

線形悪条件問題に対する修正 Augmented GMRES 法

黒岩 奈保^{†1} 野寺 隆^{†2}

線形悪条件問題に対する GMRES 法を修正する新しい条件を提案する。線形悪条件問題とは、逆問題のひとつである第一種 Fredholm 積分方程式の離散化によって得られる線形方程式である。対象となる問題は幅広く、近年活発に研究がなされている問題であるが、その困難な性質から克服すべき点は多く残っている。今回我々の提案する条件は、GMRES 法に関連した手法を線形悪条件問題に適用するもので、解法の安定性、解の精度、利便性の向上を実現するものである。それらの条件について提案し、数値実験によってその有効性を示す。

The modified augmented GMRES methods for linear discrete ill-posed problems

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

We will propose new rules of GMRES methods for linear discrete ill-posed problems. They are obtained from discretization of the Fredholm integral equation of the first kind, which is one of inverse problems. Recently, they are popular to discuss, but still there are a lot of difficulties to overcome. Our new rules are effective for GMRES methods in case of solving linear discrete ill-posed problems. They achieve the improvements of stability of GMRES methods, accurate of approximate solutions and utilities. We propose these conditions and show their effectiveness by some numerical experiments.

1. はじめに

GMRES 法とは、Saad ら⁶⁾ が提案した反復解法であり、線形方程式

^{†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

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

の係数行列 A が非対称である場合にしばしば用いられる。近年、線形悪条件問題に対する反復解法の適用が注目されており、多くの手法が提案されている。それらの多くは Krylov 部分空間法に属する共役勾配法 (CG 法) や GMRES 法に関連したものである。

線形悪条件問題に対してこれらの反復法を用いる場合に重要となるのが、反復を終了させ、近似解を決定する条件である。線形悪条件問題特有の性質により、従来の手法を適用することが困難なためである。これまで提案されている主な条件としては、Hansen⁵⁾ の提案した CG 法のための L-curve, Calvetti ら³⁾ の提案した GMRES 法のための condition L-curve がある。

本発表では GMRES 法やその改良版である RRGMRRES 法, Augmented GMRES 法に対して適用可能な condition l-curve に代わる新しい条件を提案する。まずは背景として線形悪条件問題について述べ、新しい条件を提案する。そして数値実験を用いてその有効性を示し、最後に結論を述べる。

2. 線形悪条件問題

逆問題とは、観測結果などの出力から元の状態である入力を予測する問題である。逆問題の 1 つである第一種 Fredholm 積分方程式

$$g(t) = \int_a^b K(t, s)f(s)ds$$

を離散化すると、線形方程式 (1) の形をした線形悪条件問題が得られる。具体的には非鮮明な画像の復元や火山内部の予測などが該当し、社会的な関心が高く解明が急がれる現象が多い。しかし、係数行列 A の特異値がゼロ付近に密集して現れることから、ほぼ非正則な行列になることが知られている。また逆問題の性質上、右辺ベクトル b は多くの場合に測定誤差 b_{error} を含むため

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

となり、純粋な b を知ることはできない。そこで、線形離散悪条件問題に GMRES 法を用いる場合、誤差を含む \tilde{b} に対して最小二乗問題

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

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

を解くことになる。ただし、 \tilde{r}_0 は初期残差 $\tilde{b} - A\tilde{x}$, j は反復回数を表す。

2.1 線形悪条件問題に対する GMRES 法

線形悪条件問題を解くために GMRES 法を用いる場合、標準的な GMRES 法よりも有利となる改良版が用いられる。主な手法として、Calvetti ら²⁾ による RRGMRRES 法、Baglama ら¹⁾ による Augmented GMRES/RRGMRES 法を挙げることができる。

RRGMRES 法は

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

$$\mathcal{K}_j(A, A\tilde{r}_0) = \text{span}(A\tilde{r}_0, A^2\tilde{r}_0, \dots, A^j\tilde{r}_0)$$

と表され、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精度を高めるものである。Augmented GMRES/RRGMRES 法は Krylov 部分空間にユーザーの定める任意の空間を付加する手法で

$$\|\tilde{b} - A\tilde{x}_j\|_2 = \min_{\tilde{x}_0 + \mathcal{K}_j + W} \|\tilde{b} - A\tilde{x}\|_2$$

と表される。いずれの手法も線形悪条件問題に対する有効性は確かめられているが、GMRES 法の部分的な改良にとどまっておき、そのまま線形悪条件問題に適用した場合、自動的に反復を終了し近似解を決定することができない。

2.2 Condition L-curve

GMRES 法を線形悪条件問題に適用する際、condition L-curve を用いることで反復により求まった近似解の中から最適な近似解を決定することができる。Condition L-curve は、CG 法に対する L-curve に倣った条件であり、右辺ベクトル \tilde{b} に含まれる測定誤差に起因する誤差と、係数行列 A の条件の悪さに起因する誤差とのバランスをとり、それらの誤差の影響が最小になるように近似解を決定する。

まず、ランク落ちが発生しない程度に反復回数が少ない、という仮定の下で

- 残差が反復ごとに単調減少すること
- Arnoldi 過程で現れる Hessenberg 行列の条件数が反復ごとに単調増加すること

を利用し、それぞれの値を縦軸、横軸にとったグラフを作成する。そして、そこで現れる L 字カーブの角にあたる反復が、最適な近似解を構成する。

しかし、ランク落ちが発生しない程度の反復回数を予め決定するには QR 分解などを用いて計算する必要があるし、その程度の反復回数では十分な精度が得られない。条件数を計算するにも手間がかかる。また、「Arnoldi 過程で現れる Hessenberg 行列の条件数が反復ごとに単調増加する」という条件は、RRGMRES 法には当てはまるが、Augmented GMRES/RRGMRES

法では保証されていない。理由は以下の变形で不都合が生じるためである。標準的な GMRES 法に対する condition L-curve は、正規直交行列 \tilde{V}_j 、上 Hessenberg 行列 \tilde{H}_j として、Arnoldi 分解

$$A\tilde{V}_j = \tilde{V}_{j+1}\tilde{H}_j$$

から得られる $\|\tilde{A}_j\|_2 = \|\tilde{H}_j\|_2, \|\tilde{A}_j^\dagger\|_2 = \|(\tilde{H}_j)^\dagger\|_2$ を利用する。しかし、Augmented GMRES/RRGMRES 法では、付加空間を現す行列 W を用い、Arnoldi 分解は以下のようになる。

$$A[W, \tilde{V}_j] = \tilde{V}_{j+1}\tilde{H}_j.$$

よって、condition L-curve で用いるための条件が揃わない。そこで線形悪条件問題に GMRES 法やその改良版を適用した場合の特性に着目し、反復の終了と近似解の決定を自動的に行うための条件を提案する。

3. 修正 Augmented GMRES 法

3.1 反復終了と近似解決定の自動化

係数行列 A が正則、かつ正確な右辺ベクトル b が分かっているのであれば、残差ノルムが求める精度に達した時点で反復を終了することができる。しかし、線形悪条件問題においてはいずれの条件も満たされない。なので、単に残差ノルムに注目するだけでなく、新たに以下の 4 つの条件を設定する。

- 正確な残差ノルムを得る
- 残差ノルムを単調に減少させる
- 残差ノルムの停滞を回避する
- 反復を終了し、近似解を決定する

これらの条件を設定することで、条件数を計算することなく、また RRGMRRES 法や Augmented GMRES/RRGMRES 法といった GMRES 法の改良版においても自動的に反復を終了し、近似解を決定することができる。

3.1.1 正確な残差を得る

GMRES 法における残差は、改良版のものも含め、一般に

$$\|r_j\|_2 = \|g' - R'y_j\|_2 + |y|$$

$$y_j = \underset{y}{\operatorname{argmin}} \|g' - R'y_j\|_2$$

と表される。係数行列 A が正則であれば

$$\|g' - R'y_j\|_2 \approx 0$$

となるので、通常 GMRES 法の各反復における残差ノルムには、 $\|y\|$ の値を用いる。

ところが、線形悪条件問題では係数行列はほぼ非正則であるため、途中で行列 R がランク落ちしてしまう場合がある。すると、

$$\|g' - R'y_j\|_2 \neq 0$$

となり、残差ノルムとして $\|y\|$ の値を用いることはできない。

そこで、線形悪条件問題を解く際には、毎回の反復で正確な残差ベクトル

$$\tilde{r}_j = \tilde{b} - A\tilde{x}_j$$

を計算することとする。

3.1.2 残差を単調に減少させる

GMRES 法の重要な性質のひとつに、残差が単調に減少することがあげられる。これは先に述べた残差ノルム $\|r_j\|_2 \approx |y|$ において、

$$|y| = |s_j \dots s_1| \|r_j\|_2, |s_i| \leq 1$$

となるためである。

しかし、RRGMRES 法、Augmented GMRES/RRGMRES 法においては

$$|y| = | -s_j \|r_{j-1}\|_2 + c_j(v_{i+1}, r_0) |, s_j^2 + c_j^2 = 1$$

となることから残差ノルムの単調減少が保証されていないことがわかる。

また、係数行列 A がほぼ非正則となる線形悪条件問題においては、残差ノルムを $|y|$ で表すことはできないので、標準的な GMRES 法、改良版の GMRES 法双方において、残差ノルムが単調に減少することは保証されない。そこで、毎反復ごとに残差ノルムを確かめ、1 つ前の残差ノルムよりも残差が大きくなった場合には、全ての値を 1 つ前の反復の状態に戻し、リスタートすることとする。

3.1.3 残差の停滞を回避する

残差ノルムの変化が一定以下になった場合、全ての値を 1 反復前の状態に戻し、リスタートすることとする。

3.1.4 反復を終了し、近似解を決定する

3.1.2, 3.1.3 がそれぞれ 2 回連続で起きた場合には反復を終了し、最新の反復解を近似解として決定する。

3.2 アルゴリズム

図??に修正 Augmented GMRES 法のアルゴリズムを示す。 $p = 0$ とすれば標準的な GMRES 法、または RRGMRRES 法を任意に選択して行う。従来の算法との違いは、ステップ 18 から 29 に現れている。

```

Input   $A \in \mathbb{R}^{n \times n}, b \in \mathbb{R}^n, W \in \mathbb{R}^{n \times p}, j, inc = 0, stag = 0$ 
Output  $x_j$ 
01:    $r_0 := b - Ax_0, v_{p+1} := r_0$ 
02:   if RRGMRRES then
03:      $v_{p+1} := Ar_0$ 
05:   if  $p > 0$  then
06:      $AW = V_p H_i$  (QR factorization)
07:      $v_{p+1} := (I - V_p V_p^T) v_{p+1}$ 
09:    $v_{p+1} := v_{p+1} / \|v_{p+1}\|_2$ 
10:   for  $k = p + 1, \dots, j$  do
11:      $w_k := Av_k$ 
12:     for  $i = 1, \dots, k$  do
13:        $h_{ik} := (w_k, v_i)$ 
14:        $w_k := w_k - h_{ik} v_i$ 
15:     end for
16:      $h_{k+1,k} := \|w_k\|_2$ 
17:      $v_{k+1} := w_{k+1} / h_{k+1,k}$ 
18:     Compute  $y_j$  of  $\min_{y \in \mathcal{R}^{p+j}} \|V_{p+j+1}^T b - Hy\|$ 
19:      $x_j := x_0 + [WV_{p+1:p+j}] y_j$ 
20:      $r_j := b - Ax_0$ 
21:     if  $\|r_j\|_2 > \|r_{j-1}\|_2$  then
22:        $inc ++, x_0 = x_{j-1}$  and break
23:     else if  $\|r_j\|_2 = \|r_{j-1}\|_2$  then
24:        $stag ++, x_0 = x_{j-1}$  and break
25:     else if  $inc > 0$  then  $inc = 0$ 
26:     else if  $stag > 0$  then  $stag = 0$ 
27:   end for
28:   if  $\|r\|_2 < tolerance$  then stop iteration and determine approx.
29:   if  $inc > 1 \| stag > 1$  then stop iteration and determine approx.

```

図 1 線形離散悪条件問題のための修正 GMRES 法

まず、従来は $|y|$ を近似残差ノルムとして用いていたため、リスタート周期ごとに近似解 x_k の計算を行っていたが、修正アルゴリズムでは各反復ごとに正確な残差が必要となり、 $|y|$ が利用できないことから、近似解 x_k の計算の計算が内部反復に含まれるようになった（ステップ 18 – 20）。

更に、求めた正確な残差ノルムをもとに、残差の増加（ステップ 21）または停滞（ステップ 23）を察知し、リスタートするタイミングを決定している。

内部反復を脱した時点で残差ノルムが十分に小さくなっていれば反復を終え、その時点での x を近似解とする（ステップ 28）しかし線形悪条件問題において、実際にこのステップ 28 に当てはまることは稀である。そこでステップ 29 において連続した残差の増加、または停滞を判定し、各条件に該当した場合は直ちに反復を終了し、近似解を決定することとする。

これらの新たな条件により、修正 Augmented GMRES 法ではユーザーが解法のパラメータを意識したり、膨大な結果を比較検討することなく、良い精度を持った近似解を自動的に得ることが可能となっている。

4. 数値実験

線形悪条件問題に対して GMRES 法、RRGMRES 法、Augmented GMRES/RRGMRES 法を適用し今回提案した条件の有効性を確かめる。実験環境は以下のようである。

プログラム言語 C 言語

CPU Dual-Core Intel Itanium 2 1.4GHz

OS SUSE Linux Enterprise Server 9 SP3

各手法において 4 タイプの空間付加、リスタート周期 m を 1 から 50 と変化させ、それぞれの問題において 200 パターンの実験を行った。

空間付加に用いる行列は、

$$W_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}, \quad W_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & n \end{bmatrix}, \quad W_3 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & n & n^2 \end{bmatrix},$$

$$\mathcal{W}_p = \text{range } W_k, \quad 0 \leq p \leq 3,$$

である。 $p = 0$ の際は、空間付加を行わないものとする。

表 1 条件数と相対残差ノルム

問題	相対残差ノルム	新条件			
		有り		無し	
		GMRES	RRGMRES	GMRES	RRGMRES
phillips	< 1	200	200	5	5
	= 1	0	0	0	0
	> 1	0	0	195	195
ilaplace	< 1	200	200	8	8
	= 1	0	0	0	0
	> 1	0	0	192	192

4.1 実験 1

関数

$$\phi(x) = \begin{cases} 1 + \cos\left(\frac{\pi x}{3}\right), & |x| < 3 \\ 0, & |x| \geq 3 \end{cases}$$

に対し、

$$g(t) = \int_a^b K(t, s)f(s)ds$$

$$K(s, t) = \phi(s - t)$$

$$f(t) = \phi(t)$$

$$g(s) = (6 - |s|) \left(1 + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi s}{3}\right) \right) + \frac{9}{2\pi} \sin\left(\frac{\pi|s|}{3}\right)$$

のような線形悪条件問題を解く。これは、Hansen⁴⁾ のテスト問題 phillips である。 $n = 500$ で離散化すると、係数行列 A の条件数は $1.65e + 9$ となる。

表 1 を見ると、新しい条件を用いない場合は 200 パターン中 5 パターンしか相対残差が減少していないのに対し、新条件を用いた場合の結果は、相対残差はすべてのパターンで減少している。このことから、新条件により線形悪条件問題に対する GMRES 法の安定性が向上していることがわかる。

図 2, 3 は新条件を用いた場合に 200 パターン中一番結果の良かった空間付加に W_2 を用い、リスタート周期 m を 37 とした場合の各値を示している。

図 2 は新条件を適用しない場合の正確な残差と γ とを比較したもので、 γ が残差を近似できていない様子を表している。

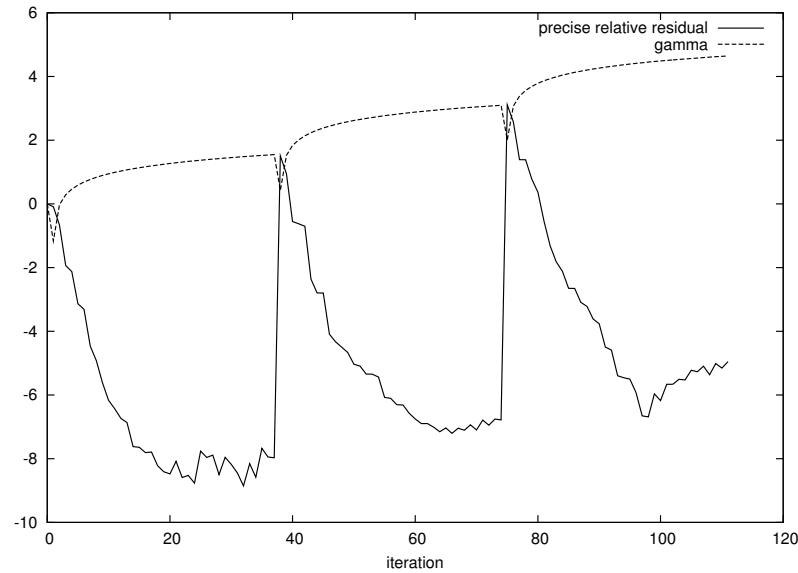


図2 数値実験 1 ($p = 2, m = 37$): 正確な残差ノルムと近似残差ノルム $|\gamma|$ の比較

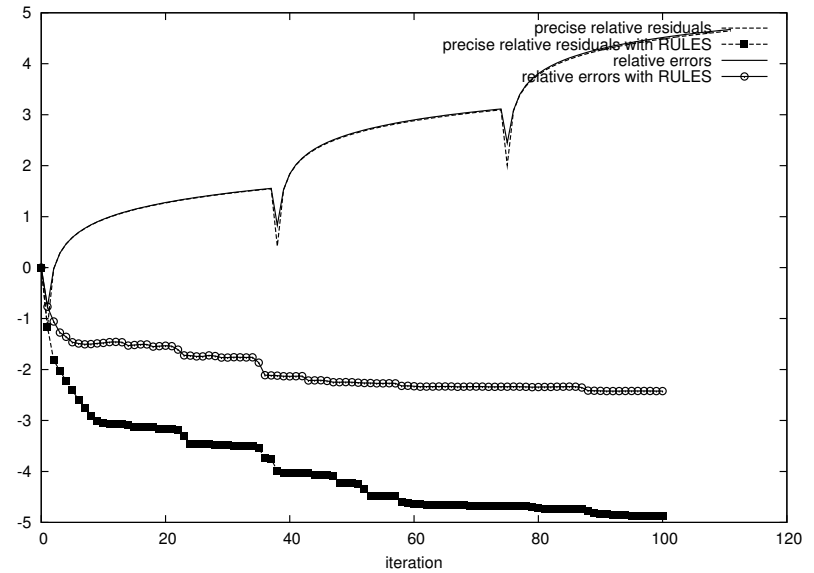


図3 数値実験 1 ($p = 2, m = 37$): 新条件を用いた場合と用いない場合の相対誤差ノルムと相対誤差ノルム比較

図3は新条件を用いる場合と用いない場合の、相対誤差ノルムと相対誤差ノルムの動きを表している。この図から、新条件を課すことで残差が減少していく様子がわかる。また、完全には一致しないまでも相対残差の動きと相対誤差の動きが対応している様子も見て取れる。

4.2 実験 2

Hansen⁴⁾ のテスト問題より、ilaplace

$$g(t) = \int_a^b K(t, s)f(s)ds$$

$$K(s, t) = \exp(-st)$$

$$f(t) = t^2 \exp(-t/2)$$

$$g(s) = \frac{2}{(s + 1/2)^3}$$

という線形悪条件問題を解く。 $n = 500$ で離散化すると、係数行列 A の条件数は無限大と

なる。

表1から、新条件を適用することで、相対残差が減少新条件を見せるパターンが、適用しない場合の200パターン中8パターンから課した場合の200パターン中200パターンへと大幅に増えていることがわかる。新条件がGMRES法の安定性向上に貢献しているためと考えられる。

図4, 5は新条件を用いた場合に200パターン中一番結果の良かった空間付加を行わず、リスタート周期 m を27とした場合のものである。

図4は新条件を用いない場合の正確な残差と γ とを比較している。この図は、 γ が残差を近似できていないことを示している。

図3は新条件を適用する場合と適用しない場合での、それぞれの相対誤差ノルムと相対誤差ノルムを表している。新条件により解の精度が向上している様子がわかる。また、相対残差の動きと相対誤差の動きが対応していることもうかがえる。

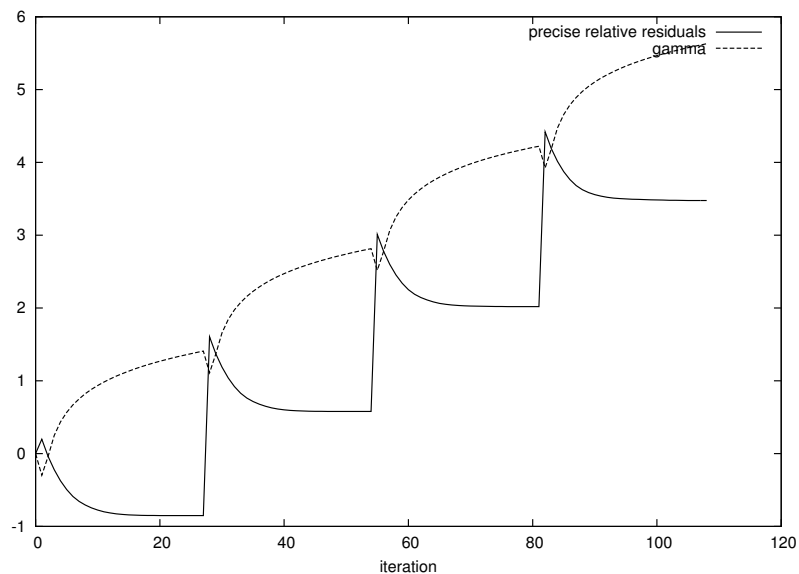


図 4 数値実験 2 ($p = 0, m = 27$): 正確な残差ノルムと近似残差ノルム $|\gamma|$ の比較

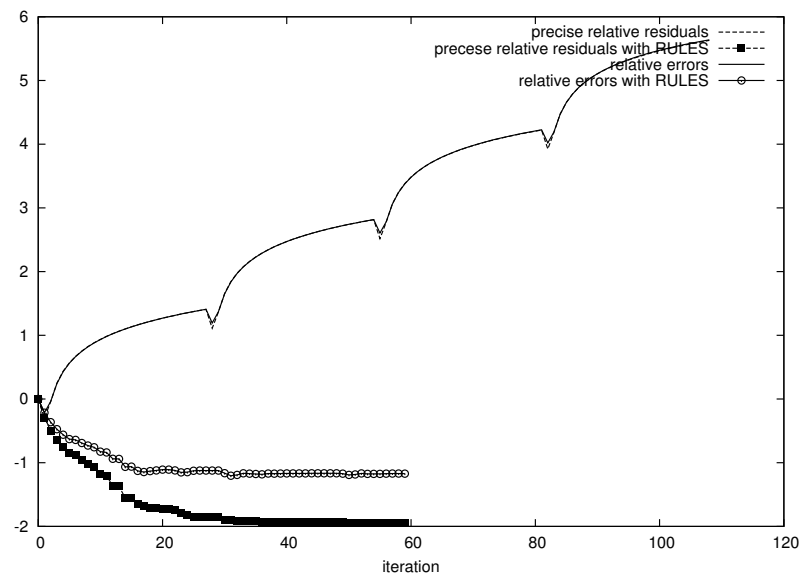


図 5 数値実験 2 ($p = 0, m = 27$): 新条件を用いた場合と用いない場合の相対誤差ノルムと相対誤差ノルム比較

5. おわりに

線形悪条件問題に対する GMRES 法に関連した手法に対し、4 つの新条件を提案した。それらは解法の安定性を向上させ、近似解の精度も向上させるものである。また、反復の終了と近似解の決定は条件により自動的に行うことができるようになったため、ユーザーの利便性も向上したといえる。

今後の課題は、正確な残差を計算するコストの削減、更なる精度の向上、大規模問題へ適用するための並列化の実装などが挙げられる。

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) Calvetti, D., Lewis, B. and Reichel, L.: GMRES-type methods for inconsistent systems,

- Linear Algebra and its Applications*, Vol.316, pp.157–169 (2000).
- 3) 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).
- 4) 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).
- 5) Hansen, P.C.: *Rank Deficient and Discrete Ill-Posed Problems*, Monographs on Mathematical Modeling and Computation, SIAM, Philadelphia (1998).
- 6) Saad, Y. and Schultz, M.H.: GMRES: A generalized minimal residual method for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, Vol.7, No.3, pp.856–869 (1986).