反復法の幾何学

特異な系に対するクリロフ部分空間反復法の収束解析

速水 謙（情報学プリンシプル研究系）
杉原 正顯（東京大学大学院情報理工学系研究科)

幾何学とは座標変換に関して不変な量に関する学問である.

(19世紀ドイツの数学者F. Klein)

この考え方を特異な連立一次方程式の反復解法に適用してみよう.

CG (Conjugate Gradient)法

$Ax = b \quad A:$ 対称正定値

に対するアルゴリズム$(Hestenes, Stiefel, 1952)$

$$
\begin{aligned}
& r_0 = b - Ax_0 \\
& p_0 = r_0 \\
& For\ i = 0,1,\ldots,\ until\ convergence,\ Do \\
& \quad \alpha_i = \frac{(r_i, r_i)}{(Ap_i, p_i)} \\
& \quad x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i \\
& \quad r_{i+1} = r_i - \alpha_i A p_i \\
& \quad \beta_i = \frac{(r_{i+1}, r_{i+1})}{(r_i, r_i)} \\
& \quad p_{i+1} = r_{i+1} + \beta_i p_i \\
& End\ Do
\end{aligned}
$$

Aが特異(半正定値)な場合は？

$$
Q^T A Q = \Lambda = \begin{bmatrix} \Lambda_r & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{bmatrix},
$$

ただし

$$
\Lambda_r = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_r \end{bmatrix}, \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0
$$

および $Q^T Q = I_n, \quad Q = [Q_1, Q_2],$

$Q_1 = [q_1, \cdots, q_r], \quad Q_2 = [q_{r+1}, \cdots, q_n]$

とおく.

アルゴリズムのR(A)およびN(A)への分離

座標変換:

$$
v' = Q^T v = [Q_1, Q_2]^T v = \begin{bmatrix} Q_1{}^T v \\ Q_2{}^T v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v^1 \\ v^2 \end{bmatrix}
$$

を用いてCG法のアルゴリズムを

$\quad R(A) = \{Ax \mid x \in R^n\}:$ 像空間

と

$\quad R(A)^{\perp} = N(A) = \{x \mid Ax = 0\}:$ 核空間

の成分に分離する.

ここで $r = rankA = \dim R(A).$

例えば

$$
\begin{aligned}
& r = b - Ax \\
& r' = Q^T r = Q^T b - Q^T A Q (Q^T x) \\
& \begin{bmatrix} r^1 \\ r^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b^1 \\ b^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \Lambda_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x^1 \\ x^2 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

は

$$
\begin{aligned}
& r^1 = b^1 - \Lambda_r x^1 \\
& r^2 = b^2
\end{aligned}
$$

と分離され,

$$
\begin{aligned}
& (r, r) = (r^1, r^1) + (b^2, b^2), \\
& (Ap, p) = (p^1, \Lambda_r p^1).
\end{aligned}
$$

分離されたCG法のアルゴリズム

（一般の場合）

$R(A)$成分

$r_0^1 = b^1 - \Lambda_r x_0^1$

$p_0^1 = r_0^1$

$N(A)$成分

$r_0^2 = b^2$

$p_0^2 = b^2$

$For\ i = 0,1,\ldots,\ until\ convergence\ Do$

$$\alpha_i = \frac{(r_i^1, r_i^1) + (b^2, b^2)}{(p_i^1, \Lambda_r p_i^1)}$$

$x_{i+1}^1 = x_i^1 + \alpha_i p_i^1$ 　　 $x_{i+1}^2 = x_i^2 + \alpha_i p_i^2$

$r_{i+1}^1 = r_i^1 - \alpha_i \Lambda_r p_i^1$ 　　 $r_{i+1}^2 = b^2$

$$\beta_i = \frac{(r_{i+1}^1, r_{i+1}^1) + (b^2, b^2)}{(r_i^1, r_i^1) + (b^2, b^2)}$$

$p_{i+1}^1 = r_{i+1}^1 + \beta_i p_i^1$ 　　 $p_{i+1}^2 = b^2 + \beta_i p_i^2$

$End\ Do$

$$\Downarrow$$

分離されたCG法のアルゴリズム

（$b \in R(A): b^2 = 0$の場合）

$R(A)$成分

$r_0^1 = b^1 - \Lambda_r x_0^1$

$p_0^1 = r_0^1$

$N(A)$成分

$r_0^2 = 0$

$p_0^2 = 0$

$For\ i = 0,1,\ldots,\ until\ convergence\ Do$

$$\alpha_i = \frac{(r_i^1, r_i^1) + (b^2, b^2)}{(p_i^1, \Lambda_r p_i^1)}$$

$x_{i+1}^1 = x_i^1 + \alpha_i p_i^1$ 　　 $x_{i+1}^2 = x_0^2$

$r_{i+1}^1 = r_i^1 - \alpha_i \Lambda_r p_i^1$ 　　 $r_{i+1}^2 = 0$

$$\beta_i = \frac{(r_{i+1}^1, r_{i+1}^1) + (b^2, b^2)}{(r_i^1, r_i^1) + (b^2, b^2)}$$

$p_{i+1}^1 = r_{i+1}^1 + \beta_i p_i^1$ 　　 $p_{i+1}^2 = 0$

$End\ Do$

$R(A)$成分:

$\Lambda_r x^1 = b^1$ に対するCG法,　Λ_r : 正定値対称

$$\Downarrow$$

$x_k^1 \to x_+^1 = \Lambda_r^{-1} b^1$,　$r_1^k \to 0$: 最小二乗解.

$Q_1 x_k^1 \to A^+ b$,　　$Q_1 r_k^1 \to 0$.

$N(A)$成分:

$x_k^2 = x_0^2$,　$r_k^2 = 0$

$x_0 \in R(A)$ (たとえば $x_0 = 0$) $\Rightarrow x_k^2 = 0$: 最小ノルム解.

$(x_* = A^+ b)$

誤差の上界

$$\| e_k^1 \|_{\Lambda_r} = e^T A e \le 2 \left\{ \frac{\sqrt{\kappa(\Lambda_r)} - 1}{\sqrt{\kappa(\Lambda_r)} + 1} \right\}^k \| r_0^1 \|_{\Lambda_r^{-1}}$$

ただし,　$e_k^1 = x_k^1 - x_*^1$,　$e = x - x_*$,　$\kappa(\Lambda_r) = \dfrac{\lambda_1}{\lambda_r}$.

ランク落ち最小二乗問題への応用

$\min_{x \in R^n} \| b - Ax \|_2$,　$A \in R^{m \times n}$,　$m \ge n$

$rank\ A \le n$

$$\Updownarrow$$

$A^T A x = A^T b$　(正規方程式)

$A^T A$: 対称半正定値

$$\downarrow$$

CG法を適用

$$\downarrow$$

$CGLS$法

$$\downarrow$$

最小ノルム解 $A^+ b$ に収束

非対称問題への応用

Aが非対称で特異な場合も同様に

アルゴリズム($GMRES$法等）を

$R(A)$と$R(A)^\perp$の成分に分離して解析可能.