氏　　　名	Zeyu LIAO
学位（専攻分野）	博士（情報学）
学 位 記 番 号	総研大甲第 2358 号
学位授与の日付	2022 年 9 月 28 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	Stabilization of GMRES and Convergence Analysis of Inner-Iteration Preconditioned GMRES for Least Squares Problems
論 文 審 査 委 員	主　査　　宇野　毅明 情報学専攻　教授 杉本　晃宏 情報学専攻　教授 岸田　昌子 情報学専攻　准教授 速水　謙 国立情報学研究所／総合研究大学院大学 名誉教授 今倉　暁 筑波大学　システム情報系　准教授 保國　惠一 筑波大学　システム情報系　助教

(Form 3)

Summary of Doctoral Thesis

Name in full: Zeyu LIAO

Title: Stabilization of GMRES and Convergence Analysis of Inner-Iteration Preconditioned GMRES for Least Squares Problems

This thesis is devoted to the study of the generalized minimal residual methods (GMRES) for least squares problems. GMRES is a robust and efficient Krylov subspace iterative solver for nonsymmetric systems of linear equations. In this thesis, we apply GMRES to least squares problems which arise from many applications in science and engineering, etc. The application of GMRES to least squares problems has been studied, but there are still many mysteries and interesting phenomenon about it, which motivate this thesis. I would like to use three `s' to introduce this thesis, stability, speed, and size. We improved the stability of GMRES, and analyzed the convergence for the preconditioned system which could speed up iterations, and extended the techniques to problems which contain many right-hand sides.

Chapter 1 gives the background of this thesis. Chapter 2 introduced basics and notations. From Chapter 3, we propose and analyze methods to improve GMRES for least squares problems.

At first, we consider using the right-preconditioned GMRES (AB-GMRES) for obtaining the minimum-norm solution of inconsistent underdetermined systems of linear equations. Morikuni (Ph.D. thesis, 2013) showed that for some inconsistent and ill-conditioned problems, the iterates may diverge. This is mainly because the Hessenberg matrix in the GMRES method becomes very ill-conditioned so that the backward substitution of the resulting triangular system becomes numerically unstable. We propose a stabilized GMRES method based on solving the normal equations corresponding to the above triangular system using the standard Cholesky decomposition. This has the effect of shifting upwards the tiny singular values of the Hessenberg matrix which lead to an inaccurate solution. This finding seems to contradict the common sense that the normal equations are not suitable for solving ill conditioned problems, since the problem would become more ill conditioned. We presented a theorem to illustrate why the system can become better conditioned using normal equations in the presence of rounding errors and also analyzed the importance of the consistency which is ensured by the normal equations. We analyzed the structure of the noise due to double precision arithmetic, which helps to understand how the stabilized method works. We compared our method with many existing methods, such as TSVD (Truncated Singular Value Decomposition), Tikhnov regularization and RR(Range Restricted)-GMRES, etc. Numerical experiments show that the proposed

method is robust and efficient, not only for applying AB-GMRES to underdetermined systems, but also for applying GMRES to severely ill-conditioned range-symmetric systems of linear equations.

Next, we explain the super-linear convergence of the inner-iteration preconditioned GMRES method for least squares problems. Inner-iteration preconditioning is a very fascinating technique which could speed up the convergence by increasing the steps of inner-iteration. Existing error bounds are usually exponent of the spectral radius, which under logarithmic function is linear, and cannot illustrate the super-linear convergence of the method. Increasing the steps of inner-iteration will cluster the eigenvalues of the preconditioned coefficient matrix. By considering the effect of clustered eigenvalues of the preconditioned coefficient matrix, we found that eigenvalues which are close to the center help to quickly diminish the residual to a tiny level. We show that the theoretically predicted convergence behavior matches numerical experiment results. In the analysis, we assume that the preconditioned matrix is diagonalizable, but we hope extend the analysis to cases where the preconditioned coefficient matrix contains Jordan blocks in future.

Finally, we consider using the block GMRES to solve least squares problems with multiple right-hand sides. This generates the Krylov subspace and updates the QR decomposition for the Hessenberg matrix block-wise. The Block GMRES requires a larger Krylov subspace to converge than the GMRES. However, the total CPU is reduced due to efficient memory access, and the decrease of the number of iterations per right-hand side. Further, we propose combining the block GMRES method with block-wise inner-iteration preconditioning to reduce the number of iterations. Numerical experiments show that the proposed method is efficient compared to the block GMRES. We also gave some conjectures in Appendix B for the grade of block GMRES.

In conclusion, this thesis proposes a stabilized method to ensure the stability when GMRES suffers severe ill-conditioning and analyzes why the method works. Then, it illustrates the super-linear convergence of the inner-iteration preconditioned GMRES method for least squares problems, which is not only a new way to analyze the convergence but also can help to design good preconditioners. Finally, it extended the method to solve for many right-hand sides simultaneously block wise, which saves even more CPU time and leads to the research on the theory for the block case in the future.

Form8・Separate Sheet
（様式８・別紙１）

Results of the doctoral thesis screening

博士論文審査結果

Name in Full
氏 名　　Zeyu LIAO

Title
論文題目　　Stabilization of GMRES and Convergence Analysis of Inner-Iteration Preconditioned GMRES for Least Squares Problems

本学位論文は最小二乗問題を、効率的で頑健な連立一次方程式の反復解法である一般化最小残差法(Generalized Minimal Residual (GMRES) method)を用いて解く際の、超悪条件問題の解法の安定化法の提案と解析、内部反復前処理解法の超一次収束特性の解明、多数の右辺に対して同時に解くブロック内部反復前処理解法の提案を行っている。

第１章では、問題の背景、研究の動機および目的につい述べている。

第２章では、数学記法、連立一次方程式のクリロフ部分空間解法である GMRES 法について説明している。

第３章では、まず右前処理 GMRES 法を用いて（右辺が係数行列の像空間に属さない）inconsistent な最小二乗問題を解く過程で、超悪条件な（上三角行列を係数行列とする）連立一次方程式を解かねばならないために、反復とともに解の残差が急増する現象を述べている。

この問題を解決するために、この連立一次方程式をあえて正規方程式に変換し、コレスキー分解を用いて解くことにより安定化させる方法を提案し、その有効性を数値実験により従来法と比較し検証している。

さらに、この安定化が、正規方程式を用いることにより、問題の数値的な条件を低減し、consistent な問題に変換しているためであることを理論と数値実験により示している。

第４章では、SOR (Successive Over Relaxation)法のような定常反復法を内部反復として用いた（左）前処理 GMRES 法の収束解析を行っている。同手法は悪条件な最小二乗問題の有力な反復法として知られていたが、その超一次収束特性は定量的に説明されていなかった。ここでは、前処理された行列が対角化可能で、その固有値が前処理により集中すると仮定して、残差が超一次収束することを定量的に示している。

第５章では、複数の右辺（観測データ）に対する最小二乗問題を同時に解く解法として、ブロック GMRES 法を採用し、単一右辺に対する GMRES 法より、反復数および計算時間を大幅に短縮できることを示している。これは複数右辺に対するクリロフ部分空間の豊かさと、ブロックを扱うことによるメモリー・アクセスの高速性に起因することが述べられている。また、内部反復前処理もブロック化することによりさらに高速化できることを示している。

最後に、第６章で本論文の貢献をまとめ、今後の課題について述べている。

公開発表会では、博士論文の章立てに従って発表が行われ、その後に行われた論文審査会及び口述試験では、審査員からの質疑に対して適切に回答がなされた。質疑応答後に審査委員会を開催し、審査委員で議論を行った。審査委員会では、出願者が情報学分野の十

分な知識と研究能力を持つと認められるとともに、博士研究が最小二乗問題の数値解法において十分な新規性と有効性を有していると認められた。

以上を要するに本学位論文は、最小二乗問題を GMRES 法により反復的に解く際の安定化法とその理論を提案し、内部反復前処理解法の超一次収束特性を定量的に説明し、多数の右辺に対して同時に解くブロック内部反復前処理解法を提案しており、最小二乗問題の反復解法において有益な貢献をしている。

また、本学位論文の成果は、学術雑誌論文１件、国際学会発表３件、国内学会発表５件として発表され、学術的貢献も認められる。以上の理由により、審査委員会は、本論文が学位授与に値すると判断した。