

QR 分解を用いた正則化法に対する 最適正則化パラメータ推定法とその解析

北川 高嗣[†] 仲田 晋[†]

離散線形非適切問題に対し、特異値分解を用いた Tikhonov 正則化法は有効な解法である。この方法は、解の性質を制御する正則化パラメータを適切に選択することが重要である。一方、より高速な直接解法として 2 回の QR 分解を用いた正則化法がある。この解法は従来の特異値分解を用いた正則化法に比べ、大幅に少ない計算量で解を得ることができる。本論文では、この正則化法により得られる解の性質について示し、また、適切なパラメータを選択するためのいくつかの手法を適用し、これらの手法により選択された正則化パラメータを用いることにより、特異値分解による正則化法と同様、有効な解を得ることができることを示す。

Analysis of Methods to Estimate the Optimal Parameter for the Regularization Using QR Factorization

TAKASHI KITAGAWA[†] and SUSUMU NAKATA[†]

Tikhonov regularization method using singular value decomposition is an effective method for discrete ill-posed linear operator equations. In this method, a regularization parameter which controls a properties of the solution has to be chosen properly. On the other hand, a new regularization method using two times QR factorizations, which requires far less computational cost than the singular value decomposition, has proposed. In this paper, we show the properties of the regularized solution given by the new method and apply some methods for choosing a good value of regularization parameters.

1. はじめに

本論文の目的は、不適切問題から生じる悪条件線形方程式に対し、2 回の QR 分解を用いた直接法による正則化法を適用する場合の最適正則化パラメータを推定することである。

線形逆問題の多くは不適切問題の代表的な例である第 1 種フレドホルム型積分方程式

$$\int_a^b k(s,t)x(t)dt = y(s), \quad c \leq s \leq d \quad (1)$$

に帰着され²⁾、既知の関数 $y(s)$ から未知の解 $x(t)$ を求める問題となる。ただし、実際の問題では $y(s)$ は有限個の点で観測されるデータであり、また、データにはノイズが含まれる。本論文では、積分方程式 (1) を離散化して得られる方程式

$$Ax = y_0 + e \equiv y, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n} \quad (2)$$

が与えられているとする。ここで y_0 は真のデータ、 e

はデータに含まれるノイズを表す。この連立 1 次方程式の係数行列 A は、積分方程式 (1) の不適切性が反映されて一般に悪条件となる²⁾。

悪条件線形方程式では一般にデータに含まれるノイズが解の誤差に大きく反映されるが、ノイズの影響を抑え、方程式の最小 2 乗最小ノルム解を近似的に求める代表的な解法に Tikhonov 正則化法²⁾がある。これは係数行列の特異値分解を用いて解ベクトルの空間、およびデータベクトルの空間の基底を求め、解ベクトルのそれぞれの基底の成分に対して正則化パラメータに応じたフィルタをかけるによりノイズの影響を抑える解法であり、この解を正則化解と呼ぶ。一方、2 回の QR 分解により解ベクトルの空間、およびデータベクトルの空間を求める方法が提案され⁷⁾、この分解を用いて同様のフィルタを用いることによりノイズの影響を抑えた正則化解を得ることができる⁹⁾。以後、従来の特異値分解による正則化法と区別するため、この正則化法を QR 分解による正則化法と呼ぶ。QR 分解による正則化法では、特異値分解を用いた場合に比べ係数行列の分解を高速に得ることができる^{7),9)}。

[†] 筑波大学電子・情報工学系

Institute of Information Sciences and Electronics, University of Tsukuba

ただし、正則化法により精度の良い解を求めるためには適切な正則化パラメータを選択する必要がある。特に最も精度の良い正則化解を与える正則化パラメータを最適正則化パラメータと呼ぶ。

Tikhonov 正則化法による正則化解の性質をよく表すものとして、L-カーブがある²⁾。これは、正則化パラメータに対し、x-軸に正則化解の残差、y-軸に正則化解のノルムをとり描かれる曲線で、離散非適切問題では一般に L 字型をなし、最適正則化パラメータに対応する点はコーナーに位置することが知られている。

特異値分解による Tikhonov 正則化法ではいくつかの最適正則化パラメータ推定法が提案され、代表的なものとして GCV 法¹⁾、L-カーブ法⁸⁾、Quasi-Optimal 法^{3),4)}があげられる。

本論文では QR 分解による正則化法における L-カーブの性質について述べ、また、上記 3 つの最適正則化パラメータ推定法の適用について示す。この最適正則化パラメータの推定に要する計算量は従来の特異値分解を用いた場合と同じであることを示し、また推定された正則化パラメータによりほぼ最適正則化解を得ることを数値実験により示す。

2. QR 分解による正則化法の性質

連立 1 次方程式 (2) において、係数行列 A 、およびノイズを含むデータベクトル \mathbf{y} が与えられているとする。以下簡単のために $m \geq n$ を仮定するが、一般性を失うことはない。

QR 分解による正則化法では、係数行列の以下の分解を用いる⁹⁾。

$$A = UDRV^T. \quad (3)$$

ただし、 $U \in \mathbf{R}^{m \times k}$ 、 $V \in \mathbf{R}^{n \times k}$ は列正規直交行列、 $R \in \mathbf{R}^{k \times k}$ は上三角行列、 $D \equiv \text{diag}(d_1, \dots, d_k)$ は対角行列で、その対角要素は $d_1 \geq \dots \geq d_k > 0$ の順に並んでいるものとする。ここで、 k は A の数値的階数を表す。また、上三角行列 R は悪条件でないことを仮定する。

この分解は、 A^T に対してピボット付き QR 分解を施し、得られた上三角行列に対してさらに QR 分解を施すことにより得られる^{7),9)}。ただし、ピボット付き QR 分解はピボット列のノルムがしきい値 ε 以下になった時点で終了し、このときの三角行列のサイズにより数値的階数 k を決定するものとする。

分解 (3) を得るための演算量は一般に特異値分解に比べ少なく、また係数行列 A の数値的階数 k に依存して少なくなるため、特に数値的階数 k が小さい問

題に対して有効である⁹⁾。

分解 (3)、および正則化パラメータ λ を用いて、正則化解 \mathbf{x}_λ は

$$\mathbf{x}_\lambda = VR^{-1}(D^2 + \lambda^2 I)^{-1}DU^T\mathbf{y} \quad (4)$$

$$= \sum_{i=1}^k f_i \frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{y}}{d_i} \mathbf{w}_i \quad (5)$$

で表される⁹⁾。ただし、 $W \equiv VR^{-1} = [\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_k]$ 、 $U = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k]$ 、また f_i はフィルタ

$$f_i = \frac{1}{1 + \lambda^2/d_i^2} \quad (6)$$

を表す。ここで、正則化解 (4) における上三角行列 R の逆行列の演算は、後退代入により得られ、また、分解 (3) において R が悪条件でないという仮定を満たせば、後退代入の演算での悪条件性による誤差の混入は少ない。

この正則化解 \mathbf{x}_λ は汎関数

$$F_\lambda(\mathbf{x}) = \|\mathbf{y} - A\mathbf{x}\|^2 + \lambda^2 \|RV^T\mathbf{x}\|^2 \quad (7)$$

を最小化する \mathbf{x} である⁹⁾。以下、ノルム $\|\cdot\|$ は添字がない限りベクトルの 2-ノルムを表す。

正則化解の性質をよく表すものとして L-カーブ²⁾があげられる。QR 分解を用いた正則化解 (4) の場合、正則化解 \mathbf{x}_λ に対し、最小化する汎関数 (7) に現れる 2 つの量、 $\|\mathbf{y} - A\mathbf{x}_\lambda\|$ と $\|RV^T\mathbf{x}_\lambda\|$ をそれぞれ x-軸、y-軸にとり、 $\lambda \in [0, \infty)$ をパラメータとして描かれる曲線である。以下、L-カーブの座標を

$$(\rho_1(\lambda), \rho_2(\lambda)) \equiv (\|\mathbf{y} - A\mathbf{x}_\lambda\|, \|RV^T\mathbf{x}_\lambda\|) \quad (8)$$

で表す。この L-カーブの座標 $\rho_1(\lambda)$ 、 $\rho_2(\lambda)$ の単調性について定理 1 に示す。

定理 1 $\lambda \in (0, \infty)$ において、 $\rho_1(\lambda)$ は λ の単調増加関数、 $\rho_2(\lambda)$ は λ の単調減少関数であり、

$$\begin{aligned} (\rho_1(\lambda), \rho_2(\lambda)) &\rightarrow (0, \|RV^T A^\dagger \mathbf{y}\|) \quad \text{as } \lambda \rightarrow 0, \\ (\rho_1(\lambda), \rho_2(\lambda)) &\rightarrow (\|\mathbf{y}\|, 0) \quad \text{as } \lambda \rightarrow \infty \end{aligned}$$

を満たす。ただし、 A^\dagger は A の Moore-Penrose 一般逆行列⁹⁾を表す。

また、L-カーブ (8) は、特異値分解を用いた場合⁸⁾と同様の単調減少性を持つ。このことを定理 2 に示す。**定理 2** $\lambda \in (0, \infty)$ において、 $\rho_2(\lambda)$ は $\rho_1(\lambda)$ の単調減少関数である。

なお、定理の証明については付録 A.1、A.2 に示す。

これらは、従来の特異値分解による正則化法と同様の性質である。不適切問題から派生する連立 1 次方程式 (2) に対する Tikhonov 正則化法では、L-カーブはほぼ垂直な部分とほぼ水平な部分に分かれ、その中程

にコーナーを持ち、最適な正則化パラメータに対する L-カーブの座標はこのコーナー付近に位置することが知られている^{2),8)}。QR 分解を用いた正則化法の場合も、 d_i が A の特異値と同様の振舞いをすれば L-カーブがコーナーを持ち、また、最適な正則化パラメータがコーナーの位置を表すことが式 (5) より期待される。

3. 最適正則化パラメータ推定法

式 (4) により与えられる正則化解 x_λ に対し、正則化解の誤差ノルム $\|A^\dagger y_0 - x_\lambda\|$ が最小となる λ を最適正則化パラメータと呼び、 λ_0 で表すこととする。本章では、QR 分解による正則化法に対する最適正則化パラメータ推定法として、GCV 法、L-カーブ法、および Quasi-Optimal 法の適用について述べる。

3.1 GCV 法

GCV 法 (Generalized cross-validation) は代表的な最適正則化パラメータ推定法の 1 つであり、以下の規準関数 $G(\lambda)$ を最小化する λ を推定値として用いる方法である^{1),6)}。

$$G(\lambda) \equiv \frac{\|(I - A(\lambda))\mathbf{y}\|^2}{(\text{trace}(I - A(\lambda)))^2}. \quad (9)$$

ここで $A(\lambda)$ は $Ax_\lambda = A(\lambda)\mathbf{y}$ を満たす行列である。

GCV 法は、方程式 (2) に対して \mathbf{y} の 1 つの要素 y_i を取り除いた方程式の正則化解が取り除いた y_i をよく推定するように正則化パラメータを求め、かつ正則化パラメータの選択は \mathbf{y} の直交変換に依存しない、という考え方に基づくものである。

1 つの λ に対する規準関数 $G(\lambda)$ の値は、分解 (3) を用いて

$$G(\lambda) = \frac{\sum_{i=1}^k \{(1 - f_i)\mathbf{u}_i^T \mathbf{y}\}^2 + \|\hat{\mathbf{y}}\|^2}{\{\sum_{i=1}^k (1 - f_i) + (m - k)\}^2} \quad (10)$$

として計算することができる。ここで

$$\hat{\mathbf{y}} \equiv \mathbf{y} - UU^T \mathbf{y} \quad (11)$$

である。GCV 規準関数の計算式 (10) の導出は付録 A.3 に示す。

QR 分解による正則化法における GCV 法の規準関数の計算式 (10) は従来の特異値分解による場合と同じであり、よって従来と同様の演算量で GCV 法を導入できる。

3.2 L-カーブ法

L-カーブ法は、最適な正則化パラメータが L-カーブ (8) のコーナーに位置する性質を用い、L-カーブの曲率を規準関数とし、曲率が最大となる λ を最適正則化パラメータの推定値として用いる方法である。

パラメータ λ における L-カーブの曲率 $\kappa(\lambda)$ は

$$\kappa(\lambda) = \frac{|\rho_1'(\lambda)\rho_2''(\lambda) - \rho_1''(\lambda)\rho_2'(\lambda)|}{(\rho_1'(\lambda)^2 + \rho_2'(\lambda)^2)^{3/2}} \quad (12)$$

である。ここで、' は λ に関する微分を表す。

分解 (3) を用いれば L-カーブの座標はそれぞれ

$$\rho_1(\lambda) = \left(\sum_{i=1}^k \{(1 - f_i)\mathbf{u}_i^T \mathbf{y}\}^2 + \|\hat{\mathbf{y}}\|^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$\rho_2(\lambda) = \left(\sum_{i=1}^k \left(f_i \frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{y}}{d_i} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

として表すことができる。ただし、 $\hat{\mathbf{y}}$ は式 (11) により定義される値である。このとき、L-カーブの曲率 $\kappa(\lambda)$ は

$$\kappa(\lambda) = \frac{1}{(\rho_1^2 + \lambda^4 \rho_2^2)^{\frac{3}{2}}} \left| \frac{\rho_1^2 \rho_2^2}{P(\lambda)} - \lambda^2 Q(\lambda) \right|, \quad (13)$$

$$P(\lambda) \equiv \sum_{i=1}^k \frac{d_i^2}{(d_i^2 + \lambda^2)^3} (\mathbf{u}_i^T \mathbf{y})^2, \quad (14)$$

$$Q(\lambda) \equiv \rho_1^2 + \lambda^2 \rho_2^2 \quad (15)$$

として計算することができる。これらの導出は付録 A.4 に示す。

特異値分解を用いた Tikhonov 正則化法の場合も、L-カーブの曲率は式 (13) で表すことができるため、演算量は同じである。

3.3 Quasi-Optimal 法

正則化法では一般に、正則化パラメータが小さい場合は正則化解の誤差が単調減少、正則化パラメータが大きい場合は正則化解の誤差が単調増加する性質を持つ。Tikhonov 正則化法に対する Quasi-Optimal 法はこの性質を利用し、誤差ノルムの微分値の 1 つの上界を表す関数を規準関数として用い、その規準関数を最小化する λ を最適正則化パラメータの推定値として用いる方法である^{3),4)}。

本節ではこの Quasi-Optimal 法の QR 分解による正則化法への適用について示す。まず、正則化解 x_λ の誤差ベクトル $A^\dagger y_0 - x_\lambda$ に対し、重み付き誤差ノルム $e_w(\lambda)$ を以下のように定義する。

$$e_w(\lambda) \equiv \|A^\dagger y_0 - x_\lambda\|_w. \quad (16)$$

ただし、 $\|\cdot\|_w$ は

$$\|\mathbf{x}\|_w \equiv \|RV^T \mathbf{x}\|, \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$$

で定義されるノルムを表す。このとき、重み付き誤差ノルム $e_w(\lambda)$ は以下の定理を満たす。

定理 3 $\beta > 1$ に対し、 $\xi = \log_\beta \lambda^2$ とすると、

$$\left| \frac{d}{d\xi} e_w(\lambda) \right| \leq \left\| \frac{d}{d\xi} RV^T \mathbf{x}_\lambda \right\| \equiv \zeta(\lambda)^{1/2} \quad (17)$$

である。

定理の証明は付録 A.5 に示す。したがって $\zeta(\lambda)^{1/2}$ は、重み付き誤差関数 $e_w(\lambda)$ の ξ に関する微分の上界となる。

定理 3 の関係より、式 (17) の $\zeta(\lambda)$ を最小化する λ が、最適正則化パラメータ λ_0 の推定値となることが期待される。したがって、QR 分解による正則化法に対する Quasi-Optimal 法の規準関数として $\zeta(\lambda)$ を用い、これを最小化する λ を最適正則化パラメータの推定値として用いる方法を提案する。

分解 (3) が得られているとき、規準関数 $\zeta(\lambda)$ は以下の式で与えられる。

$$\zeta(\lambda) = \sum_{i=1}^k \left(\frac{d_i \lambda^2 \log \beta}{(d_i^2 + \lambda^2)^2} \mathbf{u}_i^T \mathbf{y} \right)^2. \quad (18)$$

導出は付録 A.6 に示す。これも Tikhonov 正則化法と同様の演算量で得ることができる。

4. 数値実験

それぞれの最適正則化パラメータ推定法の有効性を確かめるため、推定された正則化パラメータに対する正則化の精度を、従来の特異値分解による正則化と比較し検討する。ただし、係数行列の特異値分解の特異値 d_i および特異ベクトル $\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_i$ を用いて

$$A = \sum_{i=1}^k d_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T = U D V^T \quad (19)$$

と表した場合、これは分解 (3) において $R = I$ と置いた場合に相当し、以下、 U, D, V は同じ記号を用いるが異なるものであることに注意する。

ここでは例として第 1 種フレドホルム型積分方程式 (1) に対し、カーネル $K(s, t)$ が

$$K(s, t) = (\cos(s) + \cos(t)) \left(\frac{\sin(u)}{u} \right)^2,$$

$$u = \pi(\sin(s) + \sin(t)),$$

$$[a, b] = [c, d] = [-\pi/2, \pi/2]$$

である問題を考える。これは 1 次元像再構成問題の 1 つのモデルである⁵⁾。

区間 $[-\pi/2, \pi/2]$ に対して s_i, t_i をそれぞれ等間隔に 100 点ずつとり離散化した方程式

$$A \mathbf{x} = \mathbf{y}_0 + \mathbf{e}, \quad A: 100 \times 100 \quad (20)$$

について、ノイズ \mathbf{e} を含む右辺ベクトル \mathbf{y} から未知のベクトル \mathbf{x} を求める問題を考える。ここで真の解 \mathbf{x}_0 は

$$f(t) = 2e^{-6(t-0.8)^2} + e^{-2(t+0.5)^2}$$

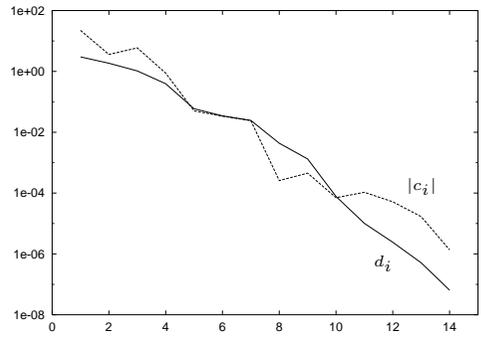


図 1 特異値分解 (19) における特異値 d_i と $|c_i|$
Fig. 1 Singular values d_i and $|c_i|$ for SVD (19).

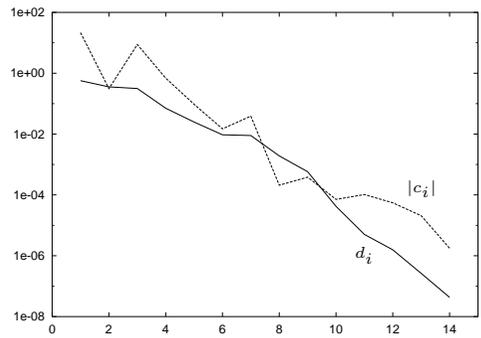


図 2 分解 (3) における対角要素 d_i と $|c_i|$
Fig. 2 Diagonal elements d_i and $|c_i|$ for decomposition (19).

を離散化したものとする。真のデータベクトルは $\mathbf{y}_0 \equiv A \mathbf{x}_0$ とし、ノイズ \mathbf{e} は、平均 0、標準偏差 1.0×10^{-4} からなる正規乱数を要素とするベクトルを用いた。

方程式 (20) に対し、特異値分解 (19) および分解 (3) における対角要素 d_i と $c_i \equiv \mathbf{u}_i^T \mathbf{y}$ の大きさをそれぞれ図 1、図 2 に示す。図より、分解 (3) における d_i は特異値と同様の振舞いをしていることが分かる。ただし、数値的階数決定のためのしきい値 ε は 1.0×10^{-15} を用い、このとき数値的階数 k は 14 であった。

また、分解 (3) における上三角行列 R の条件数は $\text{cond}(A) = 4.12$ であり、この例では R が悪条件でないという仮定を満たし、正則化の演算 (4) での R の逆代入での誤差の影響は少ない。

また、L-カーブ (8) を図 3、図 4 に示す。

QR 分解による正則化法の場合も、従来の特異値分解を用いた場合と同様、コーナーを持つ曲線を描くことが確かめられる。

次に、正則化パラメータ λ に対し、それぞれの最適正則化パラメータ推定法における規準関数と正則化の相対誤差

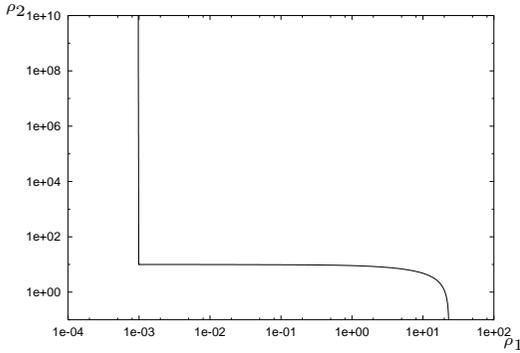


図3 特異値分解による正則化法における L-カーブ
Fig. 3 L-curve in regularization method by SVD.

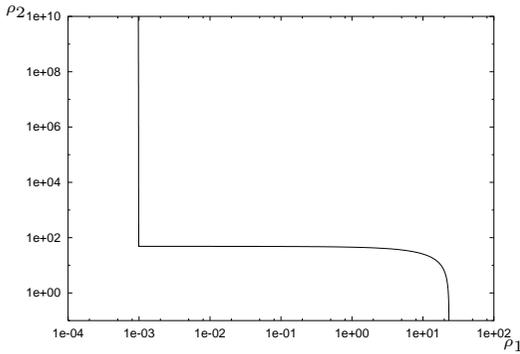


図4 QR 分解による正則化法における L-カーブ
Fig. 4 L-curve in regularization method by QR factorization.

$$e(\lambda) \equiv \frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_\lambda\|}{\|\mathbf{x}_0\|}$$

の関係を図 5, 図 6 に示す. 図中, 点線 1, 2, 3 はそれぞれ GCV 法, L-カーブ法, Quasi-Optimal 法により選択された正則化パラメータを示している. また, 最適正則化パラメータ, およびその推定値により得られた正則化解の相対誤差 $e(\lambda)$ を, 表 1 に示す.

以下, QR 分解による正則化法において, それぞれの推定法で得られたパラメータによる正則化解の精度についての考察を行う.

GCV 法の規準関数を用いた場合, この例ではほぼ最適な正則化解を与えることが表 1 より分かる. また, その精度は従来の特異値分解による正則化法とほぼ同程度である. この例での規準関数 $G(\lambda)$ の特徴としては, いずれも最適正則化パラメータ以下の λ でほぼ水平となっていることがあげられる. 不適切問題から派生する連立 1 次方程式 (2) では, 2 章で述べたように, L-カーブは残差がほぼ一定な垂直な部分を持つ. したがって, 最適正則化パラメータ以下の λ に対する正則化解は残差がほぼ不変であり, 右辺ベクトル \mathbf{y} の評価に基づいた規準 $G(\lambda)$ もほぼ一定となる

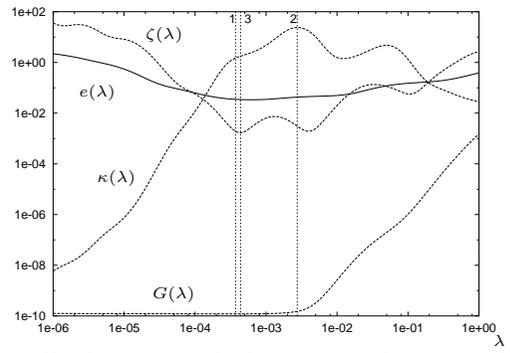


図5 特異値分解による正則化法における最適化規準関数と正則化解の誤差

Fig. 5 Criteria for the optimal parameter and errors of the regularized solutions in regularization method by SVD.

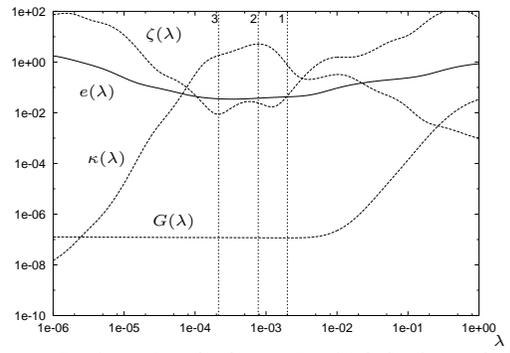


図6 QR 分解による正則化法における最適化規準関数と正則化解の誤差

Fig. 6 Criteria for the optimal parameter and errors of the regularized solutions in regularization method by QR factorization.

表 1 正則化解の誤差
Table 1 Errors of the regularized solutions.

	SVD	QR
$e(\lambda_0)$	3.37×10^{-2}	3.45×10^{-2}
GCV	3.51×10^{-2}	4.23×10^{-2}
L-curve	4.28×10^{-2}	3.75×10^{-2}
Quasi-Optimal	3.44×10^{-2}	3.56×10^{-2}

ためと考えられる.

数値実験で用いているような悪条件性の強い問題では, 従来の特異値分解を用いた正則化法に対する GCV 規準は, 残差がほぼ不変となるパラメータの区間を持つ現象により, ノイズによって $G(\lambda)$ を最小化する λ が変化しやすく, 選択されたパラメータが最適なパラメータと大きく異なる場合があることが指摘されている²⁾. QR 分解による正則化法についても同様の欠点を持つことが考えられる.

L-カーブの曲率を規準とした場合, 図 6 より, 曲率 $\kappa(\lambda)$ が最大となる λ はほぼ最適な精度の正則化解を

与え,したがって,図4のL-カーブのコーナーが最適正則化パラメータに対応していることが分かる.

式(8)で定義されるように,L-カーブ法は残差ノルム $\rho_1(\lambda)$ だけでなく,正則化解の重み付きノルム $\rho_2(\lambda)$ も用いた規準で最適正則化パラメータを推定する手法であり,この数値実験でも見られるように,L-カーブが明確なコーナーを持つ場合は規準関数である曲率 $\kappa(\lambda)$ の最大値も明確となる.ただし,L-カーブが明確なコーナーを持つためには,定理1より, $\lambda \rightarrow 0$ での ρ_2 の値 $\|RV^T A^\dagger \mathbf{y}\|$ が大きな値をとる必要がある.すなわち, \mathbf{y} に含まれるノイズが大きく反映される悪条件性の強い方程式を前提としている.したがって A の悪条件性が弱い場合はL-カーブに明確なコーナーを持たないことが考えられ,この場合,L-カーブ法で選択したパラメータは最適なパラメータと大きく異なることが考えられる.これは従来の特異値分解による正則化法についても同様にいえることである.

また,Quasi-Optimal法により選択された正則化パラメータも,この数値実験ではほぼ最適な正則化解を与えることが図1より確認できる.Quasi-Optimal法は,式(16)の重み付き誤差ノルム $e_w(\lambda)$ に関する定理(定理3),および $e_w(\lambda)$ が $\lambda \rightarrow 0$ と $\lambda \rightarrow \infty$ で増大する性質を利用した手法である.したがってこの手法を用いる場合についても, $\lambda \rightarrow 0$ で誤差ノルム $e_w(\lambda)$ が増大するような悪条件性の強い問題であることが必要となり,悪条件性の弱い方程式に対しては,規準関数 $\zeta(\lambda)$ を最小化する λ は良い推定値とならない場合も考えられる.

以上,3つの推定法を適用した結果,最適正則化パラメータ推定法により選択された正則化パラメータはそれぞれの方法で異なるが,この数値実験ではいずれもほぼ最適な正則化解を与えている.また,従来の特異値分解を用いたTikhonov正則化法に対する推定手法と同様の考え方に基づく規準を導入することにより,特異値分解による正則化法とほぼ同程度の精度の解を与える正則化パラメータを選択することができた.

5. おわりに

我々はQR分解による正則化法が持つ性質をL-カーブを通して示し,また最適正則化パラメータ推定法としてGCV法,L-カーブ法,Quasi-Optimal法を適用する方法について示した.いずれも最適化規準関数は従来の特異値分解によるTikhonov正則化法と同じ演算量で導入でき,高速性を損なうことはない.また,これらの最適正則化パラメータ推定法により選択された正則化パラメータはほぼ最良の正則化解を与え,従

来の特異値分解による正則化解と同程度の精度の解が得られることが数値実験により確認された.

参考文献

- 1) Golub, G.H., Heath, M. and Wahba, G.: Generalized Cross Validation as a Method for Choosing a Good Ridge Parameter, *Technometrics*, Vol.21, No.2, pp.215–223 (1979).
- 2) Hansen, P.C. and O’leary, D.P.: The Use of the L-Curve in the Regularization of Discrete Ill-Posed Problems, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.14, No.6, pp.1487–1503 (1993).
- 3) Kitagawa, T.: A Deterministic Approach to Optimal Regularization, *Japan J. of Appl. Math.*, Vol.4, pp.371–391 (1987).
- 4) Kitagawa, T.: A Numerical Method to Estimate the Optimal Regularization Parameter, *Journal of Information Processing*, Vol.11, No.4, pp.263–270 (1988).
- 5) Shaw, C.B.J.: Improvements of the resolution of an instrument by numerical solution of an integral equation, *J. Math. Anal. Appl.*, Vol.37, pp.83–112 (1972).
- 6) Wahba, G.: *Spline Models for Observational Data*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, Vol.59, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia (1990).
- 7) 細田陽介: 2 回の QR 分解による打ち切り最小 2 乗最小ノルム解, 情報処理学会論文誌, Vol.40, No.3, pp.1051–1055 (1999).
- 8) 細田陽介, 北川高嗣: L-カーブによる不適切問題の最適正則化について, 日本応用数学会論文誌, Vol.2, pp.55–68 (1992).
- 9) 仲田 晋, 北川高嗣, 細田陽介: 直接法を用いた正則化法とその最適化, 日本応用数学会論文誌, Vol.10, No.2, pp.77–87 (2000).

付 録

A.1 定理1の証明

式(3), (4), (8)より,

$$\begin{aligned} \rho_1(\lambda) &= \|\mathbf{y} - A\mathbf{x}_\lambda\| \\ &= \|\mathbf{y} - UD(D^2 + \lambda^2 I)^{-1}DU^T \mathbf{y}\| \\ &= \|\mathbf{y} - UFU^T \mathbf{y}\| \\ &\quad (F \equiv \text{diag}(f_1, \dots, f_k)) \\ &= \left\{ \sum_{i=1}^k \{(1 - f_i)\mathbf{u}_i^T \mathbf{y}\}^2 + \|\hat{\mathbf{y}}\|^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (21) \end{aligned}$$

であり,これより

$$\rho'_1(\lambda) = \frac{2\lambda^3 P(\lambda)}{\rho_1(\lambda)} > 0 \quad (22)$$

が導かれる．ただし， $\hat{\mathbf{y}}$ は式 (11) で定義されるベクトルを表し， $P(\lambda)$ は式 (14) により定義される関数を表す．したがって， $\rho_1(\lambda)$ は λ の単調増加関数である．一方，

$$\begin{aligned}\rho_2(\lambda) &= \|RV^T \mathbf{x}_\lambda\| \\ &= \|(D^2 + \lambda^2 I)^{-1} DU^T \mathbf{y}\| \\ &= \|D^{-1} FU^T \mathbf{y}\| \\ &= \left\{ \sum_{i=1}^k \left(\frac{f_i}{d_i} \mathbf{u}_i^T \mathbf{y} \right)^2 \right\}^{1/2},\end{aligned}\quad (23)$$

より，

$$\rho_2'(\lambda) = \frac{-2\lambda P(\lambda)}{\rho_2(\lambda)} < 0. \quad (24)$$

したがって $\rho_2(\lambda)$ は λ の単調減少関数である．収束については式 (21)，(23) より明らか． ■

A.2 定理 2 の証明

式 (22) および (24) より，

$$\frac{d\rho_2(\lambda)}{d\rho_1(\lambda)} < 0. \quad (25)$$

したがって $\rho_2(\lambda)$ は $\rho_1(\lambda)$ の単調減少関数． ■

A.3 GCV 規準関数 (10) の導出

式 (21) 中の計算式より，

$$A\mathbf{x}_\lambda = UFU^T \mathbf{y}$$

であり，したがって

$$\begin{aligned}A(\lambda) &= UFU^T \\ &= \sum_{i=1}^k f_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^T.\end{aligned}$$

さらに対角和と固有値の関係より，

$$\text{trace}(I - A(\lambda)) = \sum_{i=1}^k (1 - f_i) + (m - k) \quad (26)$$

である．一方， $\mathbf{y} = \sum_{i=1}^k (\mathbf{u}_i^T \mathbf{y}) \mathbf{u}_i + \hat{\mathbf{y}}$ と表せ，これより，

$$\begin{aligned}\|(I - A(\lambda))\mathbf{y}\|^2 &= \|\mathbf{y} - A(\lambda)\mathbf{y}\|^2 \\ &= \sum_{i=1}^k \{(1 - f_i) \mathbf{u}_i^T \mathbf{y}\}^2 + \|\hat{\mathbf{y}}\|^2\end{aligned}\quad (27)$$

を得る．式 (26) と (27) を GCV 規準関数の定義式 (9) に代入することにより，計算式 (10) が導かれる．

A.4 L-カーブの曲率 (13) の導出

式 (22)，(24) より，

$$\begin{aligned}\rho_1'' &= \frac{2\lambda^2}{\rho_1^3} (3P\rho_1^2 + \lambda P' \rho_1^2 - 2\lambda^4 P^2), \\ \rho_2'' &= \frac{-2}{\rho_2^3} (P\rho_2^2 + \lambda P' \rho_2^2 + 2\lambda^2 P^2).\end{aligned}$$

したがって，

$$\begin{aligned}\rho_1' \rho_2'' - \rho_1'' \rho_2' &= \frac{8\lambda^3 P^2}{\rho_1^3 \rho_2^3} (\rho_1^2 \rho_2^2 - \lambda^2 PQ), \\ (\rho_1'^2 + \rho_2'^2)^{3/2} &= \frac{8\lambda^3 P^3}{\rho_1^3 \rho_2^3} (\rho_1^2 + \lambda^4 \rho_2^2)^{3/2}.\end{aligned}$$

ただし， Q は式 (15) により定義される関数である．式 (12) に代入することにより，曲率 (13) が導かれる．

A.5 定理 3 の証明

$$\begin{aligned}|e_w(\lambda + \Delta\lambda) - e_w(\lambda)| &= \left| \|A^\dagger \mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_{\lambda + \Delta\lambda}\|_w - \|A^\dagger \mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_\lambda\|_w \right| \\ &\leq \|(A^\dagger \mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_{\lambda + \Delta\lambda}) - (A^\dagger \mathbf{y}_0 - \mathbf{x}_\lambda)\|_w \\ &= \|RV^T \mathbf{x}_{\lambda + \Delta\lambda} - RV^T \mathbf{x}_\lambda\|.\end{aligned}$$

両辺に $1/\lambda$ を掛けて $\lambda \rightarrow 0$ とすることにより，

$$\left| \frac{d}{d\lambda} e_w(\lambda) \right| \leq \left\| \frac{d}{d\lambda} RV^T \mathbf{x}_\lambda \right\|$$

を得る． $d\lambda/d\xi = (\lambda \log \beta)/2$ より，両辺に $(\lambda \log \beta)/2$ を掛けて，

$$\begin{aligned}\left| \frac{\lambda \log \beta}{2} \cdot \frac{d}{d\lambda} e_w(\lambda) \right| &\leq \left\| \frac{\lambda \log \beta}{2} \cdot \frac{d}{d\lambda} RV^T \mathbf{x}_\lambda \right\|, \\ \left| \frac{d\lambda}{d\xi} \cdot \frac{d}{d\lambda} e_w(\lambda) \right| &\leq \left\| \frac{d\lambda}{d\xi} \cdot \frac{d}{d\lambda} RV^T \mathbf{x}_\lambda \right\|.\end{aligned}$$

これより，式 (17) を得る． ■

A.6 Quasi-Optimal 法の規準関数 (18) の導出

$$\begin{aligned}RV^T \mathbf{x}_\lambda &= D^{-1} FU^T \mathbf{y}, \\ \frac{d\lambda}{d\xi} &= \frac{\lambda \log \beta}{2}\end{aligned}$$

より，

$$\begin{aligned}\zeta(\lambda) &= \left\| \frac{d}{d\xi} RV^T \mathbf{x}_\lambda \right\|^2 \\ &= \left\| \frac{d\lambda}{d\xi} \cdot \frac{d}{d\lambda} D^{-1} FU^T \mathbf{y} \right\|^2 \\ &= \sum_{i=1}^k \left(\frac{d_i \lambda^2 \log \beta}{(d_i^2 + \lambda^2)^2} \mathbf{u}_i^T \mathbf{y} \right)^2\end{aligned}$$

を得る．

(平成 12 年 5 月 19 日受付)

(平成 13 年 1 月 11 日採録)



北川 高嗣 (正会員)

1981年名古屋大学大学院工学研究科情報工学専攻博士後期課程中退, その後愛媛大学理学部数学科助手, 講師を経て, 現在筑波大学電子・情報工学系助教授・工学博士・専門分

野, 数値解析, 意味の数学モデル.



仲田 晋 (学生会員)

1998年筑波大学大学院理工学研究科修士課程修了, 現在, 筑波大学大学院工学研究科博士課程在学中. 専門分野, 数値解析.

