

2回のQR分解による打ち切り最小2乗最小ノルム解

細 田 陽 介†

打ち切り最小2乗最小ノルム解は悪条件線形方程式に対する有効な数値解法である。打ち切り最小2乗最小ノルム解は係数行列の分解とデータベクトルに依存する。最も一般的な方法は特異値分解による打ち切り最小2乗最小ノルム解である。しかし、この方法は計算量が多く、無駄な計算も含んでいるため、大規模な問題に対する適用は困難がともなった。3回のQR分解による打ち切り最小2乗最小ノルム解は、特異値分解に比べ少ない計算量で同程度の精度の近似解を求めることができた。本論文において我々は2回のQR分解による打ち切り最小2乗最小ノルム解を提案する。本方法は特異値分解法、3回のQR分解法同様に数値的に安定であり、なおかつ、特異値分解による方法と比べて同程度の精度の近似解が得られることが数値実験より確認された。

Truncated Least-squares Least-norm Solutions by Applying the QR Decompositions Twice

YOSUKE HOSODA†

We investigate the numerical method applied to ill-posed problems including the Fredholm integral equation of the first kind. In place of the truncated least-square least-norm solution (TLSSLNS) which applies the QR decomposition three times, we propose a TLSSLNS which applies the QR decomposition only twice. The new method is numerically stable, and numerical experiments show that the method gives results of similar accuracy compared to the truncated singular value decomposition method.

1. はじめに

我々の目的は、悪条件線形方程式に対する安定で高速な数値解法の構築にある。

線形方程式

$$Ax = b, \quad x \in l_2, \quad b \in l_2 \quad (1)$$

が与えられたとする。 l_2 は

$$x = (x_1, x_2, \dots)^T \in l_2 \iff \sum_{i=1}^{\infty} x_i^2 < \infty$$

を満たす点列空間を表す。方程式の悪条件性は A の条件数

$$\text{cond}(A) \stackrel{d}{=} \|A\| \|A^\dagger\|$$

を用いて定量的に表される。ここで A^\dagger は A の一般逆作用素²⁾を表す。また、ノルムは2乗ノルムとする。特に $\text{cond}(A) = \infty$ のとき悪条件方程式であるという。

代表的な悪条件線形方程式として非退化核を持つ第

1種フレドホルム積分方程式

$$\int_{I_t} K(s, t) f(t) dt = g(s), \quad s \in I_s$$

があげられる。ただし関数 $K \in L_2(I_s \times I_t)$ は既知の積分核関数、 $g \in L_2(I_s)$ は既知のデータ関数、 $f \in L_2(I_t)$ が求めるべき未知の解関数である。

悪条件線形方程式の数値解法は大別すると正則化法^{3),6),7)}と特異値分解による方法^{3),4)}がある。どちらの手法も行列の特異値分解を用いて計算を行う。特異値分解は行列の固有値問題の算法を用いて計算されるため反復計算が必要であり、そのため計算量が多いという欠点がある。それゆえ大規模な問題を解くには困難がともなう。

細田・鳥居は文献5)において悪条件線形方程式に対し打ち切り最小2乗最小ノルム解を導入し、係数行列に直接法であるQR分解を3回施すことにより打ち切り最小2乗最小ノルム解が得られることを示した。この方法は直接法であるため計算量が少ない。また、特異値分解による方法と同程度の精度の解が得られることも数値実験により示した。

本論文では係数行列に対してQR分解を2回行うこ

† 富山県立大学工学部

Faculty of Engineering, Toyama Kenritsu University

とにより打ち切り最小2乗最小ノルム解が得られることを示す。これによりさらに高速に悪条件線形方程式を解くことが可能となる。また、本方法は数値的に安定であり、精度面においても特異値分解、3回のQR分解による方法と同程度の近似解が得られることが数値実験により確認された。

次章において我々は打ち切り最小2乗最小ノルム解の定義を与え、この解が数値的に安定であることを示す。3章で、2回のQR分解を係数行列に施すことにより打ち切り最小2乗最小ノルム解が得られることを示す。4章で具体的な算法を与え、5章で数値実験およびその考察を行う。最後に6章で結論を述べる。

ただし、以下において $R(A)$, $N(A)$ はそれぞれ作用素 A の値域と零空間を指すものとする。また、

$$U \stackrel{d}{=} [u_1, u_2, \dots]$$

は行列 U の第 j 列ベクトルが u_j であることを、

$$S = \text{span}(u_1, \dots, u_n)$$

は空間 S がベクトル u_1, \dots, u_n で張られていることを表す。

2. 打ち切り最小2乗最小ノルム解

まず、打ち切り最小2乗最小ノルム解の定義を与える。

線形方程式 (1) の係数行列 A が次の形に分解されたとする。

$$A = URDV^T. \quad (2)$$

ここで U , V は正規直交行列、 R は悪条件ではない上三角行列、 D は対角行列で、その対角成分 d_i は

$$d_1 \geq d_2 \geq \dots > 0$$

の順で並んでいるものとする。このとき、方程式 $Ax = b$ の打ち切り最小2乗最小ノルム解は次のように定義される⁵⁾。

定義 1 $\varepsilon > 0$ を与え、

$$c \stackrel{d}{=} U^T b = (c_1, c_2, \dots)^T$$

とし、 $\sum_{i>n} c_i^2 < \varepsilon^2$ を満たす最小の $n = n(\varepsilon)$ に対し、対角行列 D_n を

$$D_n \stackrel{d}{=} \text{diag}(d_1, \dots, d_n, 0, \dots)$$

とおき、行列

$$A_n \stackrel{d}{=} URD_n V^T$$

を係数行列とする方程式

$$A_n x = b$$

の最小2乗最小ノルム解を $Ax = b$ の打ち切り最小2

乗最小ノルム解という。

いま、正規直交行列 V を

$$V \stackrel{d}{=} [v_1, v_2, \dots]$$

とすると、打ち切り最小2乗最小ノルム解は解空間の n 次元部分空間

$$S \stackrel{d}{=} \text{span}(v_1, \dots, v_n)$$

の元となる。また、定義から明らかに

$$S = N(A_n)^\perp$$

であり、かつ

$$S \subseteq N(A)^\perp$$

が成り立つ。さらに、

$$U \stackrel{d}{=} [u_1, u_2, \dots]$$

とすると、 A_n の値域は

$$R(A_n) = \text{span}(u_1, \dots, u_n)$$

と表すことができる。

打ち切り最小2乗最小ノルム解を x_n とすると、定義より

$$x_n = A_n^\dagger b$$

である。作用素 A_n^\dagger の有界性は D_n^\dagger の有界性に帰着する。それゆえ A_n^\dagger は有界となり、打ち切り最小2乗最小ノルム解は数値的に安定となる。

打ち切り最小2乗最小ノルム解 x_n は

$$\|Ax_n - b\| < \varepsilon$$

を満たす。また、元の方程式 $Ax = b$ が l_2 に解を持つならば、打ち切り最小2乗最小ノルム解の列はその解に収束する。

打ち切り最小2乗最小ノルム解は係数行列 A の分解 (2) とデータベクトル b に依存する。分解 (2) において、正規直交行列 U , V をそれぞれ左、および右特異ベクトルを列ベクトルとする行列、上三角行列 R を単位行列 I , 対角行列 D の対角成分を特異値とおくことにより特異値分解による打ち切り最小2乗最小ノルム解を求めることができる⁵⁾。これは打ち切り項数を $n = n(\varepsilon)$ としたときの打ち切り特異値分解法⁴⁾による近似解となる。

細田・鳥居は文献 5) において、3回のQR分解を用いることにより分解 (2) が得られることを示した。そして、この分解による打ち切り最小2乗最小ノルム解は特異値分解による打ち切り最小2乗最小ノルム解と同程度の精度であることを数値実験により検証した。

次章において我々は 2 回の QR 分解により分解 (2) が得られることを示す。

3. 2 回の QR 分解による打ち切り最小 2 乗最小ノルム解

本章では 2 回の QR 分解により分解 (2) が得られることを示す。

まず、係数行列 A の行ベクトルに対してピボット選択付きの直交化を施すことにより分解

$$\Pi A = \tilde{L} D V^T$$

が得られる。行列 \tilde{L} は下三角行列、 D は対角成分がピボットングの効果により

$$d_1 \geq d_2 \geq \dots > 0$$

の順に並んだ対角行列、 V は列正規直交行列、 Π はピボット選択による置換行列である。

下三角行列 \tilde{L} は対角成分がすべて 1 で、それ以外の要素の絶対値は 1 以下となる。典型的な場合として、下三角行列 \tilde{L} の非対角要素が区間 $[-1, 1]$ 上の一様乱数の場合を考察する。このとき、

$$\tilde{L} \stackrel{d}{\equiv} [l_1, l_2, \dots]$$

とすると、各列ベクトルの統計的独立性から、 i と j が異るとき $l_i^T l_j$ は $l_i^T l_i$ に比べて無視できる程度となる。これより、 A の悪条件性は多くの場合対角行列 D のみに反映されることになる⁵⁾。

次に、 \tilde{L} に対して Π の逆変換を施し

$$L \stackrel{d}{\equiv} \Pi^{-1} \tilde{L}$$

とおき、 L の列ベクトルに対して直交化を行うと分解

$$L = UR$$

が得られる。 U は列正規直交行列、 R は上三角行列で、その条件数は \tilde{L} と等しい。このときの直交化は、 L の列ベクトルの一次独立性は保証されているため、ピボット選択を行う必要はない。これより、求めたい分解

$$A = URDV^T \quad (3)$$

が得られたことになる。

この分解を元に定義 1 を適用することにより打ち切り最小 2 乗最小ノルム解を求めることができる。具体的な計算方法を次章に示す。

4. 算 法

前章で述べた 2 回の QR 分解を用いた悪条件線形方程式 $Ax = b$ の解法について述べる。

まず、係数行列 A とデータベクトル b 、そして計算機イプシロン $\varepsilon_\mu > 0$ と残差の許容誤差限界 $\varepsilon_b \geq \varepsilon_\mu$

を与える。

[Step1] A の行ベクトルに対し、ピボット行のノルムが ε_μ 以下になるまでピボット選択付きの直交変換を行い

$$\Pi A = \tilde{L} D V_m^T + O(\varepsilon_\mu)$$

を求める。 Π は行置換行列である。 $m = m(\varepsilon_\mu)$ でピボット行のノルムが ε_μ 以下になるとすると、 V_m は列数が m の縦長の列正規直交行列、 \tilde{L} は列数が m の縦長の下台形行列、 D は m 次対角行列となる。

[Step2] 行置換の逆変換 Π^{-1} を L に施し、

$$L \stackrel{d}{\equiv} \Pi^{-1} \tilde{L}$$

とする。

[Step3] L の列ベクトルに対して通常の直交変換を行い

$$L = U_m R$$

を求める。 U_m は列数が m の列正規直交行列、 R は m 次正上方三角行列となる。これより分解

$$A = U_m R D V_m^T + O(\varepsilon_\mu)$$

が得られる。このとき、 L の最後列にデータベクトル b を加えた行列に対して列直交化を行えば効率良く

$$c = U_m^T b = (c_1, \dots, c_m)^T$$

を求めることができる。ここで U を陽に求める必要はない。

[Step4] ベクトル

$$\Delta b \stackrel{d}{\equiv} b - U_m U_m^T b$$

を計算する。このとき、もし $\|\Delta b\| > \varepsilon_\mu$ ならば、元の方程式は l_2 に解を持たない。

[Step5] 与えられた残差の許容誤差限界 ε_b に基づき残差ノルムの 2 乗

$$r_n^2 \stackrel{d}{\equiv} \sum_{i>n}^m c_i^2 + \|\Delta b\|^2 \quad (4)$$

に対して

$$r_n^2 < \varepsilon_b^2$$

を満たす最小の $n = n(\varepsilon_b)$ を決定する。上式を満たす $n \leq m$ が存在しないときは許容誤差 $\varepsilon_b > 0$ を満たす打ち切り最小 2 乗最小ノルム解は存在しない。

[Step6] R の左上 $n \times n$ 小行列を R_n 、

$$c_n = (c_1, \dots, c_n)^T$$

とし、方程式

$$R_n y_n = c_n$$

を逆代入で解き、さらに

$$\mathbf{x}_n = V_n D_n^{-1} \mathbf{y}_n$$

として許容誤差 $\epsilon_b > 0$ を満たす打ち切り最小 2 乗最小ノルム解が得られる。ただし、 V_n は V_m の最初の n 個の列ベクトルからなる列正規直交行列、

$$D_n \stackrel{d}{=} \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$$

である。

5. 数値実験およびその考察

悪条件線型方程式の例として、第 1 種フレドホルム積分方程式

$$\int_{I_t} K(s, t) f(t) dt = g(s), \quad s \in I_s$$

を用いて我々の提案する 2 回の QR 分解による打ち切り最小 2 乗最小ノルム解の有効性を数値実験で検証する。ただし以下において

$$A = (a_{ij}) \in \mathbf{R}^{M \times N}$$

は、行列 A は ij -成分として a_{ij} を持つ $M \times N$ 実行列であることを意味する。

まず、上記の積分方程式の離散化法について述べる。区間 I_t および I_s は一般性を失うことなく区間 $[-1, 1]$ にとる。区間 $[-1, 1]$ 上の N 点数値積分則を

$$\int_{-1}^1 f(t) dt \approx \sum_{j=1}^N w_j f(t_j)$$

と表す。今、

$$\hat{K} \stackrel{d}{=} (K(t_i, t_j)) \in \mathbf{R}^{N \times N}$$

$$W^{\frac{1}{2}} \stackrel{d}{=} \text{diag}(\sqrt{w_1}, \dots, \sqrt{w_N}) \in \mathbf{R}^{N \times N}$$

$$\mathbf{g} \stackrel{d}{=} (g(t_1), \dots, g(t_N))^T \in \mathbf{R}^N$$

とおくと、未知関数 f に対する積分方程式の L_2 での残差ノルムは、 N 次元実ユークリッド空間 \mathbf{R}^N における 2 乗ノルム $\|\cdot\|_2$ を用いて

$$\left\| \int_{-1}^1 K(s, t) f(t) dt - g(s) \right\|_{L_2} \approx \left\| W^{\frac{1}{2}} \hat{K} W^{\frac{1}{2}} W^{\frac{1}{2}} \mathbf{f} - W^{\frac{1}{2}} \mathbf{g} \right\|_2$$

で近似できる。ただし、

$$\mathbf{f} \stackrel{d}{=} (f(t_1), \dots, f(t_N))^T \in \mathbf{R}^N$$

である。ここで、数値積分による離散化誤差は計算機イプシロンに比べ小さくなるように分点数 N を十分に大きくとっておくと、積分方程式の最小 2 乗最小ノルム問題は、線形方程式

$$W^{\frac{1}{2}} \hat{K} W^{\frac{1}{2}} W^{\frac{1}{2}} \mathbf{f} = W^{\frac{1}{2}} \mathbf{g}$$

の最小 2 乗最小ノルム問題に帰着する。ここで

$$A \stackrel{d}{=} W^{\frac{1}{2}} \hat{K} W^{\frac{1}{2}}, \quad \mathbf{b} \stackrel{d}{=} W^{\frac{1}{2}} \mathbf{g}$$

とおくことにより、方程式

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

が得られる。このときの解は $\mathbf{x} = W^{\frac{1}{2}} \mathbf{f}$ である。これにより N 点数値積分則を介して

$$\|f\|_{L_2} \approx \|\mathbf{x}\|_2$$

の対応がつくことになる。

数値実験は非退化核を持つ第 1 種フレドホルム積分方程式

$$\int_0^1 e^{st} f(t) dt = \frac{e^{s+1} - 1}{s+1}, \quad s \in [0, 1] \quad (5)$$

に対して行った。この方程式の真の解は $f(t) = e^t$ である。離散化のための数値積分則は 100 点ガウス・ルジャンドル則を用いた。また、比較のために特異値分解による打ち切り最小 2 乗最小ノルム解の結果も示す。なお、数値計算はすべて倍精度実数を用い、Sun-4/2 ワークステーションで行った。QR 分解における直交変換はハウスホルダ変換で行い、特異値分解はライブラリ¹⁾を用いた。

ピボット選択における打ち切りのためのしきい値は $\epsilon_\mu = 1.0 \times 10^{-15}$ を用いた。このとき数値的階数は $m(\epsilon_\mu) = 9$ であった。2 回の QR 分解で得られた上三角行列 R の条件数は

$$\text{cond}(R) = 0.22483 \times 10^2$$

であった。これより R は悪条件ではなく、我々の仮定を満たしていることが分かる。

計算結果を図 1 に示す。左図は特異値分解による結果を、右図は 2 回の QR 分解による結果を常用対数の尺度で表したものである。図中の $\text{Sig}(n)$ は第 n 番目の特異値を、 $d(n)$ は分解 (3) における対角行列 D の第 n 番目の要素を表す。 $\text{Err}(n)$ は打ち切り項数 n で得られる近似解の誤差を、 $\text{Res}(n)$ は式 (4) により与えられた各々の分解における残差 r_n を表す。

残差の許容誤差限界 $\epsilon_b = 1.0 \times 10^{-13}$ として得られた特異値分解および 2 回の QR 分解による打ち切り最小 2 乗最小ノルム解の誤差と、それを求めるのに要した計算時間を表 1 に示す。表中の SVD, QR2 はそれぞれ特異値分解および 2 回の QR 分解を表す。また、QR2(no U, V) は列正規直交行列 U, V を陽に求めずに打ち切り最小 2 乗最小ノルム解を求めた場合である。ちなみに 3 回の QR 分解による打ち切り最小 2 乗最小ノルム解の誤差は $0.52611\text{E}-07$ であった。これより、2 回の QR 分解 (3) により特異値分解よりも高速に、なおかつ同

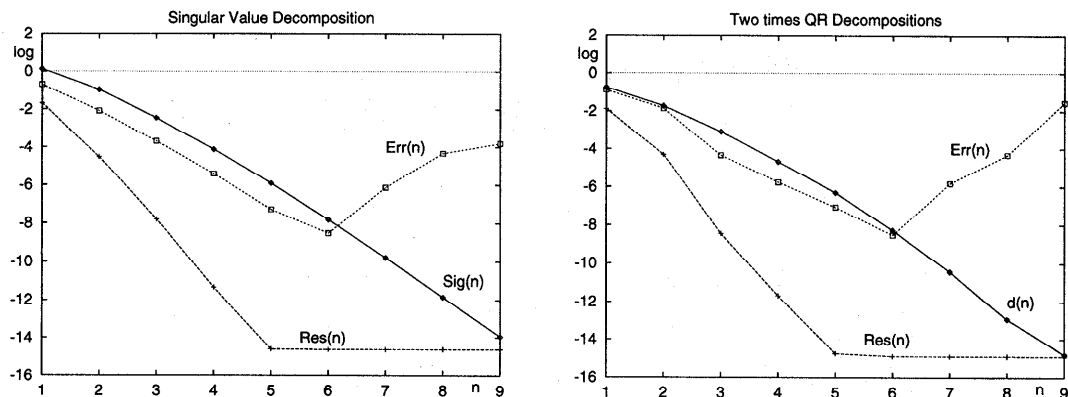


図 1 特異値分解と 2 回の QR 分解による対角成分 σ_n , d_n と残差 r_n および誤差の比較
 Fig. 1 Diagonal elements σ_n , d_n , residual norms r_n 's and errors in SVD and 2-times QRD.

表 1 特異値分解および 2 回の QR 分解による打ち切り最小 2 乗最小ノルム解の誤差と計算時間

Table 1 Errors and CPU-times of TLSLNS by SVD and 2-times QRD.

	Error	CPU-time (sec)
SVD	0.51935E-07	4.27
QR2	0.84976E-07	0.16
QR2 (no U, V)	0.84976E-07	0.14

程度の精度の近似解が得られることが分かる。

6. おわりに

通常、悪条件線形方程式に対しては特異値分解による方法が用いられる。特異値分解は計算量が多いため、大規模な問題に対しては不利である。これに対して我々は 2 回の QR 分解を用いた打ち切り最小 2 乗最小ノルム解による解法を提案した。本方法は数値的に安定であり、特異値分解において特異値の零への集積が速い問題に対しては特に高速に計算することができる。なぜなら、1 回目の QR 分解で得られる下台形行列のサイズが、元の係数行列に比べて小さくなり、2 回目の QR 分解が小規模となるからである。また、近似解の精度の面においても特異値分解による打ち切り最小 2 乗最小ノルム解と比べて遜色がないことが数値実験により確認された。

謝辞 本研究を行うにあたり、助言や討論をしていただいた富山県立大学工学部岩間尚文教授、南山大学経営学部鳥居達生教授、名古屋大学工学部杉浦洋助教授に感謝します。また、本論文を注意深くチェックし、有意義なご助言をくださった査読者に感謝します。

参考文献

- Anderson, E., et al.: *LAPACK User's Guide*, SIAM, Philadelphia (1992).
- Groetsch, C.W.: *Generalized Inverses of Linear Operators*, Marcel Dekker, New York and Basel (1977).
- Groetsch, C.W.: *The Theory of Tikhonov Regularization for Fredholm Equations of the First Kind*, Pitman, Boston (1984).
- Hansen, P.C.: Truncated SVD Solutions to Discrete Ill-Posed Problems with Ill-Determined Numerical Rank, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, Vol.11, No.3, pp.503-518 (1990).
- 細田陽介, 鳥居達生: 悪条件線形方程式に対する一つの直接解法—打ち切り最小 2 乗最小ノルム解, *日本応用数学会論文誌*, Vol.4, No.4, pp.287-298 (1994).
- 田中 博, 岡部政之, 鈴木 貴: 岩波講座応用数学 [方法 6] 逆問題, 岩波書店, 東京 (1993).
- Tikhonov, A.N.: Solution of Incorrectly Formulated Problems and the Regularization Method, *Soviet Math.*, Vol.4, pp.1035-1038 (1963).

(平成 10 年 2 月 3 日受付)

(平成 10 年 11 月 9 日採録)



細田 陽介 (正会員)

平成 6 年名古屋大学大学院工学研究科情報工学専攻博士課程修了。広島市立大学情報科学部助手を経て、現在富山県立大学工学部助手。博士(工学)。日本応用数学会会員。