

Tikhonov 正則化を用いた GKB-GCV 法の収束特性の解析 *

富樫 大 †

慶應義塾大学大学院
理工学研究科基礎理工学専攻

野寺 隆 ‡

慶應義塾大学
理工学部数理科学科

概要

GKB-GCV 法は、画像処理の分野などで発生する、大規模一般 Tikhonov 正則化問題を解く反復法の 1 つとして、近年我々が提案した手法である。本稿では、数値実験を用いて GKB-GCV 法の収束解析について述べる。

1 はじめに

次の形で与えられる大規模な非適切問題に対し、安定な解を計算することを考える。

$$\mathbf{x}_{\text{LS}} = \underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_2^2 \quad (1)$$

ただし、行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$ は悪条件であり、データベクトル $\mathbf{b}$ は、未知の誤差項 ϵ と、理論解 $\mathbf{x}_{\text{exact}}$ を用いて、 $\mathbf{b} = A\mathbf{x}_{\text{exact}} + \epsilon$ とする。式 (1) の解は未知の誤差 ϵ に支配される。一方、Tikhonov 正則化法 [5] は、 $\mathbf{x}_{\text{exact}}$ に対する安定的な近似解を次式で与えることができる。

$$\mathbf{x}_\lambda = \underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n}{\operatorname{argmin}} \{\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_2^2 + \lambda^2 \|L\mathbf{x}\|_2^2\}, \quad (2)$$

ただし、 $L \in \mathbb{R}^{p \times n}$ は正則化行列であり、 $\lambda > 0$ は正則化パラメータである。そして、正則化法がより良い近似解を与えるためには、適した正則化パラメータの決定が必要となることが知られている。

2 GKB-GCV 法

GKB-GCV 法は、GKB 法と GCV 法 [3] に基づく手法である。GKB 法は二重対角化を行うアルゴリズムであり、行列 A に対して初期値 $\mathbf{b}/\|\mathbf{b}\|_2$ とし反復

*The GKB-GCV Method for solving the General Form of the Tikhonov Regularization

†Dai Togashi, School of Fundamental Science and Technology, Graduate School of Science and Technology, Keio University.

‡Takashi Nodera, Department of Mathematics, Faculty of Science and Technology, Keio University.

を行った場合、 $k < n$ ステップ後、以下の式を満たす正規直交列を持つ 2 つの行列 $Y_{k+1} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_{k+1}] \in \mathbb{R}^{m \times (k+1)}$, $W_k = [\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_k] \in \mathbb{R}^{n \times k}$ と、下記の二重対角行列 $B_k \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k}$ を生成する。

$$B_k = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & & & \\ & \beta_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \alpha_k & \\ & & & \beta_{k+1} & \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k},$$

$$\beta_1 Y_{k+1} \mathbf{e}_1 = \mathbf{b} = \beta_1 \mathbf{y}_1,$$

$$AW_k = Y_{k+1} B_k,$$

$$A^T Y_{k+1} = W_k B_k^T + \alpha_{k+1} \mathbf{w}_{k+1} \mathbf{e}_{k+1}^T,$$

ただし、 $\mathbf{e}_i \in \mathbb{R}^{k+1}$ は i 番目の単位ベクトルである。特に W_k の列は、Krylov 部分空間 $\mathcal{K}_k(A^T A, A^T \mathbf{b})$ の正規直交基底を為す。今、 $\mathcal{K}_k(A^T A, A^T \mathbf{b})$ 上での最小化を考え、最小二乗解を $\mathbf{x}_\lambda^{(k)}$ とすると、式 (2) は次式に変形することが出来る。

$$\mathbf{x}_\lambda^{(k)} = W_k \mathbf{y}_\lambda^{(k)},$$

$$\mathbf{y}_\lambda^{(k)} = \underset{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k}{\operatorname{argmin}} \{\|B_k \mathbf{y} - \beta_1 \mathbf{e}_1\|_2^2 + \lambda^2 \|L W_k \mathbf{y}\|_2^2\}. \quad (3)$$

さらに PROJ-L 法 [1] と同様の変形を考え、 $L W_k = Q_k R_k$ と QR 分解を行うと、式 (3) は次式のように変形できる。

$$\mathbf{y}_\lambda^{(k)} = \underset{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k}{\operatorname{argmin}} \{\|B_k \mathbf{y} - \beta_1 \mathbf{e}_1\|_2^2 + \lambda \|R_k \mathbf{y}\|_2^2\}.$$

上式より、 $\mathcal{K}_k(A^T A, A^T \mathbf{b})$ 上での最小化は、 $(2k+1) \times k$ の最小二乗問題に帰着することが出来る。

GCV 法は正則化パラメータの決定手法の一つであり、次の関数 $G(\lambda)$ の最小点を求めることにより、 λ の決定を行う。

$$G(\lambda) = \frac{\|(I_m - A A_{\lambda,L}^+) \mathbf{b}\|_2^2}{(\operatorname{trace}(I_m - A A_{\lambda,L}^+))^2}, \quad (4)$$

ただし, $A_{\lambda,L}^+ = (A^T A + \lambda^2 L^T L)^{-1} A^T$ である. これは k ステップ目において, GKB-GCV 法は W-GCV 法 [2] とは異なる手法を用いており, Novati ら [4] によって提案された $G(\lambda)$ の近似である次の関数の最小点を求める手法を用いる.

$$G_k(\lambda) = \frac{\|(I_m - AW_k(B_k)_{\lambda,R_k}^+ Y_{k+1}^T) \mathbf{b}\|_2^2}{(\text{trace}(I_m - AW_k(B_k)_{\lambda,R_k}^+ Y_{k+1}^T))^2}. \quad (5)$$

式 (5) は, GSVD(B_k, R_k) を用いることにより, 次式に変形することが出来る.

$$G_k(\lambda) = \frac{\beta_1^2 \sum_{i=1}^k \frac{\lambda_k^2 \mathbf{u}_{i(k)}^T \mathbf{e}_1^2}{\sigma_{i(k)}^2 + \lambda_k^2} + (\mathbf{u}_{k+1(k)}^T \mathbf{e}_1)^2}{m - \sum_{i=1}^k \frac{\sigma_{i(k)}^2}{\sigma_{i(k)}^2 + \lambda_k^2}}.$$

ただし, $B_k = U_k S_k Z_k^{-1}$, $R_k = V_k C_k Z_k^{-1}$ であり, $U_k = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k]$, $V_k = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k]$ は直交行列, Z_k は正則な行列, S_k, C_k は, $S_k^T S_k + C_k^T C_k = I_k$ を満たす非負の要素からなる対角行列である.

3 収束解析

λ_k を次式で定義し, $\lambda \leq 1$ と仮定する.

$$\lambda_k = \text{argmin} G_k(\lambda)$$

ここで, 理論解 $\mathbf{x}_{\text{exact}}$ と, k 反復目の近似解 $\mathbf{x}_{\lambda_k}^{(k)}$ の誤差ノルムは, 次式のように分解することが可能である.

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_{\text{exact}} - \mathbf{x}_{\lambda_k}^{(k)}\|_2 &\leq \|\mathbf{x}_{\text{exact}} - \mathbf{x}_{\lambda_n}^{(n)}\|_2 \\ &+ \sum_{i=k}^{n-1} \|\mathbf{x}_{\lambda_{i+1}}^{(i+1)} - \mathbf{x}_{\lambda_i}^{(i)}\|_2 \end{aligned} \quad (6)$$

まず右辺の第 1 項は正則化による安定化によって生じる誤差である. 第 2 項は, 明らかに k に対して単調収束であり, 数値実験より収束性を確かめることができる.

問題には, MATLAB のパッケージに内蔵されている *blur* を使用し, $n = 30$, $\text{band} = 3$, $\sigma = 0.7$ とした. 図 1 は, 実線が式 (6) の右辺の第 2 項を表しており, 破線が式 (6) の左辺から右辺の第 1 項を引いたものを表している. 図 1 からわかるように, 上からおさえることは出来ているが, 実際の値よりも大きく見積もり過ぎてしまっている.

4 結論

本稿では, 近年提案を行った GKB-GCV 法の収束解析を数値実験を用いて行った. しかし, 不等式が

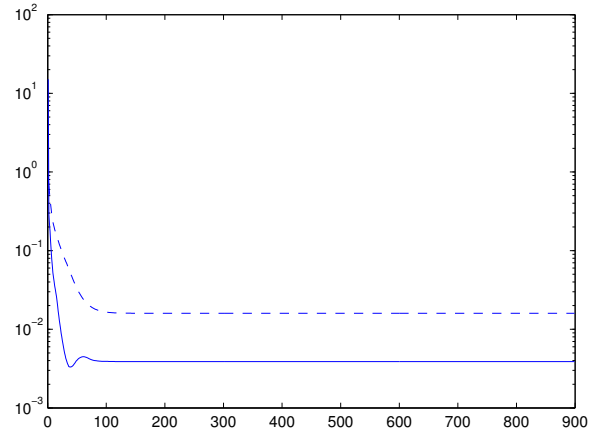


図 1 *blur*: $n = 30$, $\text{band} = 3$, $\sigma = 0.7$

大きく見積もり過ぎてしまっているために, 実際の誤差よりも大きな上界を与えている. そのため, 今後の課題として, 実際の誤差に近いような上界を与えるような収束解析を行う必要がある.

参考文献

- [1] Bazán, F. S. V., Cunha, M. C. C. and Borges, L. S., “Extension of GKB-FP algorithm to large-scale general-form Tikhonov regularization,” Numer. Linear Algebra Appl., Vol. 21, pp. 316–339, 2014.
- [2] Chung, J., Nagy, J. G. and O’Leary, D. P., “A weighted-GCV method for Lanczos-hybrid regularization,” ETNA, Vol. 28, pp. 149–167, 2008.
- [3] Golub, G. H., Heath, M. and Wahba, G., “Generalized cross-validation as a method for choosing a good ridge parameter,” Technometrics, Vol. 21, pp. 215–222, 1979.
- [4] Novati, P., and Russo, M. R., “A GCV based Arnoldi-Tikhonov regularization method,” BIT Numer. Math., Vol. 54, pp. 501–521, 2014.
- [5] Tikhonov, A. N., “Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method,” Soviet Mathematics Doklady, Vol. 4, pp. 1035–1038, 1963.