

氏 名 Ning Zheng

学位(専攻分野) 博士(情報学)

学位記番号 総研大甲第 1932 号

学位授与の日付 平成29年3月24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 Iterative Methods for Nonnegative and Box Constrained
Least Squares Problems and Their Applications

論文審査委員 主 査 教授 速水 謙
教授 宇野 毅明
准教授 小野 順貴
准教授 後藤田 洋伸
教授 土谷 隆 政策研究大学院大学

論文の要旨

Summary (Abstract) of doctoral thesis contents

In this thesis, we mainly focus on iterative methods for large sparse nonnegative constrained least squares (NNLS) and box constrained least squares (BLS) problems, which arise in many scientific computing and engineering applications, e.g., image restoration with nonnegative or bounded pixel values, reconstruction problems in geodesy and tomography, contact problems for mechanical systems, and modeling of ocean circulation. We aim to design efficient algorithms to meet the demands for solving large scale and sparse practical problems. The main contribution of this thesis is the proposal of new iterative methods, especially based on the modulus variable transformation and active set strategy. Theoretical analysis on the convergence of the proposed methods is presented. Also, numerical experiments show that the proposed methods outperform previous methods in terms of computational time and storage requirement under suitable conditions with reasonable parameters. The ideas and techniques developed in this thesis could be valuable when extending them to other problems.

First, we briefly review numerical methods for the solution of NNLS and BLS problems. Moreover, the advantages and the disadvantages of different methods are discussed, which motivate one to design new iterative algorithms for large sparse problems.

Secondly, we consider the solution of the general NNLS problem. A new iterative method is proposed which uses the CGLS method for the inner iteration and the modulus iterative method for the outer iteration to solve the linear complementarity problem resulting from the Karush-Kuhn-Tucker condition of the NNLS problem. Theoretical convergence analysis including the optimal choice of the parameter matrix is presented for the proposed method. In addition, the method can be further enhanced by incorporating the active set strategy, which contains two stages: the first stage consists of modulus iterations to identify the active set, while the second stage solves the reduced unconstrained least squares problems only on the inactive variables, and projects the solution into the nonnegative region. Numerical experiments show the efficiency of the proposed methods compared to projection gradient-type methods with less iteration steps and CPU time.

Thirdly, we consider the solution of large sparse BLS problems using a new class of iterative methods based on modulus transformations, which converts the solution of the BLS into a sequence of unconstrained least squares problems. The inner unconstrained least squares problems can be solved using CGLS. We also discuss the solution of saddle point inner systems. Numerical experiments show the efficiency of the proposed methods in comparison of the projection gradient methods.

Fourthly, we consider the solution of the nonnegative constrained ill-posed problem, especially the image restoration problem. The problem can be formulated as an NNLS problem, which can be solved by the modulus-type inner outer iteration method and the hybrid two-stage iteration method proposed previously. We also consider combining our methods with two regularization

(別紙様式 2)
(Separate Form 2)

techniques: discrepancy principle and Tikhonov regularization. Computed examples illustrate the performances of these methods.

Fifthly, we consider the solution of nonnegative matrix factorization (NMF), which is a low rank matrix approximation problem with nonnegative constraints, using a new alternating least squares method by utilizing the modulus method to solve the nonnegative constrained least squares problem in each iteration. We review some existing methods for the solution of NMF, then construct the alternating modulus nonnegative least squares method for solving NMF. Moreover, we propose a new matrix-based active set method by utilizing the component-wise operation. We also show that the proposed methods can be extended to solve the sparse NMF and regularized NMF. We compare the proposed method with the existing methods numerically on the synthetic data and ORL face image data. The proposed matrix-based active set method outperforms the active set with grouping technique in terms of computational time and storage requirement.

Finally, by considering that the methods for NMF can be regarded as fixed-point iterations, whose rate of convergence is at best linear, the Anderson extrapolation is used to accelerate the algorithms for NMF. We proposed a new Anderson acceleration technique that can flexibly accelerate the fixed point iteration sequences, instead of accelerating the iteration sequence for every step. Numerical experiments show that the Anderson acceleration not only accelerates the classical stationary iterations for linear equations, but also outperforms the previous methods on nonlinear problems like the linear complementarity problem, NNLS and NMF with less iterations and CPU time.

Summary of the results of the doctoral thesis screening

出願者、Ning Zheng氏の博士論文審査委員会を、1月23日に審査員全員出席の下、開催した。博士学位請求論文（以下、「論文」）の内容についてスライドを用いて約1時間の口頭発表を行った後に、約1時間の口頭試問および審査を行った。その結果、出願論文は博士（情報学）の学位を授与するのに十分な内容を有し、出願者に学位を授与することが適切であると判断した。

論文の概要

本論文は大規模疎な非負制約付きの最小二乗問題(NonNegative constrained Least Squares problem: NNLS)に対して、絶対値変換(modulus transformation)を用いた新しい反復解法を提案し、その収束性を証明している。さらに、active set法と組み合わせ、数値実験により従来法よりも優れていることを示している。また、同手法を画像の再構成において生じる不良設定問題(ill-posed problem)に適用し、その有効性を確認している。次に箱型制約付きの最小二乗問題(Box constrained Least Squares problem: BLS)に対して提案手法を拡張し、その有効性を数値実験により確認している。最後に、NNLSに対する提案手法を、非負値行列因子分解(Nonnegative Matrix Factorization: NMF)のための交互最小二乗法(Alternating Nonnegative Least Squares method: ANLS)に適用するとともに、複数の右辺に対する新しい active set法を提案している。さらに、開発したアルゴリズムに Andersonの加速法を適用することにより、従来手法よりもより小さい近似誤差をより速く得ることができることを数値実験により検証している。

本論文は1章（序章）、2章（従来手法）、3章（非負制約付き最小二乗問題）、4章（箱型制約付きの最小二乗問題）、5章（非負制約付きの不良設定問題）、6章（非負値行列因子分解）、7章（Anderson加速）、8章（結論）、の145ページからなる。

1章では問題の背景、動機、本論文の貢献、概要について述べている。2章では、射影勾配法や、active set法を用いたその加速版を始めとする、非負および箱型制約付きの最小二乗問題の従来の数値解法を振り返り、各手法の長所と短所を論じ、比較している。

3章では、一般の非負制約付きの最小二乗問題の KKT 条件と等価な線形相補性問題(Linear Complementarity Problem: LCP)を絶対値変換を用いて不動点方程式に変換し、反復的に解き（外部反復）、各外部反復に対応する制約無しの最小二乗問題を(等価な正規方程式に共役勾配法を適用する)CGLS法を用いて解く方法を提案している。さらに、手法の収束性を証明し、手法の最適なパラメータを求めている。次に、active set法を用いて手法をさらに加速することを提案している。それは、第一段階で提案手法を用いて制約が有効な変数の集合(active set)を同定し、第二段階で制約を受けない自由変数に関してのみ無制約の最小二乗問題を CGLS法を用いて解き、解を非負領域に射影するもので、この2段階を収束するまで繰り返す。数値実験により、提案手法が従来の射影勾配型の解法よりも少ない反復数と計算時間で解けることを示している。

4章では、各変数に上界と下界のある箱型制約付きの最小二乗問題(BLS)に対して、3章

(別紙様式 3)

(Separate Form 3)

で提案した NNLS に対する絶対値変換を用いた手法を拡張している。BLS と等価な LCP に対して上界と下界に対応する 2 つの絶対値変換を用いて不動点方程式を導き、NNLS と同様に各反復で制約無しの最小二乗問題を CGLS 法を用いて解くものである。一方で、BLS の LCP を行列分離を用いた定常反復法により解く方法も提案している。これらの提案手法を数値実験により射影勾配法などの従来法と比較し、その優位性を示している。

5 章では 3 章で提案した NNLS に対する手法を非負制約付きの不良設定問題、特に画像の再構成に適用し、食い違い原理(discrepancy principle)やティコノフの正則化(Tikhonov regularization)と組み合わせて、数値実験によりその性能を検証している。

6 章では 3 章で提案した NNLS に対する手法を、非負値行列因子分解(NMF)のための交互最小二乗法(ANLS)に適用するとともに、複数の右辺に対する新しい active set 法を提案することにより、従来手法よりもより小さい近似誤差をより速く得ることができることを顔画像などによる数値実験により検証している。また、行列の疎性や正則化を考慮した NMF の ANLS による解法を提案している。

7 章では、Anderson の加速法を、連立一次方程式、NNLS、NMF の反復解の系列に適用することにより、収束を加速できることを数値実験により示している。

8 章は本論文を総括している。

なお、本論文の 3 章および 5 章の内容の一部は、数値・応用線形代数分野での査読付きのトップジャーナルに

Zheng, N., Hayami, K., and Yin, J.-F., Modulus-type inner outer iteration methods for nonnegative constrained least squares problems, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*. Vol. 37, No. 3, pp. 1250–1278, 2016

として既に掲載されている。

論文の評価

発表では、論文の全般の説明が行われ、多くの質疑に対して適切な応答がなされた。本論文は数値解析、最適化、科学計算などにおける重要な問題である非負および箱型制約付きの最小二乗問題の解法として、絶対値変換や active set 法に基づいた新しい手法を提案し、その有効性を理論、数値実験の両面から検証している。さらに、提案手法を非負制約付きの不良設定問題や非負値行列因子分解などの工学上重要な問題に適用する方法を提案し、その有効性を検証しており、この分野に大いに貢献している。

よって、審査委員一同、出願論文は博士（情報学）の学位を授与するのに十分な内容を持ち、出願者に博士の学位を授与することが適切であると判断した。