Vol.2011-HPC-130 No.47
2011/7/28

# 最小二乗問題に対する block Gram-Schmidt 法の適用

松 尾 洋 一[†1]　野 寺 隆[†2]

Gram-Schmidt 法は downdating を含む最小二乗解を求める問題に対しても，有用である．Cholesky 分解やハウスホルダー変換を用いた場合は，直交行列 $Q$ を保持する必要がない分，安定性に欠ける面がある．一方，Gram-Schmidt 法に基づく手法は，再直交化などにより行列 $X$ が悪条件の場合にも安定的に新しい QR 分解 $\tilde{Q}\tilde{R}$ を生成することができる．しかし，古典的な Gram-Schmidt 法は，一度に複数の行数を取り除くような block downdating 問題の場合は非効率である．block Gram-Schmidt 法は，$Q$ のデータを使う回数を減らしキャッシュメモリを効率的に使用することにより，直交化をより効率的に行うことができる．これによって，block downdating の QR 分解をより高速に求めることができる．本発表では，block Gram-Schmidt 法を用いた block downdating に対する手法を提案する．

# Block Gram-Schmidt Procedure for Downdating of Least Squares Solutions.

Yoichi Matsuo [†1] and Takashi Nodera[†2]

The classical Gram-Schmidt procedure is effective for downdating of the least squares problems. Solvinf the least squares problem, the Cholesky factorization or Householder factorization need not to store the orthogonal matrix $Q$, but sometimes these break down. Conversely, using reorthogonalization, the classical Gram-Schmidt methods have stability and generate a new QR factrization $\tilde{Q}\tilde{R}$. However, it is not effective when we want to delete several rows from $X$ and $s$, which is the block downdating problem.

The block Gram-Schmidt procedure can orthogonalize $X$ more effective. Using this process, we are able to generate the QR factorization faster. In this paper, we propose a new method for the block downdating problems with the block Gram-Schmidt procedure.

## 1. 背　景

信号処理において，信号が他の信号に干渉され，うまく受信できないという問題が起きることがある．このようなとき，干渉してくる信号の影響を最小限にするように値を操作することを考える．これらの問題は最小二乗問題に帰着される．$X \in \mathbb{R}^{n\times p}$，$n > p$，$s \in \mathbb{R}^n$ に対して，次のような最適化問題を考える．

$$\min_w \|Xw - s\| \tag{1.1}$$

$X$ が QR 分解可能であるとすると，次式が成り立つ．

$$(X\ s) = Q\begin{pmatrix} R & u \\ 0 & \rho \end{pmatrix}, \quad Q \in \mathbb{R}^{n\times n},\ R \in \mathbb{R}^{n\times p} \tag{1.2}$$

このとき，最小二乗問題の解 $w$ は，次式で求めることができる．

$$\begin{aligned} & Xw = s \\ \Leftrightarrow\ & QRw = s \\ \Leftrightarrow\ & Rw = Q^T s = u \end{aligned} \tag{1.3}$$

信号処理から出てくる問題は，しばしば downdating によって修正された問題を扱うことになる．downdating とは，$X$ と $s$ の古いデータ $\begin{pmatrix} z^T & \sigma \end{pmatrix}$ に対して，次式のような問題を考えることである．すなわち，

$$X = \begin{pmatrix} z^T \\ \tilde{X} \end{pmatrix}, \quad s = \begin{pmatrix} \sigma \\ \tilde{s} \end{pmatrix}$$

に対して，式 (1.1) と同様に次式のような最適化問題を新たに考える．

$$\min_{\tilde{w}} \|\tilde{X}\tilde{w} - \tilde{s}\| \tag{1.4}$$

ここで，$\tilde{X}$ の新しい QR 分解 $\tilde{Q}\tilde{R}$ から，(1.3) 式と同様に $\tilde{w}$ を求めることになる．

$$\tilde{R}\tilde{w} = \tilde{s} \tag{1.5}$$

†1 慶應大学 理工学研究科
keio University Graduate School of Science and Technology
†2 慶應大学 理工学部数理科学科
Dept. of Math., keio University,
神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1，223-8522.
3-14-1, Hiyoshi Kohoku, Yokohama 223-8522, JAPAN.

ただし，$\tilde{w}$ が修正された問題に対する解となる．

downdating を含む最小二乗法を解く手法にはさまざまな解法が用いられる．Cholesky 分解により得られた上三角行列を用いた行列 $R$ に対し，行列 $\tilde{R}$ は次式で計算することができる．

$$\tilde{R}^T\tilde{R} = R^TR - z^Tz \tag{1.6}$$

こののような計算手法は単純ではあるが，少し問題がある．Stewart 5) は，特定の条件下で $R$ と $z$ の小さい摂動が，$\tilde{R}$ に大きな摂動をもたらすことを示している．また，2 章で述べる block downdating においても，これと同様の手法は不安定であることが示されている[2)]．修正 Gram-Schmidt 分解による方法は，Gram-Schmidt 法と比べ $Q$ の記憶領域を削減できるだけでなく，Gram-Schmidt 法の特徴でもある再直交化を使うことによって，$\tilde{X}$ の条件数が悪い場合に有効である[1),7),4)]．もう 1 つの代表的な手法として，Householder 分解を使うものがある．[3),4)] これは行列 $Q$ を記憶しておく必要がなく効率的である．また，downdating において，複数の行を同時に消去する場合がある．それが block downdating である[2),6)]．古典的な，あるいは修正 Gram-Schmidt 法は，一列ずつ直交化するのでこの場合は非効率である．またハウスホルダー変換を利用した場合，計算コストが大きくなることが考えられる．再直交化付きの block Gram-Schmidt 法は，このような場合に有効な手法である．

本稿では，2 章で，block downdating について述べる．そして，3 章で block Gram-Schmidt 法を用いた新しい手法を提案する．

## 2. Block downdating

行列 $X$ が QR 分解可能であると仮定する．

$$X = QR$$

ここで，$Z \in \mathbb{R}^{m\times p}$, $z \in \mathbb{R}^m$, $n \le m$ に対して，次式を考える．

$$X = \begin{pmatrix} Z \\ \tilde{X} \end{pmatrix}, \quad s = \begin{pmatrix} z \\ \tilde{s} \end{pmatrix} \tag{2.1}$$

式 (2.1) から $\tilde{X}$ に対する新しい QR 分解を求めたい．

$$\tilde{X} = \tilde{Q}\tilde{R} \tag{2.2}$$

式 (1.2)，式 () を合わせると次式が成り立つ．

$$(X\ s) = \begin{pmatrix} Z & z \\ \tilde{X} & \tilde{s} \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} R & u \\ 0 & \rho \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

次に $(Z\ z)$ を取り除くことを考える．まず，次式を定義する．

$$I'_m = \begin{pmatrix} I_m \\ 0 \end{pmatrix}$$

ただし $I_m \in \mathbb{R}^{m\times m}$ は単位行列である．この式を使って，次式が成り立つ．

$$\begin{pmatrix} I'_t\ X\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_m & Z & z \\ 0 & \tilde{X} & \tilde{s} \end{pmatrix} \tag{2.4}$$

さらに，式 (2.3) より，以下の式が成り立つ．

$$Q^T \begin{pmatrix} I'_m\ X\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_1 & R & u \\ q^T & 0 & \rho \\ Q_2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.5}$$

ただし，$\begin{pmatrix} Q_1^T\ q^T\ Q_2^T \end{pmatrix}$ は，$Q$ の上から $m$ 行を表す．次に，以下を満たす直交行列 $U$ を求める．

$$U^TQ^T \begin{pmatrix} I'_m\ X\ s \end{pmatrix} = U^T \begin{pmatrix} Q_1 & R & u \\ q^T & 0 & \rho \\ Q_2 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_m & Y & y \\ 0 & \tilde{R} & \tilde{u} \\ 0 & 0 & \tilde{\rho} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

ここで，$\widehat{Q} = QU$ とすると，式 (2.6) より，$\widehat{Q}^T I'_k = I'_k$ となるので，次式が成立する．

$$\widehat{Q} = \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ 0 & \tilde{Q} \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

$$Y = Z\ y = z \tag{2.8}$$

よって，式 (2.7), (2.8) より，新しい QR 分解が得られる．

$$\begin{pmatrix}\tilde{X} & \tilde{s}\end{pmatrix} = \tilde{Q}\begin{pmatrix}\tilde{R} & \tilde{u}\\ 0 & \tilde{\rho}\\ 0 & 0\end{pmatrix} \tag{2.9}$$

以上から，QR 分解の downdating は $Q$ の最初の $m$ 行に対する直交行列 $U$ で決まることがわかる．

## 3. Block Gram-Schmidt downdating

2 章で block downdating について述べた．これに block Gram-Schmidt 法を適用させた手法を提案する．これは，基本的に古典的な Gram-Schmidt 法による手法を block 化して拡張したものである．

まず，以下のように定義する．

$$Q = \begin{pmatrix}Q_1\\ Q_2\end{pmatrix},\quad \widehat{Q} \equiv \begin{pmatrix}Q_1 & v\\ Q_2 & y\end{pmatrix}$$

式 (2.3) より，次式が成立する．

$$(X\ s) = \begin{pmatrix}Z^T & z\\ \tilde{X} & \tilde{s}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}Q_1 & v & I_m\\ Q_2 & y & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}R & u\\ 0 & \rho\\ 0 & 0\end{pmatrix} \tag{3.1}$$

ここで，$I_m$ を $Q$ に対して block Gram-Schmidt 法を用いて直交化させる．この結果より，次式が得られる．

$$\begin{pmatrix}Q_1 & v & 1\\ Q_2 & y & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}Q_1 & v & f\\ Q_2 & y & h\end{pmatrix}\begin{pmatrix}I_m & 0 & Q_1\\ 0 & 1 & v\\ 0 & 0 & \tilde{f}\end{pmatrix} \tag{3.2}$$

これより，$f = \tilde{f}$ が成り立つので，式 (3.1) と式 (3.2) より以下を得る．

$$\begin{pmatrix}Z^T & z\\ \tilde{X} & \tilde{s}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}Q_1 & v & f\\ Q_2 & y & h\end{pmatrix}\begin{pmatrix}R & u\\ 0 & \rho\\ 0 & 0\end{pmatrix} \tag{3.3}$$

---

input:$X \in \mathbb{R}^{n\times m}, Q \in \mathbb{R}^{n\times m}, R \in \mathbb{R}^{m\times m}$
output:$\tilde{R} \in \mathbb{R}^{m\times m}$
orthogonalize $I_k$ against $Q$ with block Gram-Schmidt method
  and make a matrix $L$
$\tilde{v} := L[1; 1:k]$
$h := L[2:k; :]$
determine the orthogonal matrix $U$ as Givens rotation.
  $(001) := (Q_1 v \tilde{v})U$
  $(\tilde{Q}\tilde{y}\tilde{h}) = (Q_2 y h)U$
update $R$ by $U^T$
  $\tilde{R} := U^T R$
  $\tilde{u} := U^T u$
  $\tilde{\rho} := U^T \rho$

---

**図 1** block downdating のアルゴリズム

次に，以下を満たす直交行列 $U$ を求める．

$$\begin{pmatrix}Q_1 & v & f\\ Q_2 & y & h\end{pmatrix} U = \begin{pmatrix}0 & 0 & \tilde{v}\\ \tilde{Q}_2 & \tilde{z} & \tilde{h}\end{pmatrix} \tag{3.4}$$

直交行列は大きさを保存する変換なので，$\tilde{v} = 1$ とすることができる．さらに，$\begin{pmatrix}\tilde{v} & \tilde{h}\end{pmatrix}^T$ は，単位行列だったので $h = 0$ となる．よって，式 (3.4) より次式が求まる．

$$\begin{pmatrix}Z^T & z\\ \tilde{X} & \tilde{s}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & 0 & I_m\\ \tilde{Q}_2 & \tilde{y} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\tilde{R} & \tilde{u}\\ 0 & \tilde{\rho}\\ Z^T & z\end{pmatrix} \tag{3.5}$$

ただし，$U$ は次式を満たす．

$$U^T\begin{pmatrix}R & u\\ 0 & \rho\\ 0 & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\tilde{R} & \tilde{u}\\ 0 & \tilde{\rho}\\ Z^T & z\end{pmatrix} \tag{3.6}$$

よって，以下の block downdating を得る．

Vol.2011-HPC-130 No.47
2011/7/28

$$\begin{pmatrix}\tilde{X} & \tilde{s}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\tilde{Q}_2 & \tilde{y}\end{pmatrix} \begin{pmatrix}\tilde{R} & \tilde{u} \\ 0 & \tilde{\rho}\end{pmatrix} \tag{3.7}$$

以上より，block downdating のアルゴリズムは図 1 のようになる．

## 4. 数値実験

数値実験の結果は学会当日に発表する．

## 参考文献

1) Bjorck, A., Park, H., and Elden, L., "*Accurate Downdating of Least Square Solutions*" SIAM J. MATRIX ANAL. APPL., Vol. 15, pp. 549–568, 1994.
2) Elden, L., and Park, H., "*Block Downdating of Least Square Solutions*" SIAM J. MATRIX ANAL. APPL., Vol. 15, pp. 1018–1034, 1994.
3) Charles, M. and Allan, O. Steinhardt, "*Hyperbolic Householder Transforms*" SIAM J. MATRIX ANAL. APPL., Vol. 9, pp. 269–290, 1988.
4) Qiaohua, Liu, "*Modified Gram-Schmidt-Based Methods for Downdating of Cholesky Factorization*" J. COMPUT. APPL. MATH., Vol. 235, pp. 1897–1905, 2011.
5) Stewart, G. W., "*The Effect of Rounding Errors on an Algorithm for Downdating a Cholesky Factorization*" J. Inst. Math. Appl., Vol. 23, pp. 203–213, 1979.
6) Stewart, G. W., "*Block Gram-Schmidt Orthogonalization*" SIAM J. SCI. COMPUT, Vol. 31, pp. 761–775, 2008.
7) Yoo, K., and Park, H., "*Accurate Downdating of a Modified Gram-Schmidt QR Decomposition*" BIT., Vol. 36, pp. 166–181, 1996.