最小二乗問題の反復解法
Iterative solution of least squares problems

速水 謙（情報学プリンシプル研究系）
Ken HAYAMI (NII)

伊藤 徳史（(株)ビジネスデザイン研究所）
Tokushi ITO (Business Design Laboratory Co. Ltd.)

何がわかる？

大規模な最小二乗問題

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

を解くロバストな反復解法を提案し，その理論的性質を明らかにし，その有効性を数値実験により検証する．

どんな研究？

$B \in R^{n \times m}$ を用いて

$$\min_{z \in R^m} \| b - ABz \|_2$$

または

$$\min_{x \in R^m} \| Bb - BAx \|_2$$

を反復法を用いて解く．

状況設定

最小二乗問題は，曲線のあてはめ，統計モデリング，測地，写真測量，信号処理，制御，逆問題や積分方程式の解法など，科学・工学でよく現れる．

大規模問題に対しては，従来，正規方程式 $A^T Ax = A^T b$ に（前処理付き）共役勾配法（CG法）を適用するのが主流であった．しかし，それだと条件の悪い問題では収束が遅い．

そこで，本研究ではZhang and Oyanagi(1991)にならい，正方行列を係数行列にもつ最小二乗問題 $\min_{z \in R^m} \| b - ABz \|_2$ に変形し，ロバストなクリロフ部分空間反復法である一般化残差最小化法(GMRES法)を適用することを考える(AB-GMRES法)．

さらに，$\min_{x \in R^m} \| Bb - BAx \|_2$ にGMRES法を適用することも考える（BA-GMRES法）．

研究状況

連立一次方程式 $Ax = b \ (A \in R^{n \times n})$に対するロバストなクリロフ部分空間反復法：

GMRES(k)法　Generalized Minimum Residual (k) method

```
Choose  x_0.
*r_0 = b - A x_0
v_1 = r_0 / ||r_0||_2
for  i = 1,2,...,k
   h_{j,i} = (A v_i, v_j)   (j = 1,2,...,i)
   v̂_{i+1} = A v_i - Σ_{j=1}^{i} h_{j,i} v_j
   h_{i+1,i} = ||v̂_{i+1}||_2
   v_{i+1} = v̂_{i+1} / h_{i+1,i}
   Find  y_i ∈ R^i  which minimizes ||r_i||_2 = || ||r_0||_2 e_i - H̄_i y ||_2 .
   if  ||r_i||_2 < ε  then
      x_i = x_0 + [v_1,...,v_i] y_i
      stop
   endif
endfor
x_0 = x_k
Go to *.
```

($k = \infty$がGMRES法に相当する.)

記号

$R(A) = \{Ax \mid x \in R^n\}$　：Aの像(range)

$N(A) = \{x \in R^n \mid Ax = 0\}$　：Aの核(nullspace)

AB-GMRES法：

$\min_{z \in R^m} \| b - ABz \|_2$ にGMRES法を適用.

定理 1

$$R(A^T) = R(B), \quad R(A) = R(B^T)$$

$$\Downarrow$$

$AB - GMRES$法は任意の右辺$b \in R^m$，任意の初期解$x_0 \in R^n$に対して破綻することなく $\min_{x \in R^n} \| b - Ax \|_2$ の最小二乗解を与える.

NII　連絡先：速水 謙（Ken HAYAMI）／ 国立情報学研究所　情報学プリンシプル研究系　教授
TEL : 03-4212-2553　FAX : 03-4212-2553　Email : hayami@nii.ac.jp

BA-GMRES 法：

$\min\limits_{x \in R^n} \| Bb - BAx \|_2$ にGMRESを適用.

<u>定理２</u>

$$R(A) = R(B^T), \quad R(A^T) = R(B)$$

$$\Downarrow$$

$BA-GMRES$法は任意の右辺$b \in R^m$, 任意の初期解

$x_0 \in R^n$に対して破綻することなく

$\min\limits_{x \in R^n} \| b - Ax \|_2$ の最小二乗解を与える.

フルランクな場合

$m \geq n = \mathrm{rank} A$ (優決定問題)

$B = CA^T, \quad C \in R^{n \times n}$: 正則　とおくと,

$R(A) = R(B^T)$, かつ $R(A^T) = R(B) = R^n$.

例えば$C = \{\mathrm{diag}(A^T A)\}^{-1}$.

<u>定理３</u>

$A \in R^{m \times n}, \quad m \geq n,$

$B = CA^T, \quad C \in R^{n \times n}$: 対称正定値,

$\sigma_i \ (1 \leq i \leq n) : AC^{\frac{1}{2}}$の特異値

$$\Downarrow$$

$\sigma_i^2 (1 \leq i \leq n) : AB$および$BA$の固有値,

$m > n$ならばABの他の固有値は全て0.

（AB 法と BA 法の収束性の類似.）

$\mathrm{rank} A = m \leq n$ (劣決定問題)

$B = A^T C, \quad C \in R^{m \times m}$: 正則　とおくと,

$R(A^T) = R(B)$, かつ $R(A) = R(B^T) = R^m$.

例えば$C = \{\mathrm{diag}(AA^T)\}^{-1}$.

<u>定理４</u>

$A \in R^{m \times n}, \quad m \leq n,$

$B = A^T C, \quad C \in R^{m \times m}$: 対称正定値,

$\sigma_i \ (1 \leq i \leq m) : C^{\frac{1}{2}} A$の特異値

$$\Downarrow$$

$\sigma_i^2 (1 \leq i \leq m) : AB$および$BA$の固有値,

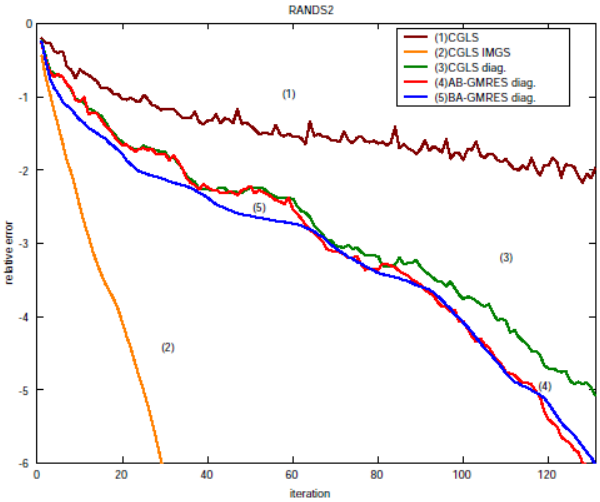
$m < n$ならばBAの他の固有値は全て0.

（AB 法と BA 法の収束性の類似.）

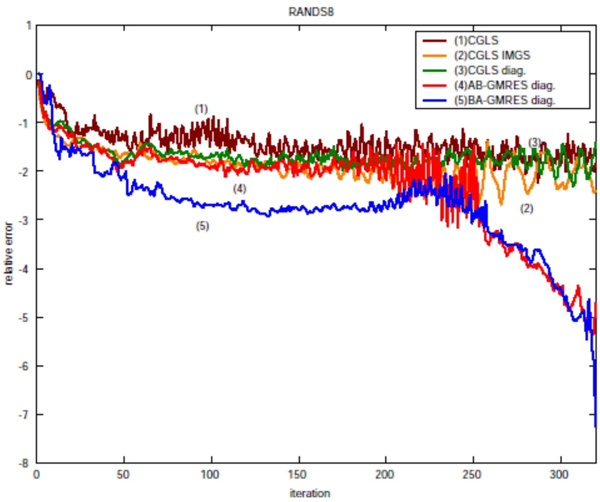
数値実験例

優決定問題（$m = 1{,}000$, $n = 320$)

条件数： 2×10^2



条件数：1×10^8



劣決定問題（$m = 320$, $n = 1{,}000$)

条件数：1×10^8