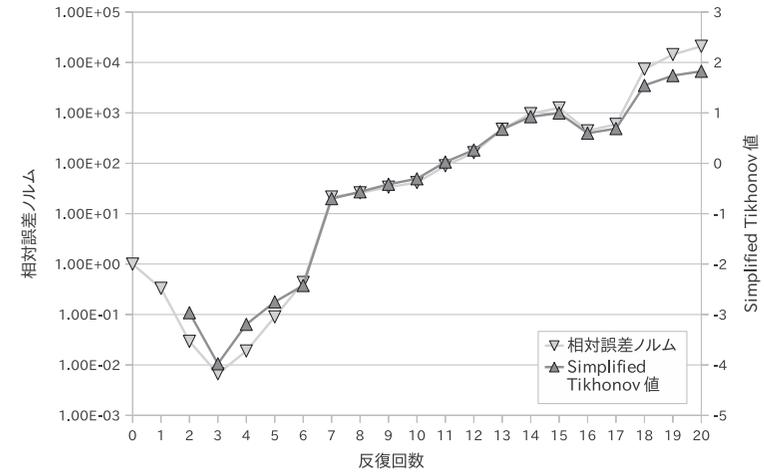


図 4 数値例 1 — GMRES 法における相対誤差ノルム $\|\mathbf{x} - \tilde{x}_j\|_2/\|\mathbf{x}\|_2$ と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S
 Fig. 4 Numerical experiment 1: relative error norm $\|\mathbf{x} - \tilde{x}_j\|_2/\|\mathbf{x}\|_2$ and simplified Tikhonov value τ_j^S by GMRES.

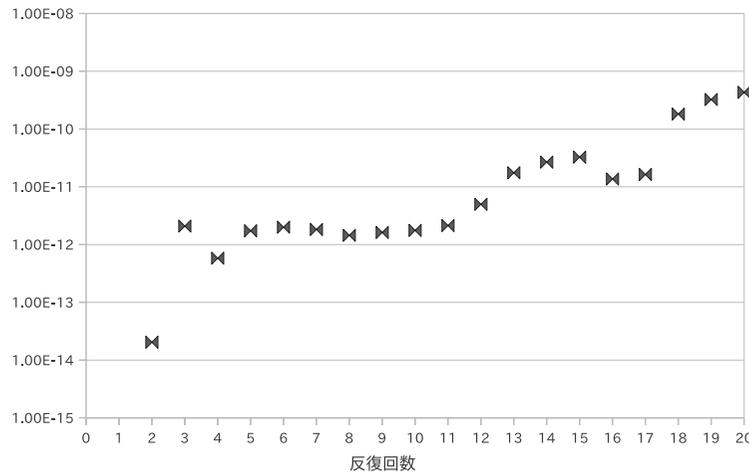


図 3 数値例 1 — GMRES 法における Tikhonov 値 τ_j と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S の差 $|\tau_j - \tau_j^S|$
 Fig. 3 Numerical experiment 1: distance between Tikhonov value τ_j and simplifie Tikhonov value τ_j^S by GMRES.

表 2 数値例 1 — GMRES 法の制約条件による性能比較
 Table 2 Numerical experiment 1 – comparison with each constraints for GMRES.

制約条件	反復回数	相対誤差ノルム	実行時間 (秒)
Ψ	3	6.66×10^{-3}	0.05
Ψ_j	4	6.66×10^{-3}	0.05
Ψ_j^S	4	6.66×10^{-3}	0.03

ノルム $\|\mathbf{x} - \tilde{x}_j\|_2/\|\mathbf{x}\|_2$ と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S の比較である。Simplified Tikhonov 値が、相対誤差ノルムの変移をとらえている様子が分かる。また、両者の値が最小となるタイミングは一致している。

次に、GMRES 法に対して、式 (7) の Ψ 、式 (11) の Ψ_j 、式 (19) の Ψ_j^S で示した各制約条件を課して近似解を決定した場合の比較を表 2 に示す。いずれも同等の相対誤差ノルムを達成している。図 4 とあわせて確認すると、Simplified Tikhonov 値は τ_4^S で初めて増加しているため、制約条件 Ψ_4^S によって、 $\tilde{x}_4 = \tilde{x}_3$ として最終的な近似解を決定したことが分かる。実行時間に関しては、Simplified Tikhonov 値 τ_j^S を用いた制約条件 Ψ_j^S によるものが、最も速かった。

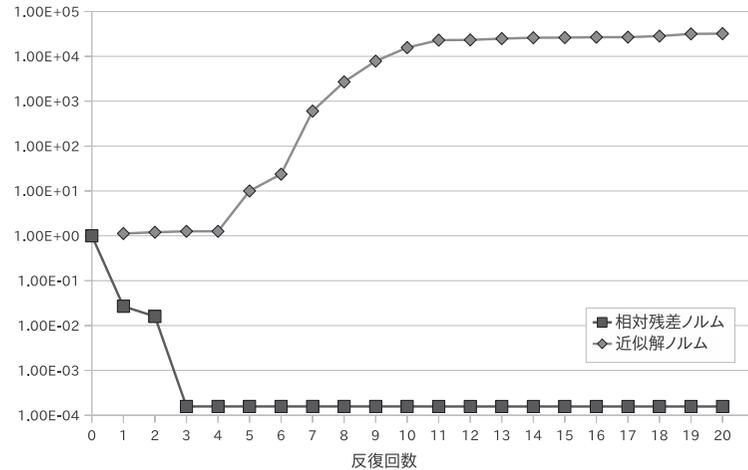


図 5 数値例 2 — GMRES 法における相対残差ノルム $\|\tilde{r}_j\|_2/\|\tilde{r}_0\|_2$ とノルム $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$
 Fig. 5 Numerical experiment 2: relative residual norm $\|\tilde{r}_j\|_2/\|\tilde{r}_0\|_2$ and norm $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$ by GMRES.

以上より、本数値例において Simplified Tikhonov 値と相対誤差ノルムが最小値をとるタイミングは一致していることが分かった。これは、Simplified Tikhonov 値が図 1 で示した修正算法において、反復終了条件として有効に働くことを意味する。

4.2 数値例 2

次の標準的な第一種 Fredholm 型積分方程式を考える。真の解は $f(t) = \sin t$ である。

$$\int_0^\pi \exp(s \cos t) f(t) dt = 2 \frac{\sin s}{s}, \quad 0 \leq s \leq \frac{\pi}{2} \quad (22)$$

Octave 上で、baart (2048) を実行することで離散化データ A, b, x を生成した。

まず、図 5、図 6、図 7 に従来の GMRES 法を適用した場合の結果を示す。図 5 は、相対残差ノルム $\|\tilde{r}_j\|_2/\|\tilde{r}_0\|_2$ と近似解ノルム $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$ の反復回数に応じた変移を示している。数値例 1 と同様、両者の差が徐々に開いていく様子が分かる。図 6 は、反復回数に応じた Tikhonov 値 τ_j と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S の差 $|\tau_j - \tau_j^S|$ の変移である。反復回数 20 回以内では、これらの値はいずれも 1.0×10^{-10} 未満であり、Simplified Tikhonov 値 τ_j^S は十分に Tikhonov 値 τ_j を近似しているといえる。図 7 は、相対誤差ノルム $\|x - \tilde{x}_j\|_2/\|x\|_2$ と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S の比較である。

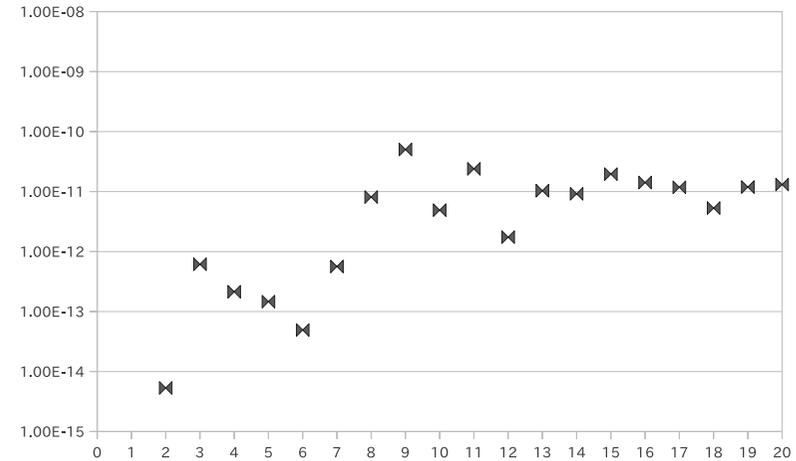


図 6 数値例 2 — GMRES 法における Tikhonov 値 τ_j と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S の差 $|\tau_j - \tau_j^S|$
 Fig. 6 Numerical experiment 2: distance between Tikhonov value τ_j and simplifie Tikhonov value τ_j^S by GMRES.

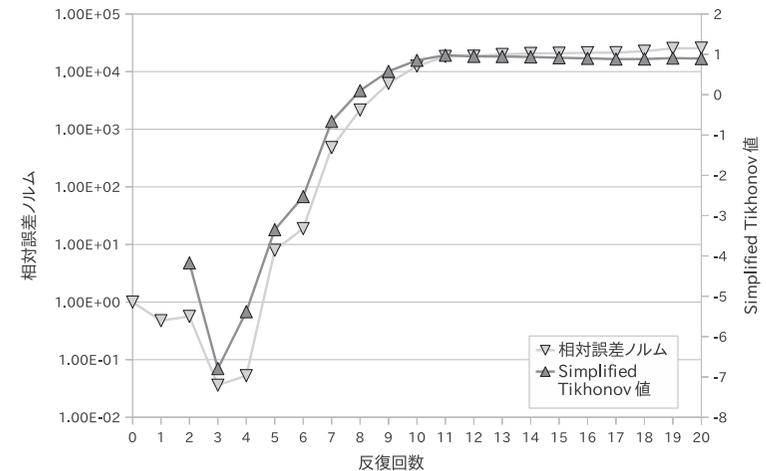


図 7 数値例 2 — GMRES 法における相対誤差ノルム $\|x - \tilde{x}_j\|_2/\|x\|_2$ と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S
 Fig. 7 Numerical experiment 2: relative error norm $\|x - \tilde{x}_j\|_2/\|x\|_2$ and simplified Tikhonov value τ_j^S by GMRES.

表 3 数値例 2 — GMRES 法の制約条件による性能比較

Table 3 Numerical experiment 2 – comparison with each constraints for GMRES.

制約条件	反復回数	相対誤差ノルム	実行時間 (秒)
Ψ	3	3.61×10^{-2}	0.05
Ψ_j	4	3.61×10^{-2}	0.05
Ψ_j^S	4	3.61×10^{-2}	0.04

次に, GMRES 法に対して, 式 (7) の Ψ , 式 (11) の Ψ_j , 式 (19) の Ψ_j^S で示した各制約条件を課して近似解を決定した場合の比較を表 3 に示す. 達成された相対誤差ノルムは, いずれの制約条件を用いた場合も一致した. 図 7 において, Simplified Tikhonov 値は 4 回目の反復で初めて増加していることが分かる. よって, 表 3 における値は, 制約条件 Ψ_4^S を用いて決定した近似解 \tilde{x}_4 に関するものである. 実行時間に関しては, Simplified Tikhonov 値 τ_j^S を用いた制約条件 Ψ_j^S によるものが, 最も速かった.

数値例 1 と同様, Simplified Tikhonov 値を用いることで, 相対誤差ノルム最小の近似解を決定し, かつ実行時間を短縮することができた.

4.3 数値例 3

重力探査の 1 次元モデルを表す, 次の第一種 Fredholm 型積分方程式を対象とする. 真の解は $f(t) = \sin(\pi t) + 0.5 \sin(2\pi t)$ である.

$$\int_0^1 (s^2 + t^2)^{\frac{1}{2}} f(t) dt = \frac{1}{3} \left((1 + s^2)^{\frac{3}{2}} - s^3 \right), \quad 0 \leq s \leq 1 \quad (23)$$

Octave 上で, 実行コマンド gravity(2048, 1, 0, 0.5) により離散化データ A, b, x を生成した.

まず, 図 8, 図 9, 図 10 に従来の GMRES 法を適用した場合の結果を示す. 図 8 は, 相対残差ノルム $\|\tilde{r}_j\|_2 / \|\tilde{r}_0\|_2$ とノルム $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$ の変移を表している. これまでと同様, 反復が進むごとに両者の差が大きく開いていく様子が分かる. 図 9 は, Tikhonov 値 τ_j と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S について, その差の絶対値 $|\tau_j - \tau_j^S|$ の変移を表している. 徐々に値は大きくなっているが, 20 回以内の反復では, いずれも 1.0×10^{-8} 未満であり, 十分に近似できている. また, 図 10 は, 相対誤差ノルム $\|x - \tilde{x}_j\|_2 / \|x\|_2$ と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S の比較である. どちらもグラフにおける谷の概形は一致しており, Simplified Tikhonov 値が相対誤差ノルムの減少をとらえている様子が分かる.

これまでと同様, GMRES 法に対して, 式 (7) の Ψ , 式 (11) の Ψ_j , 式 (19) の Ψ_j^S で示した各制約条件を課した場合の比較を表 4 に示す. 相対誤差ノルムは, 制約条件 Ψ_j, Ψ_j^S

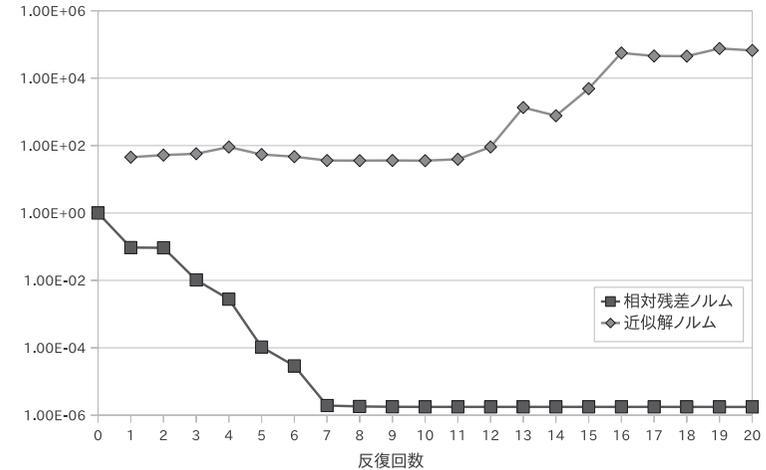


図 8 数値例 3 — GMRES 法における相対残差ノルム $\|\tilde{r}_j\|_2 / \|\tilde{r}_0\|_2$ とノルム $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$
Fig. 8 Numerical experiment 3: relative residual norm $\|\tilde{r}_j\|_2 / \|\tilde{r}_0\|_2$ and norm $\|\tilde{x}_j - \tilde{x}_0\|_2$ by GMRES.

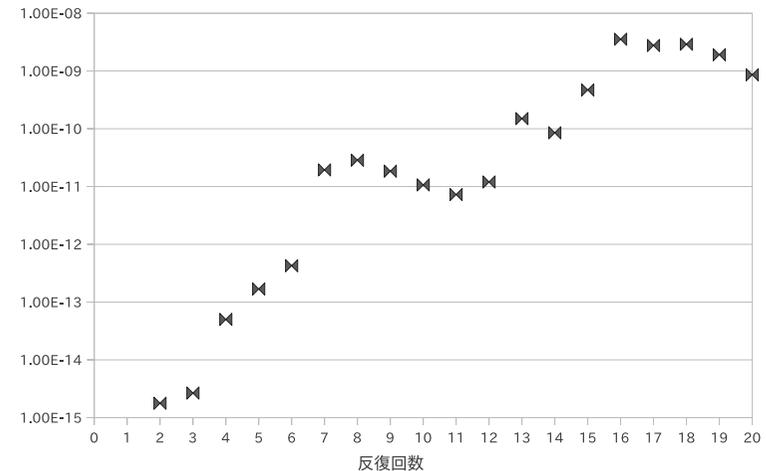


図 9 数値例 3 — GMRES 法における Tikhonov 値 τ_j と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S の差 $|\tau_j - \tau_j^S|$
Fig. 9 Numerical experiment 3: distance between Tikhonov value τ_j and simplifie Tikhonov value τ_j^S by GMRES.

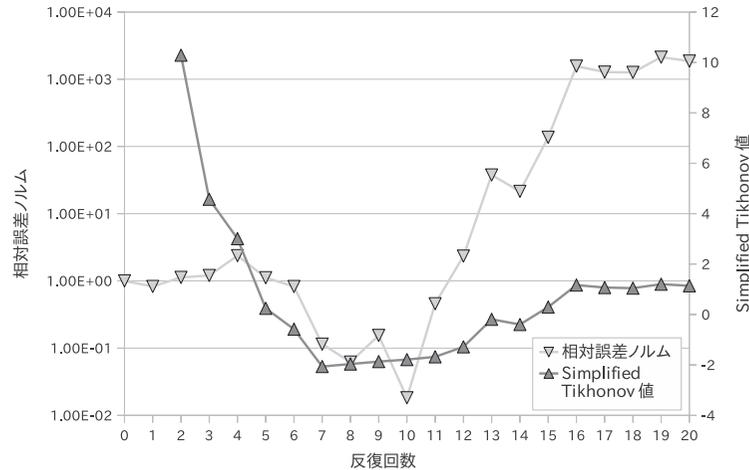


図 10 数値例 3 — GMRES 法における相対誤差ノルム $\|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}_j\|_2 / \|\mathbf{x}\|_2$ と Simplified Tikhonov 値 τ_j^S
 Fig. 10 Numerical experiment 3: relative error norm $\|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}_j\|_2 / \|\mathbf{x}\|_2$ and simplified Tikhonov value τ_j^S by GMRES.

表 4 数値例 3 — GMRES 法の制約条件による性能比較

Table 4 Numerical experiment 3 – comparison with each constraints for GMRES.

制約条件	反復回数	相対誤差ノルム	実行時間 (秒)
Ψ	10	1.84×10^{-2}	0.16
Ψ_j	8	1.15×10^{-1}	0.16
Ψ_j^S	8	1.15×10^{-1}	0.08

を用いた場合の方が，制約条件 Ψ を用いた際の最小値に比べて 9.66×10^{-2} 大きくなった．図 10 を見ると，Simplified Tikhonov 値が初めて増加するのは 8 回目である．よって，修正算法における最終的な近似解は $\tilde{\mathbf{x}}_8 = \tilde{\mathbf{x}}_7$ である．しかし，相対誤差ノルムが最小値をとるのは 10 回目の反復においてであり，実行時間に関しては，Simplified Tikhonov 値 τ_j^S を用いた制約条件 Ψ_j^S によるものが最短であったが，最適なタイミングで反復を終了させることはできなかったといえる．

4.4 考 察

数値例 1, 2 においては，Simplified Tikhonov 値 τ_j^S を用いた制約条件 Ψ_j^S によって，最適なタイミングでの反復終了を実現することができた．数値例 3 では，最適とはいえない

が，相対誤差ノルムが小さくなったタイミングで反復を終了できた．

Simplified Tikhonov 値の効果の差に関連して，各実験結果における Simplified Tikhonov 値の変化を比較してみる．数値例 1, 2 では反復終了の指標となる 1 度目の増加における変化量が数値例 3 における変化量に比べて大きくなっている．数値例 3 では，7 回目の反復から Simplified Tikhonov 値が増加しているが，11 回目までの変化量は，数値例 1, 2 に比べると非常に小さいことが分かる．

以上のことから，Simplified Tikhonov 値の初回の増加量が小さい場合には，「反復終了の最適なタイミングが測りにくくなる」という可能性が考えられる．こうした場合への対処法としては，制約条件 Ψ_j^S における Simplified Tikhonov 閾値の増加量に閾値を設定することなどがあげられる．

5. おわりに

本稿では，離散型線形悪条件問題に対する GMRES 法における近似解の決定のために，Simplified Tikhonov 値 τ_j^S を用いた制約条件 Ψ_j^S を提案し，算法の修正を行った．Simplified Tikhonov 値は，Tikhonov 正則化における指標となる値を，GMRES 法の反復の過程で現れる近似値を用いて簡略化したものであった．

数値実験では，Simplified Tikhonov 値を用いた修正 GMRES 法において，相対誤差ノルムが小さくなるタイミングで近似解を自動決定できることを示した．

今後の課題は，より最適な反復の自動終了を実現する新たな制約条件の提案，近似解の精度向上のための前処理の提案，実際の画像復元問題などへの適用や，並列化手法を用いた大規模問題への適用があげられる．

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) Hanke, M.: *Conjugate Gradient Type Methods for Ill-posed Problems, 2nd edition*, CRC Press (1995).
 - 7) 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).
 - 8) Hansen, P.C.: *Rank Deficient and Discrete Ill-Posed Problems*, SIAM, Philadelphia (1998).
 - 9) Kuroiwa, N. and Nodera, T.: Adaptive augmented GMRES method for solving ill-posed problems, *ANZIAM J.*, Vol.50, pp.C654–C667 (2009).
 - 10) Lewis, B. and Reichel, L.: Arnoldi-Tikhonov regularization methods, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol.226, pp.92–102 (2009).
 - 11) 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).
 - 12) Tikhonov, A.N.: Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method, *Soviet Math. Dokl.*, Vol.4, pp.1035–1538 (1963).

(平成 22 年 11 月 9 日受付)

(平成 23 年 6 月 3 日採録)



黒岩 奈保 (学生会員)

平成 21 年慶應大学大学院理工学研究科基礎理工学専攻修士課程修了。
同年より同博士課程。平成 22 年より日本学術振興会特別研究員 DC1。



野寺 隆 (正会員)

1982 年慶應義塾大学大学院工学研究科博士課程 (数理工学専攻) 修了。
現在, 同大学教授。その間, 1986 年より 1 年間米国スタンフォード大学
客員教授。大規模な行列計算の算法の研究開発に従事。ハイパフォーマンス・
コンピューティングや文書処理に興味を持つ。著書に『楽々 \LaTeX 』
(共立出版) 等がある。工学博士。エッセイスト。SIAM, 日本応用数理学

会会員。