多倍長環境におけるチコノフ正則化法の正則化パラメータ選択手法の研究

情報科学科　高橋 壮汰　　　指導教員：代田 健二

1　はじめに

逆問題とは，観測結果から原因を推定する問題のことであり，代表例としては，

- 喉が痛い，熱があるなどの症状から病因を推定する
- 物体に電磁波を当て，散乱特性を観察することで形状を推定する

が挙げられる．これらの問題の数学解析を行うことは，一般的に困難である．したがって実用上の観点からは，コンピュータを用いて近似解を求める必要がある．

逆問題は一般的に非適切問題となる．非適切問題を離散化して得られる連立一次方程式もまた，非適切問題となる場合が多い．非適切問題に対する代表的な数値解法の１つとしてチコノフ正則化法 [1] があげられる．この手法は，汎用性の高さゆえに頻繁に用いられているが，一方，使用する際の困難な点としては正則化パラメータの選択方法がある．選択方法としては，ハンセンの L-curve 法，UPRE 法，GCV 法，モロゾフの相変原理が存在する [1]．これらの選択方法は，倍精度環境下である程度上手く動作することが知られている．しかし，100 桁を超えるような多倍長環境下では，必ずしも適切な正則化パラメータを得ることができないことが知られている [2]．また，UPRE 法については一昨年の川西，GCV 法については昨年の穂積の研究より，強い悪条件性を持つ係数行列を持つ連立一次方程式に対して最適な正則化パラメータを得ることは難しいことが示された [4][5]．

一方，微分方程式を支配方程式とする非適切問題の数値解法を考える場合，その非適切性ゆえに，離散化誤差，丸め誤差，データ誤差による影響を受け，安定で一定精度の近似解を得ることは困難になることが多い．この問題に対して，今井 [3] は離散化誤差には高精度解法であるスペクトル選点法を，丸め誤差には 100 桁を超えるような多倍長環境を用いることで，一意解を持つような非適切問題に対して高精度近似解を得ることが出来ることを示した．しかし，この研究ではデータ誤差に関しては考慮されていない．

本研究では，高精度数値解法と多倍長環境の使用を念頭においたデータ誤差対処法について考察した．手法としてはチコノフ正則化法を採用し，正則化パラメータ選択方法の一つであるモロゾフの相変原理 [1] について，多倍長環境で用いた場合の特性・性質を数値実験により明らかにすることが目的である．

2　チコノフ正則化法

悪条件方程式 $A\boldsymbol{x}^\delta = \boldsymbol{b}^\delta$ に対して

$$J_\alpha(\boldsymbol{x}) = ||A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^\delta||_2^2 + \alpha||\boldsymbol{x}||_2^2 \qquad (\alpha > 0)$$

を考える．ここで

$$\boldsymbol{x}_\alpha = \mathrm{argmin}\ J_\alpha(\boldsymbol{x})$$

により悪条件方程式の安定な解を得る方法をチコノフ正則化法と呼ぶ．正則化解は行列の特異系 $\{\sigma_j, \boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{v}_j\}$ により，次のように表現ができる．

$$\boldsymbol{x}_\alpha = \sum_{j=1}^{r} \frac{\sigma_j}{\sigma_j^2 + n\alpha} \boldsymbol{v}_j \boldsymbol{u}_j^T \boldsymbol{b}^\delta.$$

モロゾフの相変原理は，

$$F(\alpha) := \frac{1}{n}||\boldsymbol{r}_\alpha^\delta||_2^2 - \sigma^2$$

を 0 とする α_{M} を正則化パラメータとして選ぶ方法である．

3　数値実験

100 次元ヒルベルト行列を係数行列とする悪条件方程式に対して，10 進 100 桁多倍長環境において数値実験を行い，モロゾフの相変原理による正則化解の精度と正則化パラメータの最適性について確かめた．右辺に混入する誤差は標準正規乱数で与え，解ベクトルは全ての要素が 1 のベクトルとした．表 1 は各回数における α_{M}，α_{M} に対する真の解と正則化解の差のノルムの相対誤差，真の解と正則化解の差のノルムの相対誤差の最小値を示したものである．

表 1　α_{M} と相対誤差

回数	α_{M}	α_{M} に対する相対誤差	相対誤差の最小値
1	1.7782×10^{-3}	1.11222×10^{-1}	1.08053×10^{-1}
11	1.7882×10^{-3}	9.27334×10^{-2}	3.24790×10^{-2}
21	1.7882×10^{-3}	1.15986×10^{-1}	1.08955×10^{-1}
30	1.7882×10^{-3}	9.29257×10^{-2}	9.17708×10^{-2}

モロゾフの相変原理における α_{M} と，誤差が最小となったときの正則化パラメータの相対誤差の平均は約 9.5% となった．また，$F(\alpha)$ が最小となったときの正則化解の誤差ノルムの相対誤差の平均は約 5.93% であった．以上より，先行研究の UPRE 法 [4]，GCV 法 [5] と比較すると精度の高い正則化解と正則化パラメータが得られた．今後は，非線形計画法の手法により $F(\alpha) = 0$ を高精度で求める方法を開発することが課題である．

参考文献

[1] C. R. Vogel, *Computational methods for inverse problems*, SIAM, Philadelphia, 2002.

[2] H. Fujiwara and Y. Iso, Some Remarks on the Choice of Regularization Parameters under Multiple-Precision Arihmetic, Theoretical and Applied Mechanics, Vol.51, pp.387–393, 2002.

[3] 今井仁司，無限精度計算が切り開く応用解析・数値解析の未来，数理解析研究所講究録，Vol.1566，pp.96-118，2007.

[4] 川西雄三，多倍長環境におけるチコノフ正則化法の正則化パラメータ選択，2011.

[5] 穂積 優，多倍長環境におけるチコノフ正則化法の正則化パラメータ選択，2012.