精度保証付き数値計算ツールを用いた逆問題に対する数値解法の基礎研究

齊藤 亮介　　　指導教員：代田 健二

1　はじめに

逆問題とは，結果から原因を推定する問題のことである [4]. 逆問題を解析的に解くことは一般的に困難なため，数値計算により近似解を求めることが多い.

逆問題は一般的に Hadamard の意味で非適切 [1] である. Hadamard の意味で非適切とは,「解に一意性がない」,「解が存在しない」,「与えられたデータに対して，解が連続的に依存しない」のうち少なくとも一つを満たす場合を指す．非適切問題を離散化して得られる連立一次方程式の係数行列は，悪条件 [8] となることが多い．悪条件連立一次方程式に対する解法の一つとしては，Tikhonov 正則化法 [1] が存在する．また，近年では精度保証付き数値計算法を用いた手法 [2] も盛んに研究されている.

精度保証付き数値計算法 [3] とは,「与えられた問題の解の存在範囲もしくは一意存在の範囲を，丸め誤差の厳密評価を含めて特定する算法」である．計算により得られた近似解は，一般に誤差をもつ．誤差としては，モデル化誤差，観測誤差，離散化誤差，丸め誤差がある．丸め誤差および離散化誤差については，精度保証付き数値計算法により解決することが可能である.

しかし，離散化により得られた連立一次方程式には，観測誤差に起因したものも含まれている．精度保証付き数値計算法では観測誤差は考慮されておらず，対処することが困難である．観測誤差などの誤差を含む場合の非適切問題に対する代表的な手法が，Tikhonov 正則化法である．ただし Tikhonov 正則化法のみを用いると，安定な近似解は得られるものの，真の解の存在範囲を知ることは困難となる.

本研究の目的は，観測誤差に起因する誤差を含んだ右辺ベクトルをもつ悪条件連立一次方程式に対する品質保証法，すなわち安定性とともに解の存在を保証する手法を，精度保証付き数値計算法と Tikhonov 正則化法を利用して構築するための基礎研究である．また，本研究で対象とする問題は，非適切問題を離散化して得られる連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ (A : 正方行列) に対して，誤差を考慮した $A\boldsymbol{x}^\delta = \boldsymbol{b}^\delta$ である．ここで，$\boldsymbol{b}^\delta = \boldsymbol{b} + \delta\boldsymbol{b}$ ($\|\delta\boldsymbol{b}\|_\infty \le \delta$) であり，$A$ は悪条件とする.

2　精度保証付き数値計算法

精度保証付き数値計算法を実現するための基盤となるのが区間演算である．区間演算 [3] とは，実数値を [下限, 上限] という 2 つの数で挟まれた区間で表現し，その区間同士の加減乗除の演算を演算結果としてありうる集合を包含するように定義することにより行われるものである．そのため，精度保証付き数値計算法により得られた連立一次方程式の解は，各要素が区間として表現される区間ベクトルなる．その区間ベクトルの集合を，$\mathbb{IR}^n$ と表す．また，行列についても同様に区間行列を定義することができ，その集合は $\mathbb{IR}^{n\times n}$ のように表される.

連立一次方程式に対する精度保証付き数値計算法として，Krawczyk 法 [7] が存在する．また，Krawczyk 法を実装した精度保証付き数値計算ツールとしては，Rump 教授により開発された [6] がある．INTLAB で実装されたツールは，Krawczyk 法における近似逆行列 R を反復的に改良することで，さらに解の精度を向上させている．近似逆行列の改良では，次の結果が利用されている.

定理 2.1 ([5])　連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ と A の近似逆行列 $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$，$\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^n$，$\boldsymbol{u} > \boldsymbol{0}$ とし対角要素が $\boldsymbol{u}$ である対角行列 $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を定める．ここで，$E := I - RA$，$\Delta = R(A\tilde{\boldsymbol{x}} - b)$，$\|D^{-1}|E|\boldsymbol{u}\|_\infty < 1$ とする．A が正則行列のとき，以下が成り立つ.

$$|\tilde{\boldsymbol{x}} - A^{-1}\boldsymbol{b}| \le |\Delta| + \frac{\|D^{-1}\Delta\|_\infty}{1 - \|D^{-1}|E|\boldsymbol{u}\|_\infty} \cdot |E|\boldsymbol{u} \qquad (1)$$

INTLAB では，(1) の右辺を小さくする R を反復的に求めることで，精度の高い近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ を求め，それらを Krawczyk 法で用いることで，存在保証がされた高精度区間解を得ている．本研究では，精度保証付き数値計算ツールとしてこの INTLAB を用いることにする.

Krawczyk 法の基礎となる定理と，Krawczyk 法による連立一次方程式に対する精度保証付き数値計算アルゴリズムは，次のとおりである:

定理 2.2 ([3])　$A \in \mathbb{IR}^{n\times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{IR}^n$ に対して，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ と A の近似逆行列 $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が与えられているとする．$\boldsymbol{X} \in \mathbb{IR}^n$ に対して式 (2) が成立すれば，A に含まれるすべての行列は正則であり，A に含まれる任意の $\hat{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ と $\boldsymbol{b}$ に含まれる任意の $\hat{\boldsymbol{b}} \in \mathbb{R}^n$ に対して，$\hat{A}\hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{b}}$ となる唯一の元 $\hat{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^n$ が $\tilde{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{Y}$ に存在する.

$$\boldsymbol{Y} := R(\boldsymbol{b} - A\tilde{\boldsymbol{x}}) + (I - RA)\boldsymbol{X} \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{X}) \qquad (2)$$

Algorithm 1 Krawczyk 法による解の検証アルゴリズム [3]

1: $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の近似解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ と A の近似逆行列 R を計算する.
2: $Z := R\cdot(\boldsymbol{b} - A\tilde{\boldsymbol{x}})$ を精度保証付きで計算し，$X = Z, k := 0$ とする.
3: (a) 定数 $\varepsilon > 0$ に対して区間拡大 $\hat{\boldsymbol{X}} := (1 + [-\varepsilon, \varepsilon])\boldsymbol{X}$ を行い，$\hat{\boldsymbol{X}}$ と $\boldsymbol{0}$ を含む最小の区間ベクトルをあらためて $\boldsymbol{X}$ とおく.
(b) $\boldsymbol{Y} := \boldsymbol{Z} + (I - RA)\boldsymbol{X}$ を精度保証付きで計算する.
4: $\boldsymbol{Y} \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{X})$ ならば検証完了とする．そうでなければ，$k := k + 1, \boldsymbol{X} = \boldsymbol{Y}$ として 3. に戻る.

$\boldsymbol{Y} \subset \mathrm{int}(\boldsymbol{X})$ となったとき $\tilde{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{Y}$ 内に解が局所一意に存在する．k があらかじめ定めた最大反復回数に到達した場合や設定した閾値を超えた場合は反復終了し，検証失敗とする.

3　Tikhonov 正則化法

Tikhonov 正則化法とは，右辺ベクトルに誤差を持つ悪条件方程式 $A\boldsymbol{x}^\delta = \boldsymbol{b}^\delta$ に対して

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

を最小にする $\boldsymbol{x}_\alpha^\delta$ により $A\boldsymbol{x}^\delta = \boldsymbol{b}^\delta$ の安定な解を得る方法である．ここで与えられた α を正則化パラメータと呼ぶ．Tikhonov

正則化法の解 $\boldsymbol{x}_\alpha^\delta$ は，与えられた α に対して，次の連立一次方程式を解くことにより得られる．

$$(\alpha E_n + A^{\mathrm{T}} A)\boldsymbol{x}_\alpha^\delta = A^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b}^\delta\,. \tag{3}$$

正則化解 $\boldsymbol{x}_\alpha^\delta$ は，α を適切にとることにより安定かつ一定精度を持ったものとして得られるが，真の解に対する保証を付けることはできない．本研究では，この 2 つの方法を組み合わせて使うことで，悪条件連立一次方程式に対して品質保証された数値解法の構築を試みる．2 つの方法を組み合わせた際に得られる解を，本論文では正則化区間解と呼ぶ．ここで述べる品質保証とは，「誤差を小さくしつつ，正則化区間解が真の解を含むことをある程度保証する」ことである．本研究では，Tikhonov 正則化法による連立一次方程式 (3) を精度保証付きツールで解くことにより，安定かつ一定の精度保証がされた正則化区間を得ることを試みる．

4 数値実験

本論文における実験環境は次の通りである．

- Intel Xeon CPU E5-1603 2.80GHz (メモリ 8.00GB)
- Windows 10 Pro 64bit
- INTLAB - INTerval LABoratory Version 9
- Octave (4.0.0)

実験は以下の条件で実施する．

$$n = 1000,\ \delta = 10^{-5},\ \boldsymbol{x}_{\mathrm{true}} = (1, \cdots, 1)^{\mathrm{T}}, \mathrm{cond}(A) = 10^{12}$$

$$A\boldsymbol{x}^\delta = \hat{\boldsymbol{b}}^\delta\ \ (A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \boldsymbol{b}^\delta, \boldsymbol{x}^\delta \in \mathbb{R}^n)$$

$$\hat{\boldsymbol{b}}^\delta = ([b_i^\delta - \delta, b_i^\delta + \delta]),\ \boldsymbol{b}^\delta = \boldsymbol{b} + \boldsymbol{\delta b},\ (\|\boldsymbol{b}^\delta - \boldsymbol{b}\|_\infty < \delta)$$

なお，A は Matlab の `randsvd` 関数により生成した．また $\boldsymbol{b}$ は多倍長計算により $A\boldsymbol{x}_{\mathrm{true}}$ を計算することにより得ている．

図 1 は，Tikhonov 正則化法を使用せずに求めた区間解と真の解を，可視化のため $n = 1$ から $n = 100$ までプロットしたものである．赤線が区間解の各要素の上限と下限を結んだものであり，青線が真の解である．この結果より，悪条件連立一次方程式に対して精度保証付き数値計算法のみを用いると，真の解を含むものの非常に幅が大きい不安定な区間解が得られてしまう．

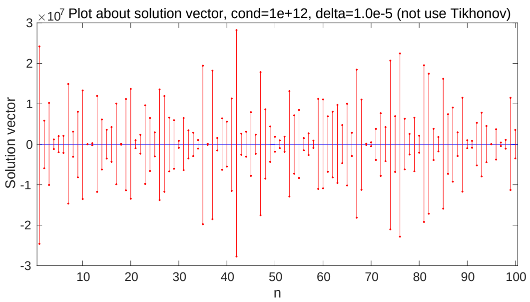

図 1 区間解と真の解（Tikhonov 正則化法不使用）

Tikhonov 正則化法を併用した場合の数値実験結果を示す．表 1 は，正則化パラメータごとの誤差および真の解が区間解に入っている割合を表している．ここで誤差は，$\dfrac{\sqrt{\sum |e_i|^2}}{\|\boldsymbol{x}_{\mathrm{true}}\|_2}$ であり，

$$e_i = \max\{(\boldsymbol{x}_{\mathrm{true}})_i - (XX_i)_{\mathrm{inf}}, (\boldsymbol{x}_{\mathrm{true}})_i - (XX_i)_{\mathrm{sup}}\}\,.$$

表 1 における※の結果は，Tikhonov 正則化法を用いず精度保証付き数値計算法のみを用いた場合の結果である．図 2 は正則化パラメータと誤差，図 3 は誤差と割合の両対数グラフである．図内の青丸は誤差最小点を示している．

表 1 誤差および真の解が区間解に入っている割合)

α	二乗誤差	割合
※	8.09×10^6	100
10^{-14}	1.58×10^{10}	100
10^{-6}	1.33×10^2	100
10^{-3}	6.43×10^{-1}	100
1.80×10^{-3}	4.70×10^{-1}	90.8
4.50×10^{-3}	3.57×10^{-1}	51.2
5.40×10^{-3}	3.49×10^{-1}	42.6
6.50×10^{-3}	3.45×10^{-1}	35.4
8.50×10^{-3}	3.43×10^{-1}	27.2
1.20×10^{-2}	3.49×10^{-1}	20.9
2.00×10^{-2}	3.69×10^{-1}	10.4
10^{-1}	5.03×10^{-1}	1.2
1.00	8.02×10^{-1}	0

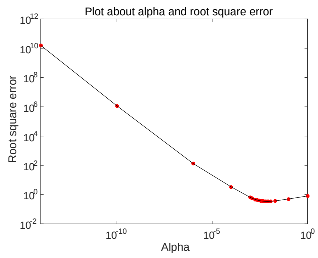

図 2 α(横軸) と誤差 (縦軸)

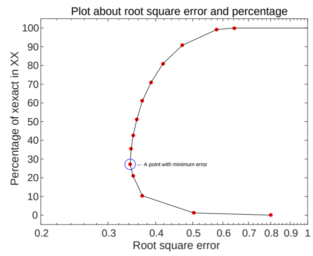

図 3 誤差 (横軸) と割合 (縦軸)

これらの数値実験結果より，真の解をすべて含む正則化区間解が必ずしも誤差を最小にしないこと，一方，正則化パラメータの選択により誤差を最小にしかつ一定の割合で真の解を含む正則化区間解が得られる可能性があること，すなわち，一定の品質保証がされた正則化区間解が得られる可能性を示すことができた．今後は，正則化区間解の数学解析および一定の品質保証解を得るための α の選択法について検討する必要がある．

参考文献

[1] A. Kirsch, An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems, Springer, 2011.

[2] Y. Kobayashi and T. Ogita, A fast and efficient algorithm for solving ill-conditioned linear systems, JSIAM Letters, Vol. 7, pp. 1–4, 2015.

[3] 中尾充宏, 渡部善隆, 実例で学ぶ精度保証付き数値計算 –理論と実装–, サイエンス社, 2011.

[4] 武者利光 (監修), 岡本良夫, 逆問題とその解き方, オーム社, 1992.

[5] S. M. Rump, Accurate solution of dense linear systems part I: Algorithms in rounding to nearest, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 242, pp. 157-184, 2012.

[6] S. M. Rump, INTLAB - INTerval LABoratory, in Developments on Reliable Computing, ed. T. Csendes, pp. 77–104, Kluwer Academic Publishers, 1999.

[7] S. M. Rump, Verification methods: Rigorous results using floating-point arithmetic, Acta Numerica, Vol. 19, pp. 287–449, 2010.

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