氏　　　　名	CUI　XIAOKE
学位（専攻分野）	博士（情報学）
学 位 記 番 号	総研大 1286 号
学位授与の日付	平成２１年９月３０日
学位授与の要件	複合科学研究科　情報学専攻 学位規則第６条第１項該当
学 位 論 文 題 目	Approximate Generalized Inverse Preconditioning Methods for Least Squares Problems
論 文 審 査 委 員	主　　査　　教授　　速水　謙 教授　　佐藤　真一 准教授　　宇野　毅明 教授　　土谷　隆 教授　　杉原　正顯（東京大学）

A basic problem in science is to fit a model to observations subject to errors. It is clear that the more observations that are available the more accurate will it be possible to calculate the parameters in the model. This gives rise to the problem of "solving" an over-determined linear or nonlinear system of equations. When enough observations are not available, it gives rise to under-determined systems. Over-determined systems together with under-determined systems are called *least squares problems*. It can be shown that the solution which minimizes a weighted sum of the squares of the residual is optimal in a certain sense. These solutions are called *least squares solutions*.

Least squares problems are usually written in the form $\min_{x \in R^n} \|b - Ax\|_2$, $A \in R^{m \times n}$, $b \in R^n$ where the norm $\|\cdot\|_2$ stands for 2-norm. When A is large and sparse, it is advantageous to apply iterative methods to the normal equations $A^T(Ax - b) = 0$ or $AA^T y - b = 0$. However, iterative methods usually suffer from slow convergence when A is ill-conditioned, since the condition number of $A^T A$ or AA^T is the square of that of A. Hence, when A is ill-conditioned, preconditioning for the iterative methods becomes necessary.

In this thesis, we consider constructing preconditioners for some Krylov subspace iterative methods to solve least squares problems more efficiently. We especially focused on one kind of preconditioners, in which preconditioners are the approximate generalized inverses of the coefficient matrices of the least squares problems. We proposed two different approaches for constructing such approximate generalized inverses of the coefficient matrices: one is based on the *Minimal Residual* method. For this approach, the minimal residual method with the steepest descend direction is used to minimize the norm $\min_{M} \|I - MA\|_F$, $A \in R^{m \times n}$, $M \in R^{n \times m}$, where $\|\cdot\|_F$ stands for the Frobenius norm. The other is based on the *Greville's Method* which is an old method developed for computing the generalized inverse based on the rank-one update proposed in 1960s. We perform the Greville's method incompletely to construct a sparse approximate generalized inverse of A and use it as a precondtioner M. After we obtain the preconditioner M, we use M to precondition the original least squares problem, to obtain the linear system $M(Ax - b) = 0$ (left preconditioning case) or $AMy - b = 0$ (right preconditioning case).

In this thesis, we chose to use the GMRES method to solve the preconditioned linear systems based on the results proposed by Prof. Hayami. According to our preconditioning algorithms, our preconditioner M can be rank deficient when A is rank deficient. Our theoretical analysis shows that no matter A and M are rank deficient or not, the original least squares problem is equivalent to the preconditioned problem when our assumptions are satisfied. Our proof is based on verifying the two conditions proposed in Hayami's paper: $\Re(A) = \Re(M^T)$ and $\Re(M) = \Re(A^T)$, where $\Re(X)$ stands for the range space of matrix X. We also proved that under certain assumptions, if the GMRES method is used to solve the preconditioned linear systems, the GMRES will not break down before a solution is found. Besides the theoretical considerations, we also discuss how to implement the preconditioners practically. In the Greville's Method, we need to judge which column of A is linearly dependent on its previous columns and which column is a linearly independent column. When the numerical droppings are performed, this is difficult. In the thesis, we show how to define a threshold so that we can detect the linearly dependent columns of A relatively more precisely. Our numerical tests showed that our methods performed competitively for rank deficient ill-conditioned problems.

As an example of problems from the real world, we apply our preconditioners to the linear programming problems. To solve large scale linear programming problems, the *Interior-point method* is widely used. From an initial solution, by solving a linear system in each step of the interior-point method, a correction vector is computed and used to update the current approximate solution to obtain the next better approximate solution. In the interior-point method, the linear system is traditionally solved by using the Cholesky decomposition method. However, when the approximate solution approaches the true solution, the linear system becomes more and more ill-conditioned. In this case, computing the Cholesky decomposition is unstable and possibly breaks down. In this thesis, instead of solving the linear system directly, we take it as a normal equation of a least squares problem. By doing so, we can use our preconditioner to precondition the corresponding least squares problem and solve the preconditioned problem by the GMRES method. By using our method, we can solve the linear systems accurately even when the approximate solution is close to the true solution, so that the interior-point method becomes more robust.

博士論文の審査結果の要旨

最小二乗問題の解法は科学、工学を初めとする諸科学において基本的で重要である。特に近年大規模な問題を扱う必要が増し、それを可能にする計算機の発展は著しい。従って、そのような計算機の能力を生かして大規模な最小二乗問題を解くアルゴリズムの開発が求められている。また、大規模な最小二乗問題は多くの場合、疎行列を係数行列としてもつ。このような大規模疎な最小二乗問題を扱うには反復解法が有効である。本論文では特に前処理付きクリロフ部分空間反復法に着目し、ランク落ちも含めた悪条件の問題に対して有効な、近似一般化逆行列に基づいた前処理付きクリロフ部分空間反復法を提案し、その有効性を理論と数値実験および応用の両面から検討している。

論文は英文１３３頁、７章から構成されている。１章で論文全体を概観し、２章で一般化逆行列について触れ、３章で最小二乗問題の従来の直接解法および反復解法のサーベイを行っている。

４章ではまず、最小二乗問題 $\min_x \| b - Ax \|_2 \ (A \in R^{m \times n})$ に対して$\| I_n - MA \|_F$ または$\| I_m - AM \|_F$ が小さくなるような近似一般化逆行列$M \in R^{n \times m}$を最急降下法を用いて構成し、最小二乗問題$\min_x \| Mb - MAx \|_2$ または$\min_z \| b - AMz \|_2, x = Mz$ を、一般化最小残差法(GMRES法：Generalized Minimal Residual Method)などの（正方な係数行列をもつ）連立一次方程式に対するクリロフ部分空間反復法を用いて解くことを提案している。次に、同手法が破綻することなく、最小二乗解に収束するための十分条件を導いている。最後に、数値実験により、提案手法が従来の（対角前処理付き）ＣＧＬＳ法(Conjugate Gradient Least Squares method)と比較して、条件の悪い問題や右辺bが複数ある場合に高速であることを示している。（この部分については*Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics* にCui氏の主著論文が掲載済みである。）

５章は本論文の主要部分である。ここではGrevilleによる（ランク落ちを含めた）長方行列に対して一般化逆行列を求めるアルゴリズムにおいて、列ベクトルの一次独立性の判定、および行列の要素を無視するための閾値をそれぞれ設けることにより、近似一般化逆行列$M \in R^{n \times m}$を求めることを提案している。また、行列Aがフルランクの場合は同手法が従来のRobust Incomplete Factorization (RIF)に相当することを示している。さらに、この近似一般化逆行列Mを左または右前処理行列として、最小二乗問題$\min_x \| Mb - MAx \|_2$ または$\min_z \| b - AMz \|_2, x = Mz$ に適用し、一般化最小残差法(GMRES法：Generalized Minimal Residual Method)で解くことを提案している。また、近似一般化逆行列を求める際にAの全ての一次独立な列（行）ベクトルが検出されれば、元の最小二乗問題の解が破綻することなく求まることを示している。最後に、提案したアルゴリズムの有効性を数値実験により示している。 Florida University Sparse Matrix Collectionのランク落ちした行列で、特に条件の悪い問題に対しては従来の対角スケーリングを施したCGLS法より提案手法は高速である。（この部分についてはALGORITMY2009のProceedingsとして掲載済みで、現在６章の内容とともに英文誌への投稿を準備中である。）

６章では提案アルゴリズムの、線形計画問題の内点法による解法への応用を検討している。主双対内点法の各反復を等価な最小二乗問題ととらえて提案アルゴリズムを用いて解くことを提案している。内点法が収束するにつれて問題が悪条件になり、ランク落ちする可能性があるので提案手法が有効であると考えられる。内点法の初期解が問題の条件を充たさない非許容解から出発する定式化に対して提案手法を適用している。実問題で数値実験を行った結果、多くの問題では提案手法は従来のＣＧＬＳ法に比べて計算速度の点では劣っているが、一部の問題ではＣＧＬＳ法が収束しなかった問題に対しても収束している。これは、多くの問題で各外部反復で生じる最小二乗問題の条件がさほど悪くなかったためと考えられる。今後提案手法の高速化が望まれる。最後に７章で結論を述べている。

以上Xiaoke Cui君の研究は、特にランク落ちした最小二乗問題に対して始めてクリロフ部分空間反復法のための前処理法を提案し、その有効性を理論と数値実験の両面から検討するとともに、線形計画問題の内点法による解法に応用しており、独創性があり、実用的な可能性も示している。本研究の成果の一部は英文学術雑誌論文１篇、国際会議論文１篇に掲載されており、研究業績も学位取得の基準を充たしている。よって、Xiaoke Cui君の論文は博士（情報学）の学位を授与するに値すると判断した。