

DA  
760  
1989  
(2)

# 共役残差法の一般化

筑波大学大学院博士課程  
工学研究科電子情報工学専攻

張紹良

1989年

92005173

# 目次

第一章 序論	1
第二章 共役残差法の発展の歩み	4
2.1 非対称連立1次方程式のための共役残差法の基本原理	4
2.2 共役残差法の収束における主な結果	6
第三章 最小二乗問題とその主な数値解法	7
3.1 最小二乗問題と一般逆行列	7
3.2 最小二乗問題の直接法	10
3.3 最小二乗問題の反復法	13
3.4 最小二乗問題の数値解法のまとめ	14
第四章 重み付きの最小二乗問題のための一般化共役残差法	15
4.1 一般化共役残差法の提案	15
4.2 一般化共役残差法の性質	16
4.3 一般化共役残差法の誤差評価	20
4.4 写像行列の選択についての考察	28
第五章 データの平滑化への応用	32
5.1 データの平滑化	32
5.2 ベイズモデルと情報基準ABIC	33
5.3 離散スプラインの性質	35
5.4 数値実験結果とその考察	37
第六章 共役残差法の、不定な連立1次方程式への応用	42
6.1 ランク落ちの非対称連立1次方程式に対する共役残差法の収束特性	42
6.2 収束の必要十分条件とその意味	43
6.3 数値実験の結果	48
第七章 結論	52
謝辞	53
参考文献	54

## 第一章 序論

共役残差法 ( Conjugate Residual Methods ) は共役勾配法の一般化として開発された。  $n$  次元連立 1 次方程式の数値解法として、有限回の計算回数で厳密解を得られるという直接解法の性質と、行列とベクトルの積和計算のみを必要とするという反復法の性質とを兼ね備えた大変エレガントな解法である。非対称連立 1 次方程式を解くとき、この解法が反復法としての収束するための十分条件が与えられたことはよく知られている。すなわち、この解法は非対称行列の対称部分が正定値の場合に収束が保証されている。近年、この解法は適当な前処理と結合されて非対称行列方程式を解く代表的な算法の一つになっている。

本論文では、①：この解法を重み付きの最小二乗問題に拡張した一般化アルゴリズムを提案し、この一般化共役残差法の収束特性に関する理論的な解析と、実際問題に応用した場合に数値的な分析を行う。②：この解法の応用範囲をフルランクでない非対称連立 1 次方程式に拡張し、この場合の共役残差法の収束するための必要十分条件を与え、数値的な考察を行う。

第一部：最小二乗法はデータ解析の最も基本的な手法であり、科学研究やエンジニアリングにおける多くの実験を行うあらゆる分野で広く利用される。従来の最小二乗問題を求める方法の中で、QR法などの正規方程式を用いない解法のほとんどは、直接法である。しかし、データ平滑化などの大規模な問題において、大型の疎行列が現れるので、計算量や記憶容量の面で、直接法は必ずしも有利ではない。このような問題に対する一つの有効な反復解法を提案することが本研究の一つの目的である。この解法は各反復において、行列とベクトルの掛け算のみを必要とするだけで直接法のように行列

のすべての要素を配列として記憶する必要が全くないという利点を持っている。

共役残差法は、各反復において決定された探索方向に関して、残差ベクトルのノルムを最小にするようなアルゴリズムであるので、線形最小二乗問題にも使えるはずである。本研究では、探索方向を決める写像行列の概念を導入し、この共役残差法を線形最小二乗法に拡張した一般化共役残差法のアルゴリズムを提案し、写像行列が満たすべき条件について考察する。

一般化共役残差法の実用性を保証するために、この解法の収束特性について、必要十分条件を与え、数学的に証明し、残差の減少率の上限を与える。その条件と誤差評価に関する研究から、写像行列の選び方と収束率の関係を検討し、いくつかの写像行列の使い方を理論的に導入し、この解法の実際の数値計算を可能する分析を行う。写像行列についての条件は緩いので、選び方には多くの自由度があり、多様なアルゴリズムが可能にすることが期待できる。

本研究で扱う応用問題は、データ解析におけるあてはめの問題であり、大型でスパースな行列を扱う最小二乗問題に帰着する。問題の数値解法として、一般化共役残差法を用いる。離散スプラインによるパラメータ付きの平滑化の計算において、残差の減少の振舞い、写像行列の選び方、このアルゴリズムの数値計算上の利点を示す。

第二部：改めて、従来の共役残差法の収束問題を深く研究する。第一部の結論を非対称連立1次方程式  $Ax = b$  に適用し、係数行列がランクを落ちる場合も含め、連立1次方程式のための共役残差法の収束問題を解決し、収束条件を幾何的に説明する。

この解法は特異な行列を係数とする非対称連立1次方程式に使えるようになる。例えば、非圧縮粘性流体のNavier-Stokes方程式や拡散方程式など偏微分方程式において、境界を全周Neumann条件として、

差分法などで離散化すると、線形連立 1 次方程式が得られるが、このとき、係数行列のランクが一つ落ちる。このようなフルランクでない方程式に共役残差法を用いる場合の、アルゴリズムの収束特性を研究し、収束を保証するための必要十分条件を考察し、および初期値の選択と収束の関係などの分析を行い、数値解析を行う。

本論文は上記の二つ部分を目標にして、次のように構成される。まず第二章では、従来の共役残差法の基本原理について述べ、主な結果を紹介する。第三章では、最小二乗法に関する一般的な理論を簡単に述べる。第四章では、共役残差法を重み付きの最小二乗問題に拡張し、アルゴリズムを提案する。また、このアルゴリズムが収束するための必要十分条件を与え、中心となる収束定理を証明し、写像行列の選び方と収束率の関係などの収束特性について述べる。第五章では、離散スプラインモデルによるデータのあてはめの問題を一つの応用例に取り上げて、数値計算の結果を考察し、収束定理を確認する。そして、第六章において、非対称連立 1 次方程式における共役残差法に対して、係数行列がランクを落ちる場合も含め、アルゴリズムの収束問題を踏まえ、収束の必要十分条件を設け、収束定理を証明し、簡単な数値例を通じて、アルゴリズムの実用性をチェックする。

## 第二章 共役残差法の発展の歩み

本章では、非対称連立1次方程式の数値解法の一つである共役残差法を紹介する[3],[4],[5]。この解法を最小二乗問題に拡張した一般化アルゴリズムを提案するための準備をする。

### 2.1 非対称連立1次方程式のための共役残差法の基本原理

非対称行列を係数行列にもつ連立一次方程式  $Ax = b$  の反復数値解法に共役残差法がある。この解法は、対称行列の場合の共役勾配法の一般化として、1976年、P.ConcusとG.H.Golub [29] によって開発された。共役残差法のアルゴリズムは共役勾配法に似ている。この解法を手短に GCR 法と呼ぶことにする。

この節で、GCR法(Generalized Conjugate Residual Method)と GCR法の近似である Orthomin(k)法のアルゴリズムを紹介する。

共役残差法における反復計算では、第  $i$  段階の値  $x_i, \alpha_i, p_i$  を用いて、次式により第  $i + 1$  段階の値を求めていく。

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$$

ここで、 $\alpha_i$  はスカラ、 $p_i$  は探索方向ベクトルである。この  $\alpha_i$  の値は残差ベクトル  $r$  の関数  $F(r) = (r, r)$  を最小にすることにより

決定される。 $p_{i+1}$  としては、 $r_{i+1} + \sum_{j=0}^i \beta_{ij} p_j$  を採用する。ここで、

各  $A p_j$  を互いに直交させるように各  $\beta_{ij}$  を決定することにする。よって、GCR法は残差ノルムを最小化するために最適であるといえる。しかし、GCR法の大域的な最適性を保つために、 $\beta_{ij}$  の計算と探索方向ベクトル  $p_i$  の保存を行わなければならないので、多くの計算量と記憶量が必要となり、コスト高になることである。したがって、この方法は最適収束性を持つ反復解法であるが、少ない反復

回数で収束する問題を除いて、実用的には向かないのである。

1984年、V.FeberとT.Manteuffel [30] によって、GCR法は非対称連立1次方程式を解く反復解法として、共役勾配法と同じように、短い漸化式で表せる最適なものは、一般的に存在しないことが証明された。

### 2.1.1 GCR法のアルゴリズム

具体的にアルゴリズムを以下に示す[5]。

(2.1.1)  $x_0$  を選ぶ

(2.1.2)  $r_0 = b - Ax_0$  を計算する

(2.1.3)  $p_0 = r_0$  とおく

(2.1.4) For  $i = 0$  Until convergence Do

(2.1.5)  $\alpha_i = (r_i, Ap_i)/(Ap_i, Ap_i)$       最小条件

(2.1.6)  $x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$

(2.1.7)  $r_{i+1} = r_i - \alpha_i Ap_i$

(2.1.8)  $\beta_{ij} = -(Ar_{i+1}, Ap_j)/(Ap_j, Ap_j) \quad j \leq i$  共役条件

(2.1.9)  $p_{i+1} = r_{i+1} + \sum_{j=0}^i \beta_{ij} p_j$

### 2.1.2 Orthomin(k)法のアルゴリズム

GCR法は(2.1.9)式で示すように、 $p_i$  は  $n$  本必要であるから、計算量、記憶容量などの面で、大型問題には実用的ではない。これらの欠点を考慮した解法がGCR法の近似であるOrthomin(k)法である[5]。

探索方向ベクトル  $p_{i+1}$  の計算で、すでに計算した探索方向ベクトルを全部記憶するでなく、最近の  $k$  本の探索ベクトルだけを記憶するわけである。一般に、この近似した解法をOrthomin(k)法という。

ここで  $k$  は与えられた整数である。

(2.1.10)  $x_0$  を選ぶ

(2.1.11)  $r_0 = b - Ax_0$  を計算する

(2.1.12)  $p_0 = r_0$  とおく

(2.1.13) For  $i = 0$  Until convergence Do

(2.1.14)  $\alpha_i = (r_i, Ap_i)/(Ap_i, Ap_i)$       最小条件

(2.1.15)  $x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$

(2.1.16)  $r_{i+1} = r_i - \alpha_i Ap_i$

(2.1.17)  $\beta_{ij} = -(Ar_{i+1}, Ap_j)/(Ap_j, Ap_j)$

$i-k+1 \leq j \leq i$  共役条件

(2.1.18)  $p_{i+1} = r_{i+1} + \sum_{j=i-k+1}^i \beta_{ij} p_j$

## 2.2 共役残差法の収束における主な結果

GCR法とOrthomin(k)は非対称連立1次方程式を解く反復解法としての収束特性が、S.C. EisenstatとH.C. Elman [5] などの仕事によって、研究されていた。主な結果は次の通りである。

1) GCR法は高々n回の反復で真の解を与える。

2) Orthomin(k)法は、Aの対称部分 $(A+A^T)/2$ が正定値なら収束する。Orthomin(k)法の誤差の上限について、生成された残差ベクトルは下記の評価式を満たす。

$$(2.2.1) \quad \frac{\|r_{k+1}\|^2}{\|r_k\|^2} \leq 1 - \frac{(\lambda_{\min}(M))^2}{\lambda_{\max}(M)\lambda_{\min}(M) + \rho(R)^2}$$

但し、行列MはAの対称部で、行列RはAの歪対称部である。

$\lambda_{\max}$ は行列の最大固有値、 $\lambda_{\min}$ は行列の最小固有値、 $\rho$ は行列のスペクトルである。

しかし、この評価式は係数行列Aがフルランクの場合にしか適用できない。ランクが落ちる場合は、対称部分は正定値でないからである。

## 第3章 最小二乗問題とその主な数値解法

### 3.1 最小二乗問題と一般逆行列

最小二乗問題は、ガウスが1795年頃考察し、これを用いて、行方不明になっていた小惑星ケレスの観測データから軌道を決定して、再発見に導いたのが最初である[1].

この方法は、データのあてはめを行うための最も重要な方法として、科学研究やエンジニアリングにおける多くの実験を行うあらゆる分野で広く利用されている。多数のデータに対して比較的パラメータの少ない基底関数によるあてはめを行うとき、条件過剰の方程式が導かれる。本節では、予備知識として、最小二乗解を求めるための基本の理論と数値解法を簡単に述べる。[1],[7],[8].

#### 3.1.1 ランクと条件数

一般の線形演算子に対するノルムの定義に対応して、 $m \times n$  行列に対して、ノルムを定義することができる。ベクトルのノルムより、

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

として定義されたノルムを、行列Aのナチュラルノルムという。Aの固有値を $\lambda_i$ 、対応する固有ベクトルを $x_i$ とすると、

$$\|Ax_i\| = \|\lambda_i x_i\| = |\lambda_i| \|x_i\|$$

であるから

$$\frac{\|Ax_i\|}{\|x_i\|} = |\lambda_i|$$

となる。だから、次の式が成り立つ。

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \geq |\lambda_i|$$

$|\lambda_i|$  の最大値を  $\rho(A)$  と書き、行列Aのスペクトル半径とい

う。

$$\rho(A) = \max |\lambda_i|$$

$m \times n$  ( $m \geq n$ ) 行列  $A$  に対しては、特異値分解

$$A = U D V^T$$

が定義される。ここで、 $U$  は  $m \times m$  直交行列、 $V$  は  $n \times n$  直交行列、 $D$  は  $m \times n$  の非負の"対角行列"である。

$D$  の対角要素を行列  $A$  の特異値と呼ぶ。実際は、特異値の二乗は  $A^T A$  の固有値と 0 以外は重複度も含めて同一である。だから、特異値のうち 0 でないものの個数  $r$  は、行列  $A$  のランクに等しい。

$r = n$  のとき、すなわちすべての特異値が正のとき、 $A$  はフルランクであるという。 $r \leq n$  の場合は、 $A$  は特異である、あるいはランク落ちがあるという。

一般の長方形行列  $A$  によって、 $m$  次元ベクトル  $x$  は  $n$  次元ベクトル  $y = Ax$  に写像される。 $m \geq n$  かつ  $A$  がフルランクの場合に、 $x$  の変化  $\delta x$  が  $y$  に及ぼす変化  $\delta y = A \delta x$  を与える。変化の相対的な大きさをノルムの比で測ると、 $x, y$  がゼロベクトルでないとき

$$\begin{aligned} \frac{\|\delta y\|}{\|y\|} \bigg/ \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} &= \frac{\|A \delta x\|}{\|\delta x\|} \bigg/ \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \\ &\leq \max_{\|u\|=1} \|Au\| \bigg/ \min_{\|v\|=1} \|Av\| \end{aligned}$$

上の式の右辺を行列  $A$  の条件数といい、行列  $A$  に関係した計算の安定性の尺度を与える。ノルムとしてスペクトル半径を用いた場合の条件数  $\kappa(A)$  は最大特異値  $\mu_1$  と最小特異値  $\mu_n$  の比である。即ち、

$$\kappa(A) = \mu_1 / \mu_n$$

### 3.1.2 最小二乗問題と一般逆行列

行列  $W$  が対称正定値であるとき、 $(x, Wy)$  は一種の内積であり。 $(x, y)_w$  と記す。また、 $\|\cdot\|_w = (x, x)_w$  は対応するノルムになる。

$m \times n$  行列  $A$  が与えられたとき、未知数の数  $n$  より方程式の数  $m$  の方が大きいので、一般的に優決定系

$$A x = y$$

を満たす  $x$  は存在しない。このとき、条件を緩めて、上式の左辺と右辺の差が最も小さな  $x$  を求めることを考える。

$$(3.1.1) \quad (A \bar{x} - y, A \bar{x} - y)_w = \inf_x (A x - y, A x - y)_w$$

但し、行列  $W$  は対称正定値行列で、重み行列とよばれる。重み付きの最小二乗問題とはこの最小二乗解を求める問題である。(3.1.1)式の最小値を求めるために、 $x$  の各成分に関する偏微分がゼロという条件から、正規方程式

$$(3.1.2) \quad A^T W A x = A^T W b$$

を解けばよいである。

最小二乗問題は、一般逆行列の概念を用いて統一的に理解することができる[1],[7]。 $W$  は対称正定値行列とすると、 $m \times n$  行列  $A$  をもつ最小二乗問題の解が、任意の  $y$  に対して、常に  $G$  で与えられるような  $n \times m$  行列  $G$  を一般逆行列という。

$G$  が一般逆行列となるための必要十分条件[7]は

$$(3.1.3) \quad A G A = A, \quad (W A G)^T = W A G$$

である。

条件(3.1.3)は

$$(3.1.4) \quad A^T W A G = A^T W$$

と等値である[7]。

$P = A G$  とおくと、等式

$$(3.1.5) \quad P A = A, \quad (W P)^T = W P, \quad P^2 = P, \quad A^T W P = A^T W$$

が成り立つ。 $P$  は  $W$  に関する  $A$  の列ベクトルの張る部分空間への射影演算子という。

最小二乗解は必ずしも一意でないが、 $\min (A \bar{x} - y, W(A \bar{x} - y))$

は一意である。実は任意の最小二乗解  $\bar{x}$  に対して、 $A\bar{x} - y$  は一意である。

$A$  がフルランクであれば、 $G = (A^T W A)^{-1} A^T W$  であり、一意的である。この場合は  $GA = I_n$  となる。

ランクが  $n$  より小である場合には、 $Gy$  が一つの最小二乗解を与えると、一般の最小二乗解は

$$Gy + (I - GA)z \quad z \in R^n$$

によって与えられる[7],[1]。

### 3.2 最小二乗問題の直接法

最小二乗法の数値解法は有限回の行列操作で厳密解が得られるかどうかによって、直接法と反復法に分類することができる。あるいは正規方程式を用いるかどうかによっても、分類することができる。本章では、前の分類にしたがって、線形最小二乗法を解く主な数値解法について、簡単に紹介する[1],[2]。

#### 3.2.1 正規方程式による直接法

正規方程式(3.1.2)に対して、 $x$  の連立一次方程式の数値解法を使えるはずである。ここで、 $W = I$  と置いても一般性を失わない。

##### (a) Cholesky法

正規方程式の係数行列  $A^T A$  は対称非負値であるので、つぎのようなCholesky分解ができる。

$$A^T A = L L^T$$

ただし、 $L$  は対角成分が非負の下三角行列である。

$A$  がフルランクの場合は、 $L$  は対角成分が正であり、正則行列である。従って、正規方程式

$$A^T A x = A^T b$$

は、Cholesky分解を用いて、次のように解ける。

まず、はじめに

$$L z = A^T b$$

を用いて、ベクトル  $z$  を求める。  $L$  は下三角行列であるから、前進代入によって解ける。つぎに

$$L^T x = z$$

を  $x$  について、後退代入で解く。

この解法をCholesky法という[1],[2]。

### (b) 固有値分解法

正規方程式

$$A^T A x = A^T b$$

を解くのに、行列  $B = A^T A$  の固有値分解

$$B = V E V^T$$

を用いる方法がある。ここでは、  $E$  は固有値  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  を対角要素に持つ対角行列、  $V$  は  $n \times n$  直交行列である。この分解ができれば、直交行列の性質より、解は

$$x = V E^+ V^T A^T b$$

によって与えられる。ここで  $E^+$  は対角行列  $E$  の一般逆行列であり、ゼロでない固有値のみ逆数をとったものである[1]。

### 3.2.2 正規方程式によらない数値解法

#### (a) 特異値分解法

特異値分解の定義はすでに3.1.1で述べられた。特異値分解を数値計算によって直接実行し、それによって最小二乗解を求めるのが特異値分解法である。

行列  $A$  の特異値分解

$$A = U D V^T$$

が与えられたとき、一般逆行列  $G$  は

$$G = V D^+ U^T$$

によって与えられる。ここでは、  $D^+$  は  $n \times m$  の行列で、  $D$  のゼロで

はない対角要素を  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$  としたとき、 $D^+$  の対角要素は  $1/\mu_1, 1/\mu_2, \dots, 1/\mu_n$  である。

従って、最小二乗解  $x$  は

$$x = V D^+ U^T b$$

で与えられる。

実際の特異値分解の数値解法は二つの段階に分けて行われる。まず、行列  $A$  をHouseholder変換を用いて二重対角行列に変換する。次には三重対角行列の形を保ちながら、Givens変換により対角要素を次第に減少させて対角行列に近づけて行く[1]。

### (b) QR分解法

$m$ 次元の互いに直交する列ベクトルから成る行列を  $Q$  とし、 $R$  を  $n \times n$  上三角行列とすると、

$$A = QR$$

と書き換えられるとき、上の式を  $A$  のQR分解という。

$A$  がフルランクの場合は、 $A$  の一般逆行列  $G$  は

$$G = (A^T A)^{-1} A^T$$

と書ける。だから、最小二乗解  $x$  は

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b$$

で表される。 $A = QR$  を上の式に代入して、簡単に整理すると、

$$R x = Q^T b$$

になる。だから、最小二乗解を求めるためにこの方程式を解けばよい。

まず、つぎの四つの方法のいずれかを用いて、QR分解することができる。

- 1) 古典Gram-Schmidt法
- 2) 修正Gram-Schmidt法
- 3) Householder法

#### 4)Givens法

次に、 $z = Q^T b$ を計算する。最後に方程式  $R x = z$  を解く。  
 $R$ は上三角行列であるから、後退代入によって解を求めることができる[1],[2]。

### 3.3 最小二乗問題の反復法

ここで、 $W = I$  を置いても一般性を失わない。正規方程式

$$A^T A x = A^T b$$

を解くのに、共役勾配法（CG法）を用いて、最小二乗解を求めることができる。最小二乗問題を解くためのCG法のアルゴリズムは次のようになる[10]。

(1) 任意に初期値 $x_1$ を選び、残差ベクトル

$$r_1 = b - A x_1,$$

および、方向ベクトル

$$p_1 = \beta_0 A^T r_1$$

を計算する。但し、 $\beta_0 = 1 / (A^T r_1, A^T r_1)$ 。

(2) 次の手順を繰り返す。

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k$$

$$p_{k+1} = p_k + \beta_k A^T r_{k+1}$$

$$\alpha_k = 1 / (A p_k, A p_k)$$

$$\beta_k = 1 / (A^T r_{k+1}, A^T r_{k+1})$$

最小二乗解を $\bar{x}$ とし、最小残差ベクトル $\bar{r}$ とすると、各反復ステップにおいて、アルゴリズムが生成する近似解 $x_k$ は、誤差関数

$$E(x_k) = ((\bar{x} - x_k), A^T A (\bar{x} - x_k)) / 2 = (\bar{r} - r_k, \bar{r} - r_k) / 2$$

を最小にし、残差ベクトル $r_k$ は単調に減少する。このアルゴリズムは正規方程式を解いているので、最小二乗解が与えられる。

### 3.4 最小二乗問題の数値解法のまとめ

ここで，最小二乗法の主な数値解法を次の表3.3.1のように示す．

	直 接 法	反 復 法
正規方程式を たてる 数値解法	Cholesky法 固有値分解法	共役勾配法 (C G 法)
正規方程式を たてない 数値解法	古典Gram-Schmidt 修正Gram-Schmidt  Householder法 Givens 法  特異値分解法	*注 1

表3.3.1

注1：\*に対応する方法を提案することが本研究の一つの目的である．

## 第四章 重み付きの最小二乗問題のための一般化共役残差法

第二章で非対称連立一次方程式の数値解法の一つである共役残差法を紹介した[5]。本章では、我々はこの方法を最小二乗法に拡張したアルゴリズムを提案する。また、この研究の中心となるアルゴリズムの収束定理を与える。

### 4.1 一般化共役残差法の提案

2.1で述べた共役残差法の基本原理を考えると、共役残差法は残差二乗和を最小にするアルゴリズムであることがわかる。従って、最小二乗問題にも使えると考えられる。

しかし、最小二乗問題に、第二章の共役残差法のアルゴリズムはそのままでは適用できない。なぜならというと、最小二乗問題に現れる行列  $A$  は  $m \times n$  ( $m \geq n$ ) の行列であるため、残差ベクトル  $r$  と探索方向ベクトル  $p$  の次元数が整合しないためである。そこで、GCR法の(2.1.9)式とOrthomin( $k$ )法の(2.1.18)式を修正しなければならない。本節で、新しい残差ベクトルから新しい探索方向ベクトルを決めるために、パラメータとして、 $n \times m$  の写像行列  $B$  を用いて、重み付きの最小二乗法のための一般化共役残差法のアルゴリズムを提案する。  $B$  の満たすべき条件については後で考察する。我々はこの種の解法を一般化共役残差法と呼ぶ。

#### 4.1.1 GCR法に対応するGCR-WLS法のアルゴリズム

(4.1.1)  $x_0$  を選ぶ

(4.1.2)  $r_0 = b - Ax_0$  を計算する

(4.1.3)  $p_0 = Br_0$  とおく

(4.1.4) For  $i = 0$  Until convergence Do

(4.1.5)  $\alpha_i = (r_i, Ap_i)_w / (Ap_i, Ap_i)_w$  最小条件

(4.1.6)  $x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$

$$(4.1.7) \quad r_{i+1} = r_i - \alpha_i A p_i$$

$$(4.1.8) \quad \beta_{ij} = -(A B r_{i+1}, A p_j)_w / (A p_j, A p_j)_w$$

$j \leq i$  共役条件

$$(4.1.9) \quad p_{i+1} = B r_{i+1} + \sum_{j=0}^i \beta_{ij} p_j$$

このアルゴリズムをGCR-WLS法と呼ぶ。

#### 4.1.2 Orthomin(k)法に対応するCR-WLS(k)法のアルゴリズム

GCR-WLS法のアルゴリズムは、連立1次方程式のための共役残差法と同じ大きさの作業領域が必要になるために、2.1.2と同様の理由で、重み付きの最小二乗問題に対するGCR-WLS法の漸化アルゴリズムを提案する。

ここで、 $k$ は与えられた整数である。

$$(4.1.10) \quad x_0 \text{ を選ぶ}$$

$$(4.1.11) \quad r_0 = b - A x_0 \text{ を計算する}$$

$$(4.1.12) \quad p_0 = B r_0 \text{ とおく}$$

$$(4.1.13) \quad \text{For } i = 0 \text{ Until convergence Do}$$

$$(4.1.14) \quad \alpha_i = (r_i, A p_i)_w / (A p_i, A p_i)_w \quad \text{最小条件}$$

$$(4.1.15) \quad x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$$

$$(4.1.16) \quad r_{i+1} = r_i - \alpha_i A p_i$$

$$(4.1.17) \quad \beta_{ij} = -(A B r_{i+1}, A p_j)_w / (A p_j, A p_j)_w$$

$i-k+1 \leq j \leq i$  共役条件

$$(4.1.18) \quad p_{i+1} = B r_{i+1} + \sum_{j=i-k+1}^i \beta_{ij} p_j$$

このアルゴリズムをCR-WLS(k)法と呼ぶ。

## 4.2 一般化共役残差法の性質

### 4.2.1 GCR-WLS法の性質

GCR-WLS法は高々 $n$ 回の反復で真の最小二乗解を与えるこ

とを証明するために、まず、GCR-WLS法の性質を与えよう。

定理4.1 GCR-WLS法のアルゴリズムに現れるベクトル $\{x_i\}$ ,  $\{r_i\}$ ,  $\{p_i\}$ について、次の関係が成り立つ。

$$(4.2.1) \quad (Ap_i, Ap_j)_w = 0 \quad i \neq j;$$

$$(4.2.2) \quad (r_i, Ap_j)_w = 0 \quad i > j;$$

$$(4.2.3) \quad (r_i, Ap_i)_w = (r_i, AB r_i)_w;$$

$$(4.2.4) \quad (r_i, AB r_j)_w = 0 \quad i > j;$$

$$(4.2.5) \quad (r_j, Ap_i)_w = (r_0, Ap_i)_w \quad i \geq j;$$

$$(4.2.6) \quad \langle p_0, \dots, p_i \rangle = \langle p_0, \dots, (BA)^i p_0 \rangle = \langle Br_0, \dots, Br_i \rangle;$$

$$(4.2.7) \quad \min_{x \in X_0 + \langle p_0, \dots, p_i \rangle} \|b - Ax\| = \|b - Ax_{i+1}\|$$

証明：

$\mu_i = (Ap_i, Ap_i)_w$ とする。

(4.2.1)式を  $i$  に対して、帰納法で示す。

a)  $i = 1$  のとき、

$$p_1 = Br_0 - (ABr_0, Ap_0)_w / \mu_0 \cdot p_0$$

だから、

$$\begin{aligned} (Ap_1, Ap_0)_w &= (ABr_0, Ap_0)_w - (ABr_0, Ap_0)_w / \mu_0 \cdot (Ap_0, Ap_0)_w \\ &= 0 \end{aligned}$$

b)  $i \leq k$  のとき、成り立つとする。

(4.1.9)式より、

$$\begin{aligned} (Ap_{k+1}, Ap_i)_w &= (ABr_{k+1}, Ap_i)_w - (ABr_{k+1}, Ap_i)_w \\ &\quad - \sum_{m \neq i} (ABr_{k+1}, Ap_m)_w (Ap_m, Ap_i)_w / \mu_m \\ &= 0 \end{aligned}$$

以上から、(4.2.1)式が成り立つ。

#

(4.2.2)式を  $i$  に対して、帰納法で示す。

a)  $i = 1$  のとき、

$$\begin{aligned}
(r_1, AP_0)_w &= (r_0 - \alpha_0 AP_0, AP_0)_w \\
&= (r_0, AP_0)_w - (r_0, AP_0)_w (AP_0, AP_0)_w / \mu_0 \\
&= 0
\end{aligned}$$

b)  $i \leq k$  のとき、成り立つとする。

(4.1.7)より、

$$\begin{aligned}
(r_{k+1}, AP_i)_w &= (r_k - \alpha_k P_k, AP_i)_w \\
&= (r_k, AP_i)_w - (r_k, AP_k)_w (AP_k, AP_i)_w / \mu_k
\end{aligned}$$

$i = k$  のとき、右辺  $= (r_k, AP_i)_w - (r_k, AP_k)_w (AP_k, AP_k)_w / \mu_k = 0$ ;

$i < k$  のとき、帰納法の仮定より、 $(r_k, AP_i)_w = 0$

(4.2.1)式より、 $(AP_k, AP_i)_w = 0$

以上から、(4.2.2)式が成り立つ。 #

(4.2.3)式に対して、

$$(r_i, AP_j)_w = (r_i, ABr_j)_w + \sum_{j=0}^{i-1} \beta_{ij} (r_i, AP_j)_w$$

(4.2.2)式より、(4.2.3)式が成り立つ。 #

(4.2.4)式に対して、(4.1.9)式から、

$$\begin{aligned}
Br_i &= P_i - \sum_{j=0}^i \beta_{ij} P_j \\
(r_i, ABr_j)_w &= (r_i, AP_j)_w - \sum_{j=0}^i \beta_{ij} (r_i, AP_j)_w \\
&= 0 \quad (i > j)
\end{aligned}$$

#

(4.2.5)式を  $i$  に対して、帰納法で示す。

a)  $i = 1$  のとき、自明である。

b)  $i < k$  のとき、成り立つとする。

$$(r_{i+1}, AP_j)_w = (r_i, AP_j)_w - (r_i, AP_j)_w (AP_i, AP_j)_w / \mu_i$$

帰納法の仮定より

$$(r_{i+1}, AP_j)_w = (r_i, AP_j)_w = (r_0, AP_j)_w. \quad \#$$

(4.2.6)の $\langle P_0, \dots, P_{k+1} \rangle = \langle Br_0, \dots, Br_{k+1} \rangle$ 式を  $i$  に対して、帰納法で示す。

a)  $i = 1$  のとき、自明である。

b)  $i < k$  のとき、成り立つとする。

$$\{P_i\}_{i=0}^k \in \langle Br_0, \dots, Br_{k+1} \rangle.$$

$$P_{k+1} = Br_{k+1} + \sum_{j=0}^k \beta_{i,j} P_j$$

より、 $\langle P_0, \dots, P_{k+1} \rangle \in \langle Br_0, \dots, Br_{k+1} \rangle$ ;

(4.2.1)式より、 $P_0, \dots, P_{k+1}$  は一次独立だから、

$$\dim \langle P_0, \dots, P_{k+1} \rangle = k+2.$$

一方、

$$\dim \langle Br_0, \dots, Br_{k+1} \rangle \leq k+2.$$

$$\langle P_0, \dots, P_{k+1} \rangle = \langle Br_0, \dots, Br_{k+1} \rangle.$$

前と同様に、

$$\begin{aligned} P_{k+1} &= Br_{k+1} + \sum_{j=0}^k \beta_{i,j} P_j \\ &= Br_k - \alpha_k BAP_k + \sum_{j=0}^k \beta_{i,j} P_j \end{aligned}$$

より、 $\langle P_0, \dots, P_{k+1} \rangle \in \langle P_0, \dots, (BA)^{k+1} P_0 \rangle$ .

$P_0, \dots, P_{k+1}$  の一次独立性より、

$$\langle P_0, \dots, P_{k+1} \rangle = \langle P_0, \dots, (BA)^{k+1} P_0 \rangle.$$

(4.2.6)が成り立つ。

#

(4.2.7)式に対して、

$y \in X_0 + \langle P_0, \dots, P_i \rangle$  とすると、

$$y = X_0 + \sum a_i P_i$$

と書ける。

$$\begin{aligned} \|b - Ay\|^2 &= \|r_0 - \sum a_i AP_i\|^2 \\ &= (r_0, r_0)_W - 2 \sum a_i (r_0, AP_i)_W + \sum a_i^2 (AP_i, AP_i)_W \end{aligned}$$

$\|b - Ay\|^2$  は  $a_i = (r_0, Ap_i)_w / (Ap_i, Ap_i)_w$  のとき最小になる。

(4.2.5)式より、

$$a_i = (r_0, Ap_i)_w / (Ap_i, Ap_i)_w = (r_i, Ap_i)_w / (Ap_i, Ap_i)_w = \alpha_i.$$

つまり、 $X_{i+1} = X_0 + \sum \alpha_j P_j$  は  $\|b - AX\|$  の最小値を与える。■

#### 4.2.2 CR-WLS (k) 法の性質

CR-WLS (k) 法に対して、次の性質が成り立つ。

定理4.2 CR-WLS (k) 法のアルゴリズムに現れる各ベクトル

$\{x_i\}, \{r_i\}, \{p_i\}$  について、次の関係が成り立つ。

$$(4.2.8) \quad (Ap_i, Ap_j)_w = 0 \quad i=j-k, \dots, i-1; i \geq k;$$

$$(4.2.9) \quad (r_i, Ap_j)_w = 0 \quad i=j-k-1, \dots, i-1; i \geq k;$$

$$(4.2.10) \quad (r_i, Ap_i)_w = (r_i, AB r_i)_w;$$

$$(4.2.11) \quad (r_i, AB r_j)_w = 0 \quad i=j-k-1, \dots, i-1; i \geq k;$$

$$(4.2.12) \quad (r_j, Ap_i)_w = (r_{i-k}, Ap_i)_w \quad i=j-k, \dots, i-1; i > k;$$

$$(4.2.13) \quad \min_{X \in X_{i-k} + \langle P_{i-k}, \dots, P_i \rangle} \|b - AX\| = \|b - AX_{i+1}\|$$

証明：定理4.1の証明と同様であるので、略する。 ■

#### 4.3 一般化共役残差法の誤差評価

以下、 $P = AG$  とし、 $\rho = \text{rank}(A)$  仮定する（但し、 $G$  は  $A$  の重み  $W$  に関する一般逆行列である）。(3.1.5)式により、行列

$$P_+ = W^{1/2} P W^{-1/2}$$

は対称半正定値で、 $P_+^2 = P_+$  を満たす。従って、 $P_+$  の固有値には、1 と 0 しか含まれないことから、次のような分解ができる。

$$P_+ = U \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ & & & 0 \\ & & & & 0 \end{bmatrix} U^T$$

$\begin{matrix} \leftarrow \rho \rightarrow \end{matrix}$

$U$  の 1 列～ $\rho$  列まで取り出した  $m \times \rho$  行列を  $V$  とおく。

$P_+ = V V^T$ と書ける。

$$V^T V = I_\rho$$

定理4.3 写像行列  $B$  について、

$$A B P = A B、かつ、$$

$$M = V^T (W^{1/2} A B W^{-1/2} + W^{-1/2} B^T A^T W^{1/2}) V$$

が正定値である、あるいは負定値であると仮定すれば、

$$r_i \neq 0 \text{ とすると、 } p_i \neq 0.$$

証明： 仮定より、 $V^T (W^{1/2} A B W^{-1/2} + W^{-1/2} B^T A^T W^{1/2}) V$  が正則である。このとき、任意の  $r_i$  に対して、 $V^T W^{1/2} r_i = y_i \neq 0$  と書けるので、(4.2.10)式より、

$$\begin{aligned} (r_i, W A P_i) &= (r_i, W A B r_i) \\ &= (W^{1/2} r_i, P_+ W^{1/2} A B W^{-1/2} P_+ W^{1/2} r_i) \\ &= (y_i, V^T W^{1/2} A B W^{-1/2} V y_i) \\ &= (y_i, M y_i) \\ &\neq 0. \end{aligned}$$

だから、 $P_i$  はゼロにならない。 ■

#### 4.3.1 GCR-WLS法の収束

GCR-WLS法に対して、次の収束定理を得る。

定理4.4 定理4.3と同じ条件で、GCR-WLS法は高々  $n$  回の反復で真の最小二乗解を与える。

証明：  $r_i = 0$  を満たす  $i$  ( $i \leq n-1$ ) が存在したら、 $b = A x_i$  が成り立つ。つまり、 $x_i$  は  $A$  の解であり、かつ、最小二乗解である。

$$r_i \neq 0 \text{ (} i \leq n-1 \text{)} \text{ なら、定理4.3より、 } p_i \neq 0 \text{ (} i \leq n-1 \text{)}.$$

また、(4.2.6)より、 $p_i$  が一次独立だから、

$$\langle p_0, \dots, p_{n-1} \rangle = R^n.$$

(4.2.7)より、 $x_n$  は最小二乗解である。 ■

#### 4.4.2 CR-WLS(k)法の収束

CR-WLS (k) 法の収束定理を与えるために、次の定理を与える。

定理4.5 CR-WLS (k) 法のアルゴリズムに現れる各ベクトル  $\{r_i\}, \{p_i\}$  について、次の式が成り立つ。

$$(4.3.1) \quad (A p_i, A p_i) \leq (A B r_i, A B r_i)$$

証明： (4.1.18)式より、

$$p_i = B r_i + \sum \beta_{ij} p_j$$

(4.1.8)式と(4.2.8)式を使って、

$$\begin{aligned} (A p_i, A p_i) &= (A B r_i, A B r_i) + 2 \sum \beta_{ij} (A B r_i, A p_j) \\ &\quad + \sum \beta_{ij}^2 (A B r_j, A B r_j) \\ &= (A B r_i, A B r_i) - \sum (A B r_i, A p_j)^2 / (A p_j, A p_j) \\ &\leq (A B r_i, A B r_i) \quad \blacksquare \end{aligned}$$

いま、誤差の上限を示す。

定理4.6 行列Bが収束条件

$$(4.3.2) \quad A B P = A B$$

$$(4.3.3) \quad V^T (W^{1/2} A B W^{-1/2} + W^{-1/2} B^T A^T W^{1/2}) V$$

が正定値である、あるいは負定値である

を満たすとする。真の最小二乗解を  $\bar{x}$ 、真の最小残差ベクトルを  $\bar{r}$  とするとき、CR-WLS (k) 法は任意の k に対して、

$$(4.3.4) \quad \frac{\|r_{k+1} - \bar{r}\|^2}{\|r_k - \bar{r}\|^2} \leq 1 - \frac{\lambda_{\min}(M)^2}{\lambda_{\max}(M) \lambda_{\min}(M) + \rho(R^2)}$$

但し、 $C = V^T W^{1/2} A B W^{-1/2} V$ 、 $M = (C + C^T)/2$  (C の対称部)、 $R = (C^T - C)/2$  (C の歪対称部)、 $C = M - R$ 。 $\lambda_{\max}$  は行列の最大固有値、 $\lambda_{\min}$  は行列の最小固有値、 $\rho$  は行列のスペクトルである。

$$\begin{aligned} \text{証明：} \quad r_k - \bar{r} &= A \bar{x} - A x_k = A G b - A x_k \\ &= P b - P A x_k = P (b - A x_k) \end{aligned}$$

$$= P r_k$$

$$\begin{aligned} \frac{\|r_{k+1} - \bar{r}\|^2}{\|r_k - \bar{r}\|^2} &= \frac{\|Pr_{k+1}\|^2}{\|Pr_k\|^2} \\ &= 1 - \frac{(r_k, WAP_k)^2}{(AP_k, WAP_k)(r_k, WPr_k)} \\ &\leq 1 - \frac{(r_k, WABr_k)^2}{(ABr_k, WABr_k)(r_k, WPr_k)} \\ &= 1 - \frac{(r_k, WABr_k)}{(ABr_k, WABr_k)} \cdot \frac{(r_k, WABr_k)}{(r_k, WPr_k)} \end{aligned}$$

$\frac{(r_k, WABr_k)}{(ABr_k, WABr_k)}$  式と  $\frac{(r_k, WABr_k)}{(r_k, WPr_k)}$  式をそれぞれ評価すればよい。

a)  $s = V^T W^{1/2} r$  とする。

$$\begin{aligned} &\frac{(r, WABr)}{(ABr, WABr)} \\ &= \frac{(W^{1/2} r, P_+ W^{1/2} ABW^{-1/2} P_+ W^{1/2} r)}{(W^{1/2} ABW^{-1/2} P_+ W^{1/2} r, P_+ W^{1/2} ABW^{-1/2} P_+ W^{1/2} r)} \\ &= \frac{(s, V^T W^{1/2} ABW^{-1/2} Vs)}{(V^T W^{1/2} ABW^{-1/2} Vs, V^T W^{1/2} ABW^{-1/2} Vs)} \\ &= \frac{(s, Cs)}{(Cs, Cs)} \end{aligned}$$

ここで、 $Cs = y$  とすれば、

$$\begin{aligned} (r, WABr)/(ABr, WABr) &= (C^{-1}y, y)/(y, y) \\ &= (y, (C^{-1} + C^{-T})y/2)/(y, y) \\ &\geq \lambda_{\min}((C^{-1} + C^{-T})/2) \\ &= \lambda_{\min}(N^{-1}) \end{aligned}$$

一般的には行列  $X, Y$  に対して、 $X^{-1} + Y^{-1} = (X(X+Y)^{-1}Y)^{-1}$  が成り立つ。

$X = 2C^T$ 、 $Y = 2C$  を上式に代入して、

$$\begin{aligned} (C^{-1} + C^{-T})/2 &= ((2C)^T(2C + 2C^T)^{-1}2C)^{-1} \\ &= ((M-R)^T M^{-1} (M-R))^{-1} \end{aligned}$$

$$= (M + R^T M^{-1} R)^{-1}$$

任意の  $X \neq 0$  に対して、

$$\begin{aligned} (X, (M + R^T M^{-1} R)X) &= (X, MX) + (RX, M^{-1} RX) \\ &> 0 \end{aligned}$$

だから、 $M + R^T M^{-1} R$  が対称正定値で、そして  $(C^{-1} + C^{-T})/2$  も対称正定値である。

$$\lambda_{\min}((C^{-1} + C^{-T})/2) = \lambda_{\max}(M + R^T M^{-1} R)^{-1}$$

$$\begin{aligned} \lambda_{\max}(M + R^T M^{-1} R) &= \max_{X \neq 0} \left[ \frac{(X, MX)}{(X, X)} + \frac{(X, R^T M^{-1} RX)}{(X, X)} \right] \\ &\leq \lambda_{\max}(M) + \max_{\substack{X \neq 0 \\ RX \neq 0}} \left[ \frac{(RX, M^{-1} RX)(RX, RX)}{(RX, RX)(X, X)} \right] \\ &\leq \lambda_{\max}(M) + \lambda_{\max}(M^{-1}) \|R^T R\|^2 \\ &\leq \lambda_{\max}(M) + \lambda_{\min}(M)^{-1} \rho(R)^2 \end{aligned}$$

b)  $(r, WABr)/(r, WPr)$

$$\begin{aligned} &= (W^{1/2} r, P_+ W^{1/2} A B W^{-1/2} P_+ W^{1/2} r) / (W^{1/2} r, P_+ W^{1/2} r) \\ &= (s, Cs) / (s, s) \\ &= (s, Ms) / (s, s) \\ &\geq \lambda_{\min}(M) \\ &> 0 \end{aligned}$$

a) の評価と b) の評価より、

$$\frac{\|r_{k+1} - r\|^2}{\|r_k - r\|^2} \leq 1 - \frac{(\lambda_{\min}(M))^2}{\lambda_{\max}(M) \lambda_{\min}(M) + \rho(R)^2} \quad \blacksquare$$

CR-WLS(k)法が一次収束することは言える。定理4.6の写像行列Bに関する条件(4.3.2)と(4.3.3)はアルゴリズムが収束するための十分条件であることを証明したのですが、実際問題にアルゴリズムを応用する際、収束条件が必要条件かどうかというのもとても重要なことで、使用者に欠かせない情報を与えることになる。ここ

で、条件(4.3.2)と(4.3.3)が必要条件でもあることを証明する。

まず、二つの補助定理を証明する。

補助定理4.7:  $x$  が重み付きも最小二乗問題(3.1.1)の解である必要十分条件は  $x$  が正規方程式(3.1.2)の解であることである。

この補助定理の証明は簡単であるので、ここで略する。

補助定理4.8: 条件(4.3.2)と(4.3.3)が成り立つとき、

$$(r_1, A p_1)_w = 0$$

とすると、

$$A^T W r_1 = 0$$

証明: 定理4.2の性質(4.2.10)により、

$$(r_1, A B r_1)_w = (r_1, A p_1)_w = 0$$

条件(4.3.2)と  $P_+$  の分解性質から、

$$r_1^T W^{1/2} V V^T W^{1/2} A B W^{-1/2} V V^T W^{1/2} r_1 = 0$$

条件(4.3.3)によって、 $V^T W^{1/2} r_1 = 0$

したがって、(3.1.4)式により、

$$A^T W r_1 = A^T W P r_1 = A^T W^{1/2} V V^T W^{1/2} r_1 = 0 \quad \blacksquare$$

この補助定理は収束条件(4.3.2)と(4.3.3)を満たすとき、アルゴリズムの中の最も重要なもの  $\alpha_1$  がゼロになる時点で、アルゴリズムの近似解がすでに真の最小二乗解に収束したことを意味する。つまり、このアルゴリズムを使用するとき、収束条件(4.3.2)と(4.3.3)が成り立つのはアルゴリズムが収束する前に変なところに止まらないことを保証する。

証明の構成は条件(4.3.2)あるいは(4.3.3)がそれぞれ成り立たないとき、係数行列  $A$  において、特別な右辺を持つ最小二乗問題に対して、アルゴリズムが特別な初期値からスタートすると収束しないという反例を挙げることを通じてできたものである。

反例4.9: ここで、条件(4.3.3)が成り立たないと仮定すると、ある

ベクトル  $c \neq 0 \in R^n$  が存在し、次の式を満たす。

$$c^T V^T W^{1/2} A B W^{-1/2} V c = 0.$$

行列  $V$  がフルランクであるので、ベクトル

$$e = W^{-1/2} V c$$

がゼロにならない。条件(4.3.3)によって、行列  $A^T W^{1/2} V$  がフルランクである。したがって、

$$A^T W e = A^T W^{1/2} V c \neq 0$$

ここで、次の特別な右辺を持つ最小二乗問題を考える。

$$\min \| e - A x \|^2$$

初期値  $x_0 = 0$  から、アルゴリズムを実行すると、

$$r_0 = e - A x_0 = e, \quad p_0 = B r_0 = B e,$$

$e$  の作り方により、 $\alpha_0 = 0$ 。しかし、このとき、

$A^T W r_0 = A^T W e \neq 0$  であるので、 $r_0$  はまだ最小二乗残差ベクトルでない。つまり、アルゴリズムの近似解は最小二乗解に収束しないままに、更新を止めてしまった。この場合、アルゴリズムは収束しない。 ■

補助定理4.10:  $n \times n$  行列  $C$  が歪対称行列である必要十分条件はすべての  $x \in R^n$  に対して、 $x^T C x = 0$  である。

この補助定理の証明は簡単であるので、ここで略する。

補助定理4.11: 条件(4.3.2)が成り立つために、 $W A B (I - P)$  が歪行列であることが必要かつ十分な条件である。

証明: 必要性: 条件(4.3.2)が成り立つと、行列  $W A B (I - P)$  がゼロ行列になって、もちろん歪行列である。

十分性:  $E = W A B (I - P)$  とすると、射影行列  $P$  の性質により、

$$E P = W A B (P - P^2) = A B (P - P) = 0;$$

$$E^T P = (B (I - P))^T A^T W P = (B (I - P))^T A^T W = E^T.$$

したがって、 $E$  の歪対称性により、 $E = 0$  になって、 $W$  の正則性が

ら、条件(4.3.2)が成り立つことになる。 ■

反例4.12: 条件(4.3.2)が成り立たないと仮定すると、補助定理4.11によって、行列 $WAB(I-P)$ が歪対称行列にならないことが分かって、補助定理4.10によって、 $x^T WAB(I-P)x \neq 0$  ような $x$ が存在する。このとき、 $A^T W x$ がゼロでないのは当然のことである。 $x$ に対して、次のような分解ができるので、

$$x = Vy + z, \quad y \in R^n, \quad z \in \text{Ker}(V^T)$$

簡単な計算によって、

$$(Qy)^T WABz = x^T WAB(I-P)x \neq 0.$$

パラメーター $\delta = -(Vy)^T WABVy / (Vy)^T WABz$ とると、 $x_\delta = Vy + \delta z$ に対して、 $x_\delta^T WABx_\delta = 0$ 、かつ $A^T W x_\delta \neq 0$ になる。

ここで、次の特別な右辺を持つ最小二乗問題を考える。

$$\min \|x_\delta - Ax\|$$

初期値  $x_0 = 0$  から、アルゴリズムを実行すると、

$$r_0 = e - Ax_0 = x_\delta, \quad r_0 = Br_0 = Bx_\delta,$$

$e$ の作り方により、 $\alpha_0 = 0$ 。しかし、このとき、

$$A^T W r_0 = A^T W x_\delta \neq 0 \text{ であるので、} r_0 \text{ はまだ最小二乗残差ベ}$$

クトルでない。つまり、アルゴリズムの近似解は最小二乗解に収束しないままに、更新を止めてしまった。この場合は、反例1と同様にアルゴリズムが収束する保証は全くないと言える。 ■

定理4.6、反例4.9と反例4.12をまとめると、本論文の中心となる定理になる。

定理4.11: CR-WLS(k)法のアルゴリズムが任意の右辺と任意の初期値に対して、常に最小二乗解に収束するための必要十分条

件は

$$A B P = A B$$

$$V^T (W^{1/2} A B W^{-1/2} + W^{-1/2} B^T A^T W^{1/2}) V$$

が正定値、あるいは負定値である。

#### 4.4 写像行列の選択についての考察

本節では、共役残差法に関して、4.3で述べた収束定理4.2と定理4.11を用いて、収束性を考察する。

##### 4.4.1 GCR-WLS法

GCR-WLS法は定理4.2で示したように、高々 $n$ 回の反復で収束するので、直接法とも見なすことができる。しかし、大規模のデータのあてはめ問題に対して、計算を行うために、探索方向ベクトルのデータを全部保存しなければならないので、大変な作業領域が必要となる。さらに、計算量も大きいので、GCR-WLS法は実用的な方法ではない。

##### 4.4.2 CR-WLS法

GCR-WLS法の欠点を考慮したCR-WLS( $k$ )法が定理4.11で示したような一次収束反復法であるが、探索方法を決める写像行列 $B$ は、パラメータとして、まだ具体的に与えられていないので、写像行列 $B$ をうまく選べば、収束がはやくなると期待できると考えられる。写像行列 $B$ を上手に選択し、その収束特性を向上させるのが重要である。

定理4.12:  $A B (I - P) = 0$  ためには、 $A B = D A A^T$  のような  $D$  が存在することが必要かつ十分な条件である。

証明:  $A A^T = (a_1, \dots, a_n)$  とし、 $(A B)^T = (b_1, \dots, b_m)$  とする。

$(I - P) A A^T = 0$ 、 $\text{rank}(I - P) = m - \text{rank}(A A^T)$  から、 $\text{Kerl}(I - P) = I_n(A A^T) = \text{SPAN}\{a_1, \dots, a_n\}$ 。従って、 $(I - P)(A B)^T = 0$  から、各  $b_i$  を  $a_i$  の線形結合で表せる。つまり、

係数  $d_{ij}$  が存在して、

$$b_i = \sum_{j=0}^m d_{ji} a_j, \quad i=1, \dots, m$$

が成り立つ。書き換えれば、 $AB = DAA^T$ 。ただし、 $D$  は  $d_{ij}$  を成分にする行列である。 ■

以下に、前処理として、 $B$  の取り方において、検討する。

a)  $C = V^T W^{1/2} A B W^{-1/2} V$  とする。  $C$  が対称となるような  $B$  を選ぶと、

$R = C^T - C = 0$  になる。従って、誤差評価式 (6.3.4) の右辺は、小さくなって、収束が速くなる。

$$\begin{aligned} \frac{\|r_{k+1} - \bar{r}\|^2}{\|r_k - \bar{r}\|^2} &\leq 1 - \frac{\lambda_{\min}(M)}{\lambda_{\max}(M)} \\ &\leq 1 - K(M)^{-1} \\ &= 1 - K(C)^{-1} \end{aligned}$$

b)  $B$  を、 $C$  が単位行列に近い、 $C$  の固有値の分布が密集するように選ぶと、収束が速くなる。

つまり、行列  $C$  の条件数が小さくなるからである。

c)  $B$  の具体的な取り方

①  $B = G$  とする。簡単な計算により、 $B$  は収束条件を満たすことが分かる。

$$\begin{aligned} C &= V^T W^{1/2} A B W^{-1/2} V = V^T W^{1/2} A G W^{-1/2} V \\ &= V^T P_+ V = V^T V V^T V = I_\rho \end{aligned}$$

$K(C) = 1$  だから、

$$\frac{\|r_{k+1} - \bar{r}\|^2}{\|r_k - \bar{r}\|^2} = 0$$

従って、一回の反復で真の最小二乗解が得られることが分かる。

しかし、 $G$  を求めることは最小二乗法と同等であり、この方法そのものは実用的でない。上の検討より、行列  $B$  は  $G$  にできるだけ

近い行列が望ましいことがわかる。

②  $B = A^T W$  とする。

$A^T W$  は一般逆行列  $G$  の近似行列として取られる。簡単に計算すると、 $B$  は収束条件を満たすことが分かる。

$$C = V^T W^{1/2} A A^T W^{1/2} V$$

$$\kappa(C) = \frac{(W^{1/2} A \text{ の } 1 \text{ 番目の特異値})^2}{(W^{1/2} A \text{ の } \rho \text{ 番目の特異値})^2} = \frac{\lambda_{\max}(A^T W A)}{\lambda_{\min}(A^T W A)}$$

だから、誤差評価式 (4.3.4) は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\|r_{k+1} - \bar{r}\|^2}{\|r_k - \bar{r}\|^2} &= 1 - \frac{W^{1/2} A \text{ の } \rho \text{ 番目の特異値の } 2 \text{ 乗}}{W^{1/2} A \text{ の } 1 \text{ 番目の特異値の } 2 \text{ 乗}} \\ &= 1 - \frac{\lambda_{\min}(A^T W A)}{\lambda_{\max}(A^T W A)} \end{aligned}$$

数値例により、このときの  $CR-WLS(k)$  は  $CG$  法とほぼ同様な収束特性を持っている。

③  $B = D A^T W$  とする。

$D$  は前処理行列として取られる。 $D$  はフルランク対称であれば、 $B$  は収束条件を満たす。具体的に  $D$  を  $A A^T$  の不完全コレスキー分解の逆行列とか、あるいは  $\text{diag}(A A^T)^{-1}$  とか取れば、かなり少ない探索回数で真の解に到達することができることが期待される。こうすれば、きわめて効率的な解法となるだろう。

④ 共役残差法においては、行列  $B$  を陽に表す必要がないという特徴がある。つまり、行列  $B$  の成分を具体的に記憶する必要はなく、もとの行列  $A$  の成分から、 $B r$  を近似的に計算すればよい。従って、行列  $B$  の取り方にはかなり”自由度”があり、共役残差法の収束特性を向上させることが期待できる。

#### 4.4.3

本研究の数値実験では、 $B = \text{diag}(A A^T)^{-1} A^T$  とする場合の  $Orthomin(1)$  法を使う。

大規模データの平滑化問題から導かれた線形最小二乗法の係数行列のほとんどが、大部分の成分が零の疎行列である。ここで、係数行列の非零成分だけを記憶して計算を行うことにより、主記憶の無駄が少なくなる。

本研究のプログラムでは、行列の非零成分のデータを次のような構造で配列にストアする[8]。

- ①第 $I$ 行にある非零成分の個数を $NZA(I)$ とする。
- ②第 $I$ 行において、左から右へ向かって数えて第 $J$ 番目の非零成分の存在する列番号を $IC(J, I)$ とする。
- ③ $IC(J, I)$ に対応する非零成分を $A(J, I)$ とする。

## 第五章 データの平滑化への応用

本章では、データの平滑化を行う際に最終的に帰着される最小二乗問題において、一般化共役残差法のアルゴリズムの残差の減少の振舞い、探索方向を決める写像行列  $B$  の選び方と収束の速さの関係などを考察する。

### 5.1 データの平滑化

観測、測定、調査などによって得られたデータから対象に関する情報を出すという実験データ解析は、あらゆる実験科学やエンジニアリングにおいて、基本的な方法である。しかし、得られたデータには、種々の要因による誤差が含まれていると考えられる。つまり、

(5.1.1) 「データ」 = 「構造」 + 「誤差」

と考えられる[12]。そのデータから誤差を取り除いて、もとの構造を取り出すことがデータ解析の目的である。「データ」から「構造」と「誤差」を分離して、「構造」だけを求めなければならない。

この分離を行うためには、「構造」と「誤差」に関して、あらかじめ何らかの予想や事前情報を持たなければならない。すなわち、統計的推測理論の立場にたって、パラメトリックな関数をデータにあてはめようとしてきた。「誤差」は特定の分布に従っているという仮定に基づいて、「構造」をパラメータ付きの関数モデルで表現しておいて、データからそのパラメータの値を推定するという手続きが考えられた。しかし、一般に「構造」あるいは誤差に対して、わかっている既知の事実や事前情報は漠然としたものである場合が多いので、モデル作成も一意にできるわけない。この場合は、解析者の経験的事実、知識や判断などによってモデルが決定される。

構造をある特定の形を持つ曲線で近似すると仮定する。一般には、近似関数として多項式やスプライン関数などが用いられている。し

かし、このような関数が必ずしも構造を近似するものとしてうまく使えると言えない。多項式は簡単だが、あまり高次の多項式でなくとも unnecessary 振動を起こしてしまう。スプライン関数の場合、節点の位置をうまく選ばないと、よい結果が得られない。これは近似関数自体特有の癖を避けることができないからである[12],[13]。

これに対して、近似関数  $f$  の形状をあらかじめ決める '柔らかい' モデルが考えられた。このモデルは近似関数が十分なめらかであるという条件をベイズモデルとして定式化する。同時に対象の「構造」に関数族として離散スプラインを用いる。ここでは、離散スプライン関数による方法に対して、近似度をはかる尺度は

(5.1.2) (データと近似関数  $f$  との距離)

$$+ \alpha^2 \times (\text{近似関数 } f \text{ の滑らかさの強さ})$$

で表される[13]。

## 5.2 ベイズモデルと情報量基準 A B I C

推定すべき実験関数  $f(x)$  を離散点  $x_j$  ( $1 < j < n$ ) 上の値  $f_j = f(x_j)$  を用いて、

$$(5.2.1) \quad f = (f_1, \dots, f_j, \dots, f_n)^T$$

と表現する。離散点  $x_j$  は区間を等分した点である。これから  $x_j$  を節点 (f i t - p o i n t) と呼ぶことにする。N 個のデータ  $\bar{y}_j$  が得られているとすると、 $\bar{y}_j$  を、

$$(5.2.2) \quad \bar{y} = (\bar{y}_1, \dots, \bar{y}_j, \dots, \bar{y}_n)^T$$

と表す。節点  $x_j$  上に常にデータ  $\bar{y}_j$  があるという要求は特にない。(Fig.5.1参照)。

データの誤差を  $\varepsilon_j$  とする。  $\varepsilon_j$  は平均 0, 分散  $\sigma^2$  の正規分布に従っている

$$(5.2.3) \quad \varepsilon_j \sim i.i.d.N(0, \sigma^2)$$

と仮定とする。

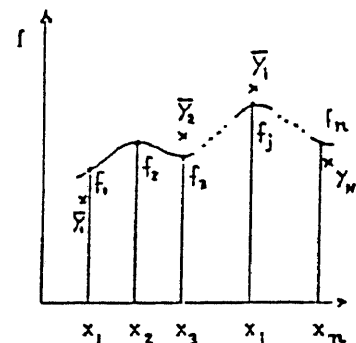


Fig.5.1

そのときデータ  $\bar{y}_i$  を確率変数  $y_i$  の実現値とすれば、 $y_i$  の分布は、

$$(5.2.4) P_i(y_i | f_i, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (y_i - f_i)^2\right)$$

となっている。但し、 $\bar{y}_i$  は  $x_i$  上のデータである。そのとき、 $\bar{y}$  を確率変数  $y$  の実現値とすれば、 $y$  の分布は、

$$(5.2.5) P(y | f, \sigma^2) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\sigma^2})^n} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \|y - Ef\|^2\right)$$

で表す。E の要素を  $e_{ij}$  と表せば、 $\bar{y}_i$  は  $x_i$  上にデータがあるとき  
にのみ  $e_{ij}=1$  で、あとの要素はすべて  $e_{ij}=0$  となる行列である。

(Fig.5.2 参照)。

データ数  $N$  よりパラメータ数  $n$  の方が大きいので  $f$  は一意に決まらない。そこで、事前情報として、各点での 2 階差分の大きさは、

$$(5.2.6) |f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}|, \quad 2 \leq i \leq n-1$$

と表され、 $f$  のなめらかさを  $\|dDf\|^2$  で測る。D は Fig.5.3 のような  $(n-2) \times n$  の帯行列となる。

これを  $f$  の変則先験分布(improper prior distribution)として、

$$(5.2.7) \pi(f|d) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\sigma^2})^{n-2}} d^{n-2} \phi \exp\left(-\frac{1}{2} \|dDf\|^2\right)$$

$$E = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 0 & 0 & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Fig.5.2 E の図形

$$D = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

Fig.5.3 D の 1 次元モデル  
( $n=7$ )

と表現する。d は超パラメータ(hyper-parameter)と呼ばれている。 $\phi$  は  $D^T D$  の非零固有値の積である。

データ  $y$  が与えられたときの周辺尤度  $L(\sigma^2, d)$  は

$$(5.2.8) L(\sigma^2, d) = \int p(\bar{y} | f, \sigma^2) \pi(f | d) df$$

と定義される。

赤池はベイズ型情報量基準 A B I C [12],[13]

$$A B I C = -2 \ln(L(\sigma^2, d))$$

を最小にする  $\sigma^2, d$  を  $f$  の推定に用いる方法を提案した。A B I C を最小にする  $\sigma^2, d$  を  $\bar{\sigma}^2, \bar{d}$  とすれば、ベイズの定理より事後分布は、

$$(5.2.10) P(f|\bar{y}) = \frac{P(\bar{y}|f, \sigma^2) \pi(f|d)}{\int P(\bar{y}|f, \sigma^2) \pi(f|d) df}$$

と表される。この式を最大にする関数  $f$  を最適近似関数として選ぶことにする。このために、 $\bar{\sigma}^2, \bar{d}$  を求めなければならないのである。

$\alpha = d \sigma$  と超パラメータの変数変換を行えば、

$$(5.2.11) L(\sigma^2, d) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^{N-2} \sqrt{|\det(Z_{\alpha}^T Z_{\alpha})|}} \alpha^{n-2} \phi \\ \times \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \|b - Z_{\alpha} f^*\|^2\right)$$

$$(5.2.12) Z_{\alpha} = \begin{bmatrix} E \\ \alpha D \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} y \\ 0 \end{bmatrix}$$

となる。ここで、 $\|b - Z_{\alpha} f^*\|^2$  は最小二乗残差で、 $f^*$  はそのときの最小二乗解である。よって、 $f$  は  $\alpha = \bar{\alpha}, \sigma^2 = \bar{\sigma}^2$  のときの  $f^*$  に他ならない。

尤度方程式は非線形方程式で解析的に解くのが困難である[13]。

ここでは、 $\alpha$  を数値的に求める。いろいろな値  $\alpha$  に対して、

$$(5.2.13) ABIC(\alpha) = (N-2) \ln \|b - Z_{\alpha} f^*\|^2 - 2(n-2) \ln \alpha \\ + \ln |\det(Z_{\alpha}^T Z_{\alpha})| + C$$

ここで、 $C$  は  $\alpha$  に関係しない定数である。A B I C を  $\alpha$  の関数とみると、 $\alpha$  をいろいろと動かして A B I C を最小とするような  $\alpha$  を見つける。従って、行列式  $\det(Z_{\alpha}^T Z_{\alpha})$  と  $\|b - Z_{\alpha} f^*\|^2$  の最小二乗解がわかればよい。

### 5.3 離散スプラインの性質

この節では、離散スプライン関数  $f$  の性質について述べる。今のモデルは、

$$(5.3.1) \min_f (\|y - E f\|^2 + \alpha^2 \|D f\|^2)$$

と書ける。第1項はデータ  $y$  と関数  $f$  との距離であり、第2項は  $f$  のなめらかさの強さである。これは次のような正規方程式を解くことと同値である。

$$(5.3.2) \alpha^2 D^T D f = E^T E f - E^T y.$$

この式の各方程式は節点上にデータがある場合とない場合との2種類にわけることができる。この節では簡単のためにデータのある節点を観測点、データの無い節点を単に節点と呼ぶことにする。

$$1) (x_j \text{ が節点}) \quad \Delta^2 f_j = (f_j - y_j) / \alpha^2,$$

$$2) (x_j \text{ が観測点}) \quad \Delta^2 f_j = 0.$$

ただし、 $\Delta^2$  は重調和作用素で、

$$(5.3.3) \Delta^2 f_j = f_{j-2} - 4f_{j-1} + 6f_j - 4f_{j+1} + f_{j+2}$$

を表す。 $(x_1, x_2, x_{n-1}, x_n)$  では成り立たない。)

2) の場合重調和離散式を満たす多項式は3次式であるから、 $f_{j-2}$  から  $f_{j+2}$  までの5点は同一の3次式上の点となる。 $x_j, x_{j+1}$  が続けて節点であれば ( $\Delta^2 f_j = 0, \Delta^2 f_{j+1} = 0$ )、 $f_{j-2} \sim f_{j+2}$  の点に乗っている3次式と  $f_{j-1} \sim f_{j+3}$  の点に乗っている3次式は4点を共有しているので2つの3次式は同一の式となる。この議論を進めると2つの隣合う観測点を  $x_{j-4}, x_j$  とすれば  $x_{j-4}$  の左側の節点  $x_{j-5}$  から  $x_j$  の右側の節点  $x_{j+1}$  までの  $f$  の値が同一の3次式上の点となっていることがわかる。隣合う観測点  $x_{j-4}, x_j$  間で生成される3次式と観測点  $x_j, x_{j+3}$  間で生成される3次式は  $f_{j-1}, f_j, f_{j+1}$  の3点で交わっている。しかし、2つの3次式の3点での微係数までは一致していない。ただし、 $f_j$  の点において2階微係数が一致し

ている。つまり、微分可能性までを仮定した連続型モデル（3次スプライン関数）とはならない。これらのことが、この関数  $f$  を”離散スプライン関数”と呼ぶ理由である。観測点の両側の節点が観測点に近ければ近い程、離散スプラインはその観測点でなめらかな接続をすることになる。

離散スプラインは観測点の間に少なくとも1つの節点があれば表現できる。観測点の間の節点数を増やした場合は、節点数を増やす前の離散スプラインとは違う新しい3次式が生成される[12],[13]。

#### 5.4 数値実験結果とその考察

数値実験例を示す。以下の図中に、実線で示しているのが推定曲線で、モデル関数を用いたシミュレーションにおいては、破線でそのモデル関数を示す。数値実験は、P C - 9801 U Xで行った。

ここで、次のモデル関数

$$h(x) = \sin(x)$$

から、節点として

$$x_i = \pi(i-1)/51.0 \quad (i=1,2,\dots,51)$$

データ点として

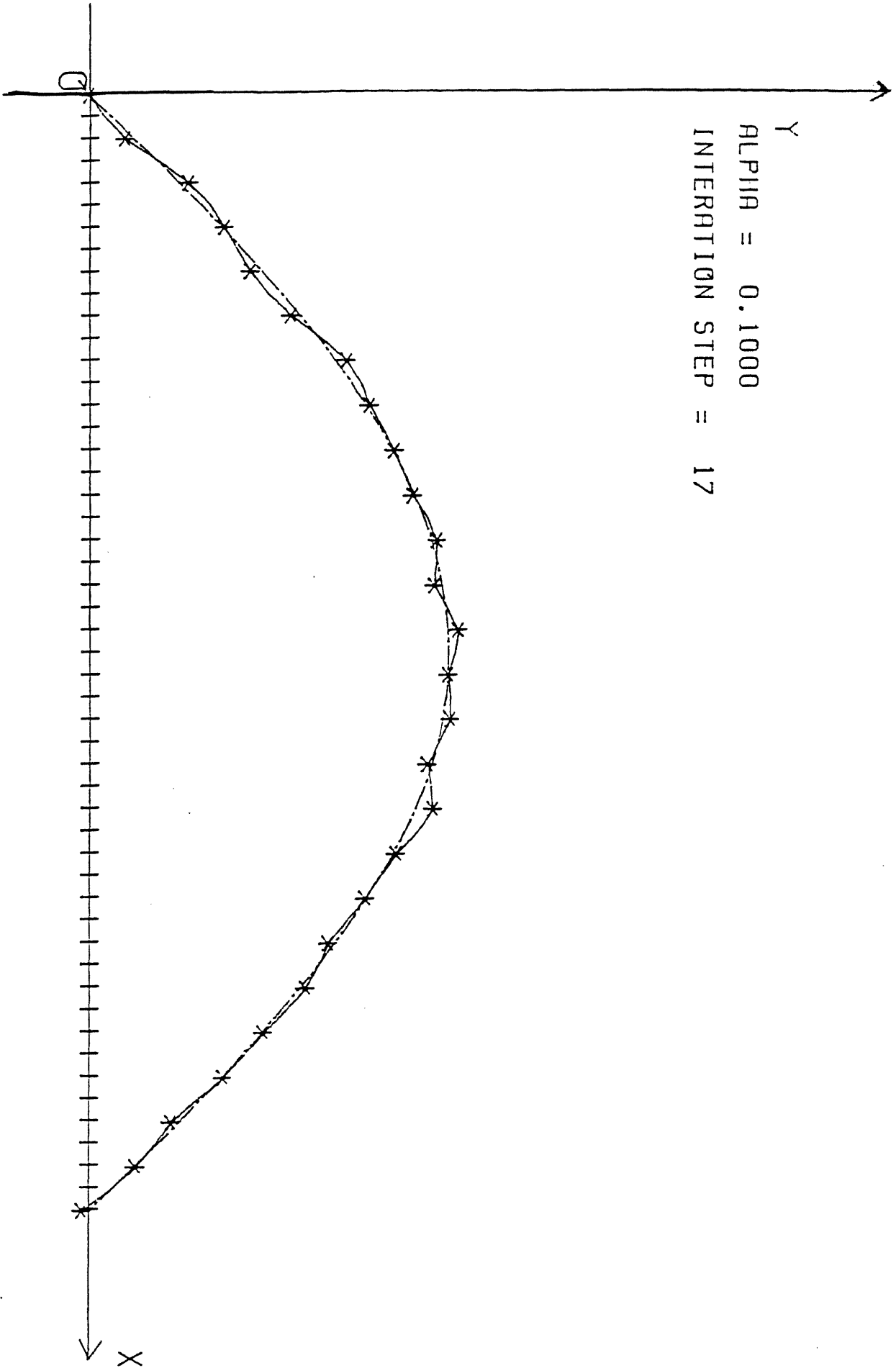
$$y_j = h(x_j) + \varepsilon_j \quad \varepsilon_j \sim N(0, \sigma^2) \quad (j=1,3,\dots,49,51)$$

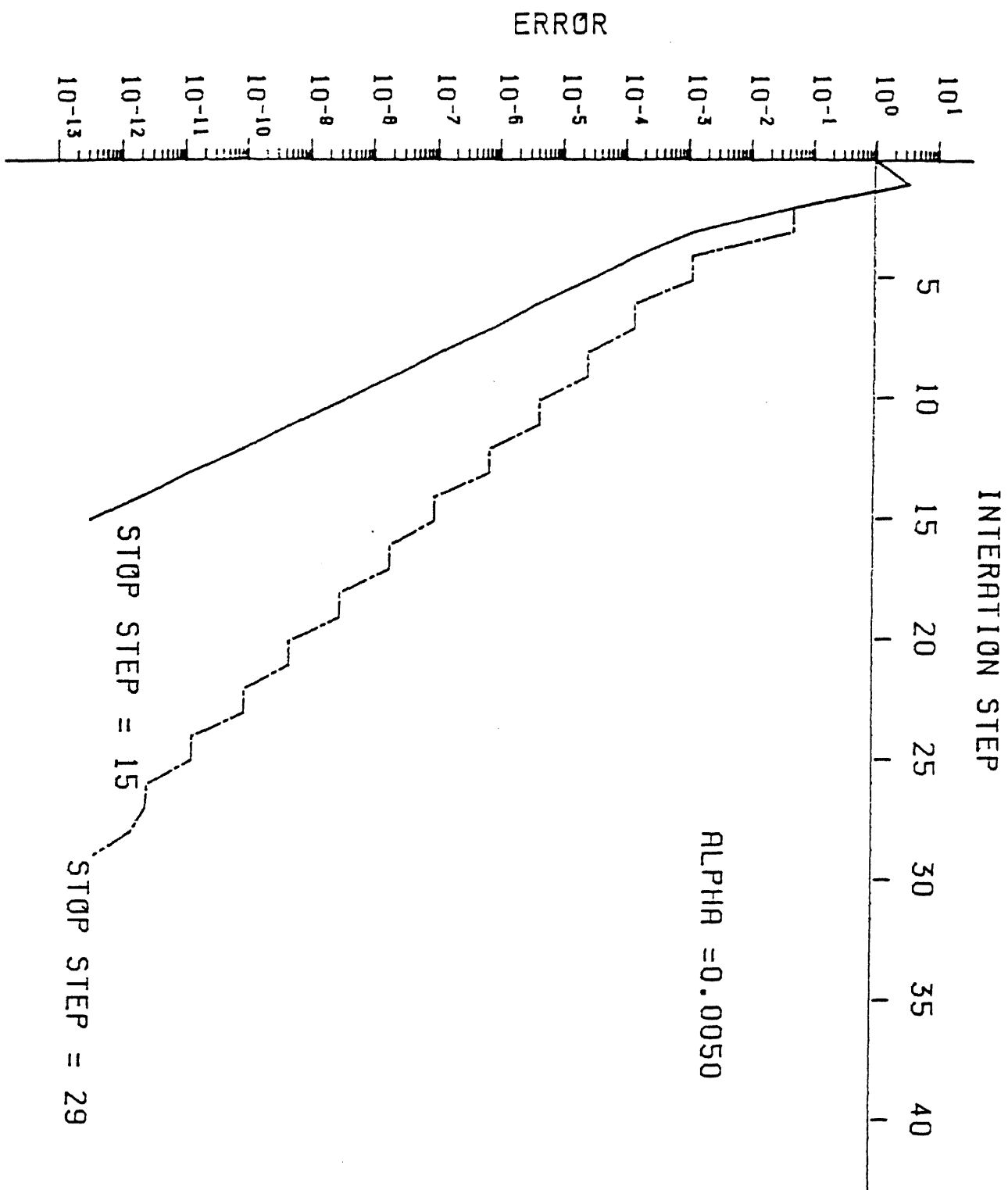
を作って、あてはめを行った。

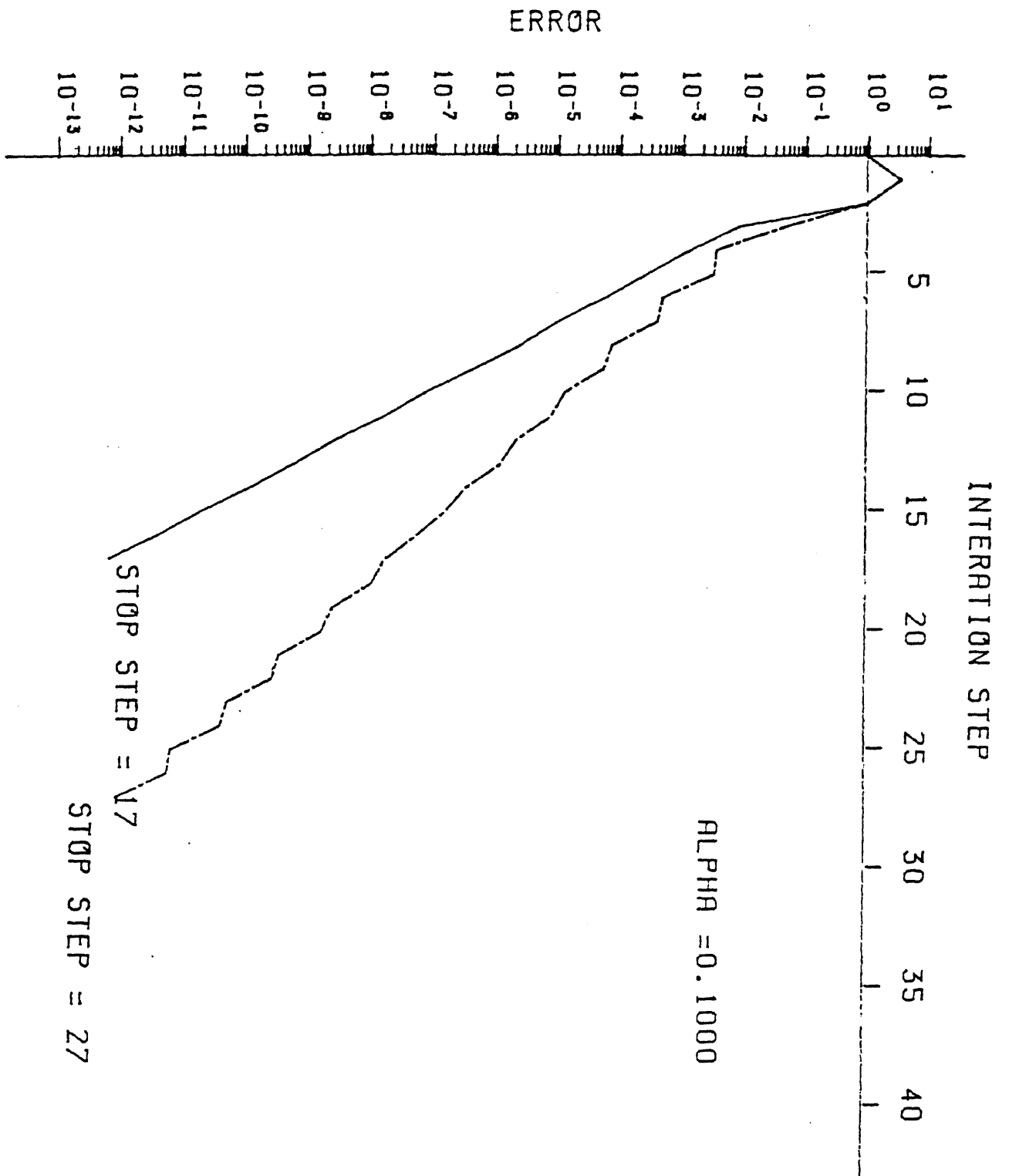
データ点を一点おき取ったので、行列  $A$  の条件数は非常に悪いである。 $\alpha < 1$  のとき、前処理として、 $D$  を  $\text{diag}(A A^T)^{-1}$  取った。下記の表では、C R - W L S (1) 法の収束の振舞いと C G 法の収束の振舞いを示す。

$\alpha$ の変化値	0.0005	0.0050	0.0500	0.1000	0.2000
CR-WLS(1)法	14回	15回	17回	17回	21回
C G 法	34回	29回	30回	27回	27回

Y  
ALPHA = 0.1000  
INTERATION STEP = 17







以上の結果においては、反復の収束条件としては反復解  $r_i$  と QR 分解法を用いて得られた”真”の最小二乗残差ベクトル  $r$  の距離が  $10^{-12}$  より小さくなった時、収束したとみなした。しかし、実際応用の計算には、真の解が分からないので、ここで、行列  $A$  と新しい反復解と前回の反復解の差の積の距離  $\|A(x_{i+1} - x_i)\|$  が  $10^{-12}$  より小さくなるとき、収束すると見なすことを提案する。

結果として、 $\alpha$  に関して、反復解は”真”の最小二乗解に収束していることが分かる。 $\alpha < 1$  に対して、収束特性に関する  $B$  の柔軟性を示した。しかし、 $B$  の取り方について、一般的な結論を与えられないが、具体的な応用問題や利用者の経験などによって、決定されればよいである。

この離散スプラインによるデータのあてはめのための最小二乗問題に対する共役残差法は、かなりよい収束性を示している。

## 第六章 共役残差法の、不定な連立方程式への応用

従来の共役残差法の収束特性が第二章で紹介されたとおり、一般的な連立1次方程式の場合の収束のことを触れていない。本章では、第四章の研究結果に基づいて、連立1次方程式の共役残差法の収束特性を深く研究し、係数行列のランクが落ちるときも含めて、収束するための一つの必要十分条件を与える。

### 6.1 ランク落ちの非対称連立1次方程式に対する共役残差法の収束特性

第四章で、重み付きの最小二乗問題のための共役残差法の収束必要十分条件が与えられたとき、係数行列  $A$  のランクに対する要求は全くなかった。よって、この条件を不定な連立1次方程式に適用することが考えられる。

S.C. Eisenstatらの仕事では、誤差評価式に  $\|r_{i+1}\|/\|r_i\|$  を用いて、収束の速度を計ったが、不定な連立1次方程式には右辺によって、方程式に解は存在することは保証できないので、誤差評価式に  $\|r_{i+1}\|/\|r_i\|$  をこのまま使うなら、一般性を失うとともに、収束特性のことは何も言えない状態になる。一方、共役残差法のアルゴリズムの基本原理は残差ベクトルを最小するようなもので、誤差評価式に  $\|r_{i+1}-\bar{r}\|/\|r_i-\bar{r}\|$  を採用すれば、例えば係数行列のランクが落ちる場合、右辺が係数行列の値域に入らなくても、無難だと考えられる。係数行列のランクが落ちるとき、解は存在すると、解は存在しない二つのケースに分けられる。解が存在する場合に、真の残差ベクトル  $\bar{r}$  はゼロになって、誤差評価式  $\|r_{i+1}-\bar{r}\|/\|r_i-\bar{r}\|$  は  $\|r_{i+1}\|/\|r_i\|$  になる。よって、近似残差ベクトル  $r_i$  はゼロに収束する。解が存在しない場合に、近似残差ベクトル  $r_i$  は真の最小残差ベクトルに収束する。

この場合には、写像行列  $B$  を使わないので、収束条件は下記のようになるはずである。。

$AP = A$  ( $P$  は  $A$  の列ベクトルの張る部分空間への射影演算子であるという)

$V^T (A + A^T) V$  が正定値、あるいは負定値である。

## 6.2 収束の必要十分条件とその意味

まず、二つの補助定理を与える。

補助定理6.1:  $AP = A$  と  $I_n(A) = I_n(A^T)$  は同値である。

証明:  $AP = A$  が成り立つと仮定すると、射影演算子の定義から、 $P$  は  $A^T$  の列ベクトルの張る部分空間への射影演算子でもあり、次の関係式が成り立つ。

$$\text{rank}(A) = n - \text{rank}(I - P)$$

$$\text{rank}(A^T) = n - \text{rank}(I - P)$$

したがって、 $A(I - P) = 0$  と  $A^T(I - P) = 0$  により、 $I - P$  の列ベクトルの張る部分空間は  $A$  と  $A^T$  のカーネル空間になる。言い替えれば、 $\text{Kerl}(A) = \text{Kerl}(A^T)$ 。また、関係式

$$\text{Kerl}(A) \oplus I_n(A^T) = R^n = \text{Kerl}(A^T) \oplus I_n(A),$$

が常に成り立つので、 $I_n(A) = I_n(A^T)$  になる。

逆に、 $I_n(A) = I_n(A^T)$  が成り立つとすると、逆な証明過程をすれば、簡単に  $AP = A$  が成り立つことを証明できる。 ■

補助定理6.2:  $AP = A$  が成り立つとすると、行列  $V^T (A + A^T) V$  が正定値、あるいは負定値であれば、行列  $(A + A^T)$  の非ゼロ固有値は全部正であるか、あるいは全部負であるかになる。

証明: 行列  $(A + A^T)$  の非ゼロ固有値は  $\lambda$  とし、対応する固有ベクトル  $x$  とすると、

$$(A + A^T) x = \lambda x.$$

上の式の両側に行列  $V^T$  をかけて、 $AP = A$  と  $A^T P = A^T$  の関係式

により、

$$V^T (A + A^T) V V^T x = \lambda V^T x.$$

$\lambda \neq 0$ 、 $x \neq 0$  ので、 $V^T x$  はゼロにならない。

したがって、 $\lambda$  は行列  $V^T (A + A^T) V$  の固有値でもある。定理の  $V^T (A + A^T) V$  が正定値、あるいは負定値であるという仮定によれば、行列  $(A + A^T)$  の非ゼロ固有値は全部正であるか、あるいは全部負であるかということがいえる。 ■

この二つの補助定理によって、不定な連立 1 次方程式のための共役残差法の収束の必要十分条件を下記のように代えることができる。

$$I_n(A^T) = I_n(A) \text{ と}$$

$A$  の対称部  $M (= (A + A^T)/2)$  が半正定値か、あるいは半負定値行列である。

以上の結果をまとめると、本論文のもう一つ中心定理になる。

定理 6.3: 不定な連立 1 次方程式  $Ax = b$  を解くための共役残差法のアルゴリズムが任意の右辺と任意の初期値に対して、常に収束するための必要十分条件は

(6.2.1) 係数行列  $A$  のイメージ空間が  $A^T$  のイメージ空間と同一である。つまり、 $I_n(A^T) = I_n(A)$ 、

(6.2.2)  $A$  の対称部  $M (= (A + A^T)/2)$  が半正定値か、あるいは半負定値行列である。

このとき、真の最小残差ベクトルを  $\bar{r}$  とするとき、共役残差法で生成された近似残差ベクトル  $r_k$  は、任意の  $k$  に対して、下記の評価式を満たす。

$$(6.2.3) \quad \frac{\|r_{k+1} - \bar{r}\|^2}{\|r_k - \bar{r}\|^2} \leq 1 - \frac{(\lambda_{\min}(M))^2}{\lambda_{\max}(M) \lambda_{\min}(M) + \rho(R^2)}$$

但し、 $M = (A + A^T)/2$  (係数行列  $A$  の対称部)、 $R = -(A - A^T)/2$  (係数行列  $A$  の歪対称部)、 $\lambda_{\max}$  は行列の非零の固有値の

絶対値の最大値、 $\lambda_{n+1}$ は行列の非零の固有値の絶対値の最小値、 $\rho$ は行列のスペクトルである。

この定理は第四章の定理4.11と同様に証明できるので、ここで略する。しかし、条件の一つ

$$I_n(A^T) = I_n(A)$$

は幾何的に非常に明確な意味を持っているので、この条件の必要性を易く理解するために、改めて新しい証明を与えることにする。

$I_n(A^T) \neq I_n(A)$ と仮定すると、関係式

$$\text{Ker } l(A) \oplus I_n(A^T) = R^n = \text{Ker } l(A^T) \oplus I_n(A),$$

から、 $\text{Ker } l(A) \not\subset \text{Ker } l(A^T)$ になる。

だから、 $Ax = 0$ 、 $A^T x \neq 0$ ような $x$ が存在する。

この $x$ を使って、第四章と同じように収束しない反例を作ることができる。

どのような行列が収束条件  $I_n(A^T) = I_n(A)$  を満たすかという問題は自然に出てくる。この問題を解決すれば、アルゴリズムの利用者に役を立つと思われる。

定理6.4:  $I_n(A^T) = I_n(A)$  を満たすための必要十分条件は、 $A$  を次のような分解できることである。

$$A = C B C^T$$

但し、 $C$  が  $n \times n$  のフルランク行列で、 $B$  が  $A$  と同じランクを持つ次のような形の行列である。

$$B = \left| \begin{array}{ccc|c} *, *, \dots, * & & & \\ \dots\dots\dots & & & 0 \\ *, *, \dots, * & & & \\ \hline & & & \\ & 0 & & 0 \end{array} \right|$$

証明:

必要性：  $I_n(A^T) = I_n(A)$  を満たすなら、補助定理6.2によって、 $AP = A$  が成り立つ。Aに対して、QR分解すれば、 $P = QQ^T$  になる。よって、 $A = QRQQ^T$  と書ける（ $RQ$  は  $\text{rank}(A) \times \text{rank}(A)$  のフルランク行列である）。

Uを( $Q, Q_1$ )とし（ $Q_1$ はQと直行する  $n \times (n - \text{rank}(A))$  の行列である）、Bを次のような形の行列

$$B = \left| \begin{array}{cc|c} RQ & 0 & \\ \hline & & \\ \hline 0 & 0 & \end{array} \right|$$

とすれば、 $A = UB U^T$  になる。

十分性：Bの構造によって、 $I_n(B^T) = I_n(B)$ 。また、

$$A = UB U^T$$

$$A^T = U B^T U^T$$

という関係式から、 $I_n(A^T) = I_n(A)$ 。 ■

誤差評価式(6.2.3)を分析すれば、右辺  $b$  が係数行列の値域に属しないとき、近似残差ベクトルは最小残差ベクトル  $\bar{r}$  に収束し、右辺が係数行列の値域に属するとき、近似残差ベクトルはゼロに収束することがわかる。近似残差ベクトル  $r_i$  が収束するが、近似解が収束するか、収束するなら、どこに収束するかということはまだ解明していない。

係数行列のランクが落ちるとき、解は唯一ではない。ここで、アルゴリズムの近似解の収束の振舞いについて述べる。

補助定理6.5：  $X \subset R^n$  は閉凸集合とし、 $y \in R^n$  とする。このとき  $y$  に最も近い点が  $X$  に存在する。すなわち、

$$\{\bar{x} \mid \|\bar{x} - y\| = \min_{x \in X} \|x - y\|\} \neq \emptyset$$

である。しかも、その点は唯一である。また  $\bar{x}$  が  $y$  に最も近い点であるための必要十分条件は

$$(\bar{x} - \bar{x})^T (\bar{x} - y) \geq 0, \text{ for } \forall x \in X$$

が成り立つである。

今の解決したいのは  $\|\bar{r} - r_k\| \leq \varepsilon$  とき  $\|x - x_k\| \leq ?$  という問題である。A を QR 分解して、 $A^T = R^T Q^T$  によって、Q と直行するベクトル  $q_{\text{rank}(A)+1}, \dots, q_n$  は  $A^T$  のカーネル空間  $\text{Kerl}(A^T)$  の基底ベクトルになる。収束条件 から、A のカーネル空間  $\text{Kerl}(A)$  の基底ベクトルにもなる。よって、A の一つ解を  $\bar{x}$  とすると、A の解空間 S は  $x + \text{span}\langle q_{\text{rank}(A)+1}, \dots, q_n \rangle$  である。簡単に調べるなら、この解空間が閉凸集合であることがわかる。 $\|\bar{r} - r_k\| \leq \varepsilon$  のとき、 $x_k$  に最も近い X の点を  $\bar{x}_k$  とすると、補助定理 6.5 の条件と A の解空間の構造によって、 $\varepsilon_k = \bar{x}_k - x_k$  は  $q_{\text{rank}(A)+1}, \dots, q_n$  と直行する。したがって、 $\varepsilon_k$  を  $q_1, \dots, q_{\text{rank}(A)}$  の線形結合で表すことができる。また、

$$\bar{r} - r_k = b - Ax - (b - Ax_k) = A(x_k - x)$$

が成り立つので、 $\|\bar{r} - r_k\| \leq \varepsilon$  により、 $\|A \varepsilon_k\| \leq \varepsilon$  となる。ここで、 $n \times \text{rank}(A)$  の行列  $AQ$  を  $n \times n$  のフルランク行列  $A \cdot (= (AQ, A1))$  に拡張して、 $\text{rank}(A) \times n$  の行列  $Q^T$  を  $n \times n$  の直行行列  $Q \cdot$  に拡張する。 $\varepsilon_k$  と  $q_{\text{rank}(A)+1}, \dots, q_n$  と直行性によって、 $A = AP = AQQ^T$  という性質から、 $\|A \cdot Q \cdot \varepsilon_k\| \leq \varepsilon$  になる。よって、

$$\|\varepsilon_k\| \leq \varepsilon / \|A \cdot\|$$

が成り立つ。

以上の論議をまとめると、近似解が解空間に近づくことはわかって、一定の意味の収束することが言える。解空間のどの解に収束するか、おそらく初期値の選び方によると思われる。アルゴリズムの一つの収束判定条件としては、 $\|A(x_{k+1} - x_k)\| \leq \varepsilon$  を使うことが考えられる。

### 6.3 数値実験の結果

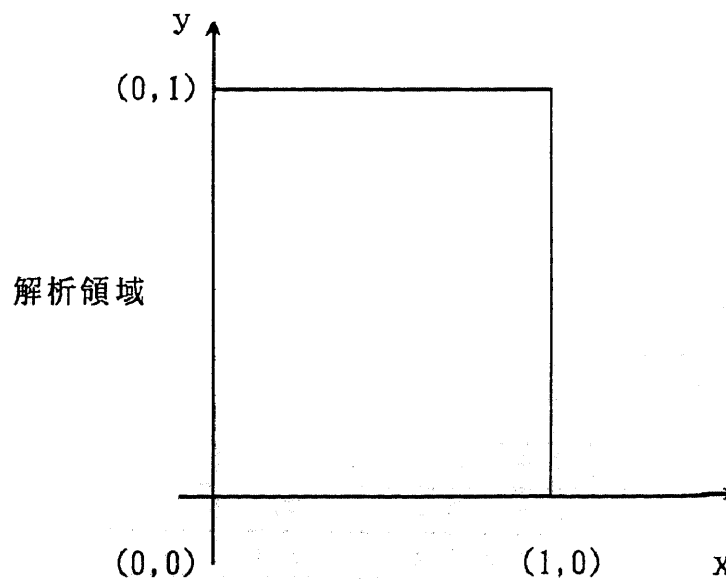
上節の結論によると、共役残差法はフルランクでない行列を係数とする連立1次方程式の一つの数値解法になる。非圧縮粘性流体のNavier-Stokes方程式や拡散方程式など偏微分方程式において、境界は全周Neumann条件とし、差分法、有限要素法、境界要素法などで離散化すれば、近似解を求める線形連立1次方程式が得られる。このとき、係数行列のランクが一つ落ちる。このようなフルランクでない方程式に用いる場合の共役残差法について、ここで、アルゴリズムの収束特性を研究し、一つの収束を保証するための必要十分条件を考察し、数値解析を行う。

等間隔直行格子上で次のポアソン方程式を解くことが取り上げられる。境界条件としては、全周Neumann条件の場合をテストした。

$$(6.3.1) \quad U_{xx} + U_{yy} = G(x, y)$$

$$(6.3.2) \quad \partial U / \partial n = 0 \quad \text{on } \Gamma。$$

この式を5点補間の中心差分により離散化すると、線形連立1次方程式が得られる。



離散化するとき、境界条件は全周Neumann条件であるので、四つの

$$(6.3.3) \quad A = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & & \\ & & & 1 & & & & & & \\ -1 & & & & 1 & & & & & \\ & -1 & & & & 1 & & & & \\ & & -1 & & & & 1 & & & \\ & & & -1 & & & & 1 & & \\ & & & & -1 & & & & 1 & \\ & & & & & -1 & & & & 1 \\ & & & & & & -1 & & & \\ & & & & & & & -1 & & \\ & & & & & & & & -1 & \\ & & & & & & & & & -1 \end{pmatrix}$$

数値実験はPC-9801UXで2.1.2節のOrthomin(1)法を用いて行った。具体的なテストで、(6.3.1)式の $G(x, y)$ を $2(x + y)$ とし、解析解は、 $U = xy(x + y)$ である。格子点数が $6 \times 6 - 4$ のときの結果は次の通りである。

A の任意の解は  $\bar{x} + \alpha a$  で表せる。但し、 $\alpha$  はスカラーである。

-49-

この結果によって、共役残差法が収束することがわかる。さらに、共役残差法の収束の先が初期値の選択に影響されていることもわかる。カーネル空間の基底ベクトル  $a$  と直行する初期値を選ぶと、同じ点  $\bar{x} = 0.35a$  に収束する。初期値は  $a$  の成分  $\alpha_a$  をもつと、収束の先は  $\bar{x} + (\alpha - 0.35)a$  に収束する。

もし離散化するとき、四つの頂点を残すようにすれば、係数行列はつぎのようになる。

$$(6.3.4) \quad A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & & & & & & & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & & & & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & & & & & & & & & \\ & & & 1 & & & & & & & & & & & & & \\ & & & & 1 & & & & & & & & & & & & \\ & & & & & 1 & & & & & & & & & & & \\ & & & & & & 1 & & & & & & & & & & \\ & & & & & & & 1 & & & & & & & & & \\ & & & & & & & & 1 & & & & & & & & \\ & & & & & & & & & 1 & & & & & & & \\ & & & & & & & & & & 1 & & & & & & \\ & & & & & & & & & & & 1 & & & & & \\ & & & & & & & & & & & & 1 & & & & \\ & & & & & & & & & & & & & 1 & & & \\ & & & & & & & & & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & & & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

この行列は数値計算によって、二つの収束条件とも満たさないことがわかる。格子点が  $4 \times 4$  のときの(6.3.4)式の  $16 \times 16$  の行列  $A$  において、右辺  $(0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0, -1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T$  に対して、初期値を  $(5, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 2)^T$  とすると、2.1.2節の  $Orthomin(1)$  法のステップ2で、

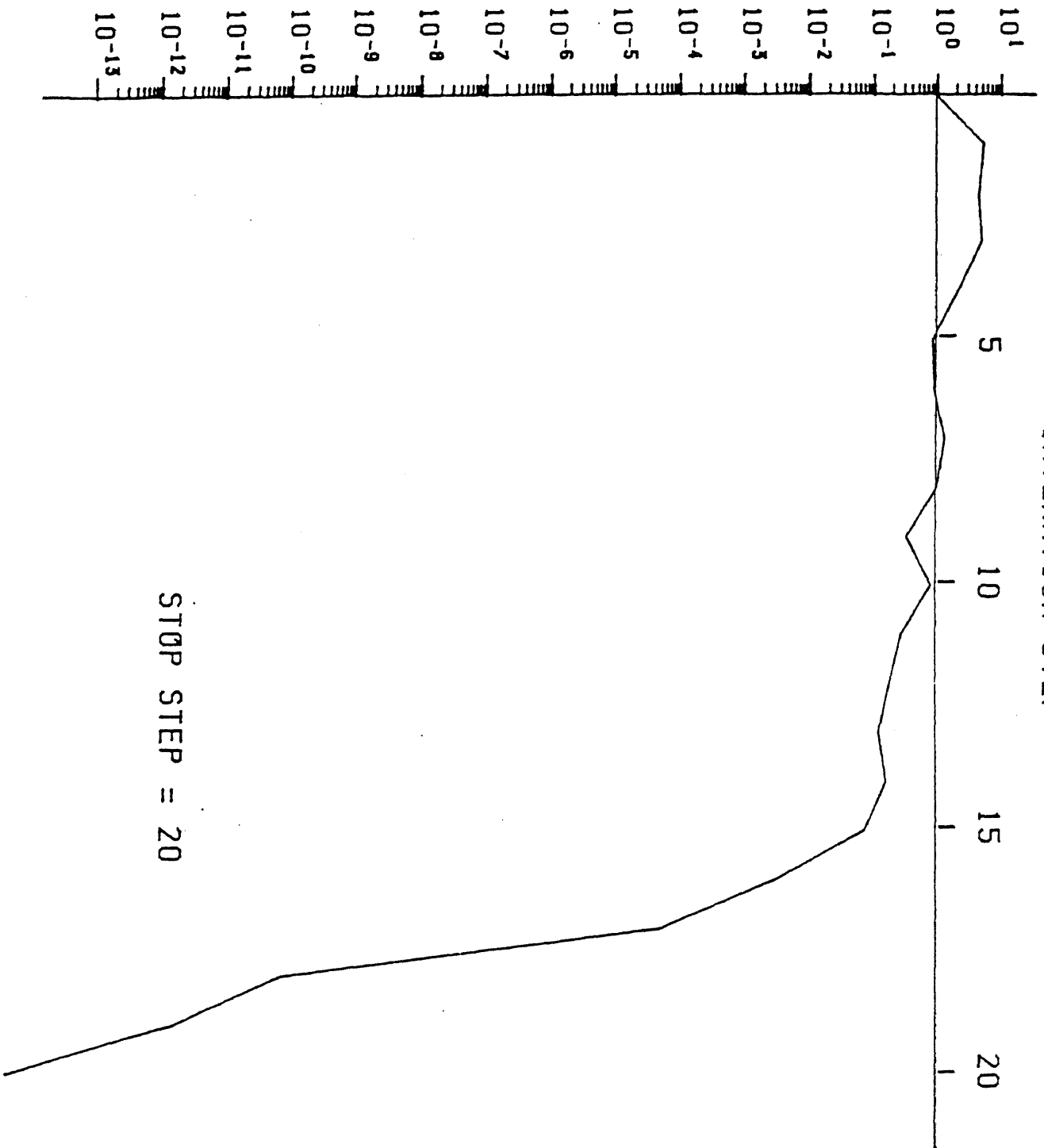
$$Ap_2 = (5, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 2)^T$$

$$r_2 = -(0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0, -1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0)^T$$

よって、 $\alpha_2 = 0$ 、 $\beta_2 = 0$ 。このとき、 $A^T r_2 \neq 0$ 、最小二乗の意味でも、収束はしない。

ERROR

INTERATION STEP



STOP STEP = 20

## 第七章 結論

本論文では、従来の共役残差法の一般化の研究を目的とし、研究の内容を二つの部分に分けて、取り上げた。①：この解法を重み付きの最小二乗問題に拡張したアルゴリズムを提案し、この一般化された共役残差法の収束特性に関する理論的な解析と、実際問題に応用した場合に数値的な分析を行った。②：この解法の応用範囲をランク落ちの非対称連立1次方程式に拡張し、この場合の共役残差法の収束するための必要十分条件を与え、数値的な考察を行った。

第一部：理論的な研究では、収束特性について、収束の必要十分条件を与え、アルゴリズムの収束定理を証明した。誤差に関する式から、写像行列  $B$  の選び方と収束の関係を考察した。収束するための行列  $B$  についての条件は緩いので、 $B$  の選び方には多くの自由度があり、多様なアルゴリズムが可能であることを検討した。また、収束特性と行列の固有値の関係を理論的に裏付けた。

応用的な問題については、共役残差法がデータ解析におけるあてはめを扱った場合の最小二乗問題に対して、有効であることを確認した。その場合の収束定理を確認した。このアルゴリズムは、理論的に広範な収束特性を持つもので、さらに、多くの問題に適用することができる。探索方向行列  $B$  の選び方は重要であり、さらに改良の余地があるものと考えられる。

第二部：連立1次方程式に対して、共役残差法の従来の収束範囲を拡張し、フルランクでない係数行列も含めて、一般的な収束の必要十分条件を与えた。この収束条件について、様々な角度から検討した。非圧縮粘性流体のNavier-Stokes微分方程式において、境界を全周Neumann条件とし、差分法での離散化により、近似解を求めるフルランクでない線形連立1次方程式に用いる共役残差法について、アルゴリズムの収束特性を研究し、収束を保証するための必要十分条件を考察し、数値解析を行った。

## 謝 辞

本研究全般にわたって、終始丁寧に指導をして下さいました電子情報工学系小柳義夫教授に心から深く感謝いたします。さらに、様々な助言をして下さいました電子情報工学系名取亮教授、今井仁司助手、東京大学森正武教授、一橋大学杉原正顯助教授に深く感謝致します。数値実験などに協力下さいました数値解析研究室の皆様に御礼申しあげます。

また、日本に留学の機会をして下さいました中国教育機関と筑波大学に御礼申し上げます。

この論文を愛妻解穎と私の中国にある家族に捧げます。

## 参考文献

- [1] 中山 徹, 小柳義夫: 最小二乗法による実験データ解析, U P, Applied mathematics series, 東京大学出版社(1982).
- [2] 小柳義夫: 最小二乗法のアルゴリズム, 情報処理, Vol.23, No.2, (1982), pp.99-108.
- [3] Y. Oyanagi: An Incomplete LDU Decomposition of Lattice Fermions And Its Application To Conjugate residual Methods, Computer Physics Communications 42 (1986), pp.333-343.
- [4] 村田健郎, 小国 力, 唐木幸比古: スーパーコンピュータ, 科学技術計算への適用, 丸善株式会社(1985).
- [5] C.Eisenstat, C.Elman and H.Schultz: Variation Iterative Methods for Nonsymmetric Systems of Linear Equations, SIAM J.NUMER.ANAL Vol.20, NO.2, April 1983.
- [6] L.Lawson and J.Hanson: Solving Least Squares Problems, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ(1974).
- [7] R.Rao and K.Mitra: Generalized inverse of Matrices and Its Application, Wiley, New York(1971); 渋谷政昭, 田辺国土訳: 一般逆行列とその応用, 東京図書(1973).
- [8] 森 正武: FORTRAN77 数値計算プログラミング, コンピュータサイエンス, 岩波(1986).
- [9] 田辺国土: 非線型最小二乗法のアルゴリズム, 応用統計学, Vol.9(3), (1981), pp.119-140.
- [10] 野寺 隆: 大型疎行列に対するPCG法, Seminar On Mathematical Sciences, No.7, Keio University (1983).
- [11] 志水清孝, 相吉英太郎: 数理計画法, 昭晃堂株式会社 (1985).

- [12] 田辺国土, 田中輝雄: ベイズモデルによる曲線・曲面のあてはめ, 月刊地球, Vol.5, No.3(1983).
- [13] 田中輝雄: 情報量基準 A B I C による離散スプラインのあてはめ, 電気通信大学修士論文(1983).
- [14] 横川三津夫: ノンパラメトリックなベイズモデルによるデータ平滑化, 筑波大学修士論文, (1984)
- [15] 森正武: 有限要素法とその応用, 岩波書店 (1983).
- [16] G.Strang and J.Fix: An Analysis of The Finite Element Methods, Prentice-Hall, Inc.(1976); 三好哲彦, 藤井宏訳: 有限要素法の理論, 培風館(1976).
- [17] 市田浩三, 吉元富士市: スプライン関数とその応用, 教育出版社(1979).
- [18] 一松 信: 数値解析, 新数学講座, No.13, 朝倉書店(1982).
- [19] M.Young: Iterative Solution of Large Systems, Academic Press (1971).
- [20] A.Hageman and M.Young: Applied Iterative Methods, Academic Press (1981).
- [21] S.Pissanetzky: Sparse Matrix Technology, Academic Press (1984)
- [22] 伊理正夫, 藤野和建: 数値計算の常識, 共立出版株式会社 (1985).
- [23] G.Wahba, S.Wold: A Completely automatic French Curve -- Fitting Spline Functions By Cross Validation --.Commun. Statist, Vol.4, 1-17 (1975).
- [24] 坂本慶行, 石黒真木夫, 北川源四郎: 情報量統計学, 情報科学講座A・5・4, 共立出版株式会社(1983).
- [25] 名取 亮、野寺 隆 (編) : スーパーコンピュータと大型数値

計算、b i t 臨時増刊、共立出版者 (1987) .

- [26] 野寺 隆：共役勾配法 • Now and Then, 5th Symposium on Large Sparse Sets of linear Equations, 12-16(1989).
- [27] G.H.Golub, D.P.O'Leary: Some History of the Conjugate Gradual and Lanczos Algorithm, Siam Vevuew 31 (1989), 50-102.
- [28] 村田健郎：前処理つき共役勾配法 • 共役残差法, 情報処理, Vol.27, No.5 (1986), 498-507.
- [29] P. Concus and G.H. Golub, in:Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, Vol.134,eds. R. Glowinski and J.L. Lions (Springer-Verlag, Berlin, 1976), 56-65.
- [30] V. Faber and T. Manteuffel, Necessary and Sufficient Conditions for the Exsistence of a Conjugate Gradient Methods, SAIM J. Numer. Anal. 21, 352-362.
- [31] Y. Oyanagi and S.L. Zhang, Conjugate Residual Methods for Least Squares Problem, First IASC World Conference on Computational Statistics and Data Analsis (9187), 167-174
- [32] S. L. Zhang and Y. Oyanagi, A Necessary and Sufficient Condition of ORTHOMIN(K) Methods for Least Squares Problem, AISM. (to appear).
- [33] S. L. Zhang and Y. Oyanagi, ORTHOMIN(K) Methods for Linear Least Squares Problem, Submitted for publication
- [34] J.A. Meijerink and H.Z. van der Vorst, An Iterative Soluiton Method for Linear Systems of whichthe Coefficient Matirx is a Symmetric M-matrix, Math. Comput. 31, (1977), 148-162.

- [35] O. Axelsson, A Generalized Conjugate gradient, Least Square Method, Numer. Math. 51, (1987), 209-227.
- [36] P.K.W. Vinsome, in:Proc. Fourth Symposium on Reservoir Simulation, Society of Petroleum Engineers of AIME, 1976, 149-159.
- [37] 張紹良：最小二乗法のための共役残差法の理論とその応用，筑波大学修士論文，(1987)。