

最小自乗法における
Jacobi の Algorithm について

富山大文理 田中專一郎

§ 1. 序論

R^m, R^n ($m \geq n$) をそれぞれ m, n 次元 Euclid 空間とする。
 $x \in R^n, f(x) \in R^m$ のとき, R^n のある閉領域において

$$S(x) = |f(x)|^2$$

の最小値をとる x を求める。これが最小自乗法の問題である。

いま $\text{grad } S(x) = 0$ を満たす $x = \bar{x}$ が R^n の領域 D の中に存在すると仮定する。このとき $g(x) = \text{grad } S(x)$ とおき, $g(x) = 0$ の根 $x = \bar{x}$ を Newton 法で求めるとき, 最小自乗法における Newton 法という。初期値 $x^{(0)}$ と \bar{x} の十分近くと選んだとき Newton 法によつて定まる数列 $\{x^{(i)}\}$ は $p^{(i)} = x^{(i)} - \bar{x}$ の 2 次の order で \bar{x} に収束するが, 種々の例題を電子計算機で計算した結果によると, 初期値 $x^{(0)}$ が \bar{x} よりやや離れてゐる場合には Newton 法で決まる $\{x^{(i)}\}$ は発散し, Newton 法は役に立たない。そこで収束の速さは少々

様性にもよるが、 $\{x^k\}$ が収束するための初期値の範囲が広く選ばれ
 る Algorithm はその意味があるという立場から Jacobi
 の Algorithm を改良した。ここで⁽¹⁾ $f(x) \in C^3(D)$ の仮定
 のもとにこの Algorithm によつてきまる $\{x^k\}$ についてこの基
 本的な定理を証明したが、こゝではよりゆるい仮定

$$f(x) \in C^2(D)$$

のもとに、さきと同様の結果が成立することを示す。

§2. Jacobi の Algorithm.

Jacobi の Algorithm の基礎は次の補助定理である。

補助定理 1. x は固定されたベクトル, $A(x)$ は $m \times n$ 行列
 とする。 $A(x)$ の階数 n ならば

$$S(x, h) = |A(x)h + f(x)|^2$$

と最小となる $h = \bar{h}$ は

$$A^*(x) A(x) \bar{h} = -A^*(x) f(x)$$

で与えられる。こゝに $A^*(x)$ は $A(x)$ の転置行列である。

さらに $h \in R^n$ の任意の h に対して

$$S(x, h) - S(x, \bar{h}) = |A(x)(h - \bar{h})|^2$$

が成り立ち、特に $h = 0$ とおけば

$$S(x) - S(x, \bar{h}) = |A(x) \bar{h}|^2$$

⁽¹⁾ 例えは [2].

x は一定程度小さくしたベクトルとする。総誤値の十分小さい
 h と許す。

$$f(x+h) \approx f(x) + A(x)h$$

が成立つ。こゝに $A(x)$ は $m \times n$ ($m \geq n$) の Jacobian 行列

$$(2.1) \quad A(x) = \left(\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \right) \quad \begin{array}{l} i=1, 2, \dots, m \\ j=1, 2, \dots, n \end{array}$$

である。元のある近傍で $A(x)$ の階数は n であると仮定しよう。 $S(x) = |f(x)|^2$ の最小値を求めるため適当な初期値 $x^{(0)}$ を選ぶ。 $|f(x^{(0)}+h)|$ の最小値をとる h を直接求めることは一般に簡単ではない。そこで

$$|f(x^{(0)}+h)| \approx |f(x^{(0)}) + A(x^{(0)})h|$$

であること、 $S(x^{(0)}, h) = |f(x^{(0)}) + A(x^{(0)})h|^2$ の最小値をとる $h = h^{(0)}$ は補助定理 1 より容易に求まるから、この $h^{(0)}$ をもって $|f(x^{(0)}+h)|^2$ の最小値を与える h の近似と考える。い、換之れば $x = x^{(0)} + h^{(0)}$ をもって $|f(x)|^2$ の最小値をとる x の第 1 近似と考える。この意味から $x^{(1)} = x^{(0)} + h^{(0)}$ とおく。

帰納法により数列 $\{x^{(i)}\}$, $\{h^{(i)}\}$ が得られる。この数列の求め方を algorithm の形と書けば次のようになる。

Algorithm (Jacobi) 通常に初期値 $x^{(0)}$ を選ぶ。 $s=0, 1, 2, \dots$ について $x^{(s)}$ に対する連立一次方程式

$$(2.2) \quad A^*(x^{(s)})A(x^{(s)})h^{(s)} = -A^*(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

により $h^{(s)}$ を定める。 $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ とおく。

この algorithm を最小自乗法における Jacobi の algorithm という。

§ 3. 補助定理.

$n \times n$ 行列 $C(x)$ と

$$(3.1) \quad C(x) = \left(\sum_{i=1}^m \frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_j \partial x_k} \right) \quad (j, k = 1, 2, \dots, n)$$

によって定義する。こゝでわれわれの問題の後述をのべる。

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in R^n,$$

$$f(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)) \in R^m \quad (m \geq n),$$

$$S(x) = |f(x)|^2 \quad \left(\equiv \sum_{i=1}^m f_i(x)^2 \right)$$

とおく。 R^n の領域 D において

$$(A1) \quad f(x) \in C^2(D),$$

(A2) $\text{grad } S(x) = 0$ とする $x = \bar{x}$ が D の中に存在する。

$$(A3) \quad \min_{|h|=1} |A(\bar{x})h|^2 > \|C(\bar{x})\|.$$

こゝに $\|C(x)\|$ は行列 $C(x)$ の norm を表わす。

仮定 (A3) が実際問題に適用するに際して必要なものであることを示したものに例えば文献 [2] 参照。

補助定理 2. “ $m \times n$ 行列 $A(x)$ は (2.1) で定義されたものとする。任意の正数 ε に対し、 \bar{x} の適当な閉近傍 V_ε を D の中にとれば”

$$0 \leq \min_H |A(\bar{x})h|^2 - \min_{V_\varepsilon \times H} |A(x)h|^2 < \varepsilon.$$

こゝに $H = \{h \mid |h|=1, h \in R^n\}$ である。今後 H はこのように単位球面とありわす。この補助定理の証明は $A(x)$ の要素が D で連続であることから殆ど明らかである。

補助定理 3. “ \bar{x} の δ 閉近傍 V と正数 μ と適当に選べば”

$$\min_{V \times H} |A(x)h|^2 > \max_V \|C(x)\| + \mu.$$

(A3), 補助定理 2, $C(x)$ の要素が D で連続というこゝを用いて証明される。たゞし補助定理 3 の δ は補助定理 2 の ε と一般に異なる。

補助定理 4. “任意の正数 ε に対し、 \bar{x} の δ_1 閉近傍 V_1 とすれば、 $x^{(0)} \in V_1$ と満足する任意の $x^{(0)}$ に対し (2.2) の解

$h^{(0)}$ は $|h^{(0)}| \leq \varepsilon$. "

証明. $A^*(\bar{x})A(\bar{x}) = 0$ かつ $|A^*(x)A(x)|$ は連続であるから
 $|x^{(0)} - \bar{x}| \leq \delta_1$ の任意の $x^{(0)}$ に対し

$$|A^*(x^{(0)})A(x^{(0)})| / \mu \leq \varepsilon$$

が成り立つ。ところが $h^{(0)} \neq 0$ として $x^{(0)} \in V_1$ の任意の $x^{(0)}$ に対し

$$\begin{aligned} \mu |h^{(0)}|^2 &\leq (A^*(x^{(0)})A(x^{(0)}))h^{(0)}, h^{(0)} \\ &= - (A^*(x^{(0)})f(x^{(0)}), h^{(0)}) \\ &\leq |A(x^{(0)})f(x^{(0)})| |h^{(0)}| \end{aligned}$$

従って $|h^{(0)}| \leq |A(x^{(0)})f(x^{(0)})| / \mu \leq \varepsilon$. (証明終)

$$B_\lambda(x) = A^*(x)A(x) + (1-\lambda)C(x)$$

とおく。

補助定理 5. "仮定 (A3) の V 上に $0 \leq \lambda \leq 1$ の任意の λ に対し

$$\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) > \lambda \|C(\bar{x})\| . "$$

証明. C を任意の $m \times n$ 行列とする。 $h \in H$ の任意の h に対し $\|C\| \geq |(Ch, h)|$, よって I を単位行列とすると任意の h に対し

$$((\|C\|I + C)h, h) \geq 0 .$$

さ2 $\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) = (B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h})$ と満ちる $\hat{h} \in H$ が存在する。従って

$$\begin{aligned}
 & \min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) \\
 &= (B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h}) \\
 &= ((A^*(\bar{x})A(\bar{x}) - (1-\lambda)\|C(\bar{x})\|) \hat{h}, \hat{h}) \\
 &\quad + (1-\lambda)((\|C(\bar{x})\|I + C(\bar{x})) \hat{h}, \hat{h}) \\
 &\geq ((A^*(\bar{x})A(\bar{x}) - (1-\lambda)\|C(\bar{x})\|) \hat{h}, \hat{h}) \\
 &\geq \min_H (A^*(\bar{x})A(\bar{x})h, h) - \|C(\bar{x})\| + \lambda\|C(\bar{x})\| \\
 &> \lambda\|C(\bar{x})\| \quad (\text{証明終})
 \end{aligned}$$

§4. Main Theorem.

定理を述べる前に先づ用いられる記号を述べよう。

$$M(\lambda) = \min_H |A(\lambda)h|^2, \quad M = \min_{V \times H} |A(x)h|^2$$

$$K = (\max_V \|C(x)\| + \mu) / M < 1,$$

ここで V, μ は補助定理3におけるものである。

定理“(A1) R^n の領域 D で $f(x) \in C^2(D)$,

(A2) $\text{grad } S'(x) = 0$ と満ちる $x = \bar{x}$ が D の中に存在する。

(A3) $\|C(\bar{x})\| < \min_H |A(\bar{x})h|^2$

(A1), (A2), (A3) の仮定のもとに, 適当な正数 δ_0 を選べば
 $|x^{(0)} - \bar{x}| \leq \delta_0$ を満たす $x^{(0)}$ と Jacobi の algorithm (1.2) によ
 ってきまる系列 $\{x^{(s)}\}$ および $\{h^{(s)}\}$ に対して (I), (II), (III) お
 よび (IV) が成立する.

(I) \bar{x} の適当な近傍をとると, $x = \bar{x}$ はその近傍で $S(x)$
 の最小値を与える。

$$(II) \quad |x^{(s+1)} - \bar{x}| \leq K |x^{(s)} - \bar{x}| \quad (s=0, 1, 2, \dots),$$

$$(III) \quad |h^{(s+1)}| \leq K |h^{(s)}| \quad (s=0, 1, 2, \dots),$$

$$(IV) \quad S(x^{(s+1)}) \leq S(x^{(s)}) \quad (s=0, 1, 2, \dots)."$$

(I) の証明. $\text{grad } S(\bar{x}) = 0$ であるから, 補助定理 5 の直接
 の結果である。尚ほこの補助定理 5 で $\lambda = 0$ とすればよい。

(II) の証明. $p^{(s)} = x^{(s)} - \bar{x} \quad (s=0, 1, 2, \dots)$ とおく。

$h^{(s)} = x^{(s+1)} - x^{(s)} = p^{(s+1)} - p^{(s)}$ であるから, これを (2.2) に
 代入すると.

$$(4.1) \quad A^*(x^{(s)}) A(x^{(s)}) p^{(s+1)} = A^*(x^{(s)}) A(x^{(s)}) p^{(s)} - A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)})$$

という。

$$(4.2) \quad g(p^{(s)}) = (A^*(x^{(s)}) A(x^{(s)}) + C(\bar{x})) p^{(s)} - A^*(x^{(s)}) f(x^{(s)})$$

とおき, これを成分ごとに計算すれば

$$g_j(p^{(s)}) = \sum_{i,k=1}^{m,n} \left(\frac{\partial f_i(x+p^{(s)})}{\partial x_j} \frac{\partial f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_k} + f_i(\bar{x}) \frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j \partial x_k} \right) p_k^{(s)} \\ - \sum_{i=1}^m \frac{\partial f_i(\bar{x}+p^{(s)})}{\partial x_j} f_i(\bar{x}+p^{(s)})$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{i,k} \left\{ \left(\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_j} + \sum_{p=1}^n \frac{\partial^2 f_i(\bar{x} + \theta_j p^{(s)})}{\partial x_j \partial x_p} p_p^{(s)} \right) \cdot \right. \\
&\quad \cdot \left(\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_k} + \sum_{p=1}^n \frac{\partial^2 f_i(\bar{x} + \theta_k p^{(s)})}{\partial x_k \partial x_p} p_p^{(s)} \right) + \\
&\quad \left. + f_i(\bar{x}) \frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j \partial x_k} \right\} p_k^{(s)} \\
&\quad - \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_j} + \sum_{p=1}^n \frac{\partial^2 f_i(\bar{x} + \theta_j p^{(s)})}{\partial x_j \partial x_p} p_p^{(s)} \right) \\
&\quad \cdot \left(f_i(\bar{x}) + \sum_{p=1}^n \frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_p} h_p^{(s)} + \dots \right)
\end{aligned}$$

これを一次の項まで計算すれば $\frac{1}{2} \text{grad } S(\bar{x}) = 0$ を用いて

$$g_j(p^{(s)}) = \sum_{i,k} f_i(\bar{x}) \left(\frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial^2 f_i(\bar{x} + \theta_j p^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right) p_k^{(s)} + \dots$$

が存在する... は $p^{(s)}$ に関して二次以上の項をあらわす。従って補助定理3の μ に対して、適当な正数 δ_0 をとれば $|x^{(s)} - \bar{x}| = |p^{(s)}| \leq \delta_0$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

$$|g(p^{(s)})| \leq \mu |p^{(s)}|$$

が成り立つ。(4.1), (4.2) より

$$A^*(x^{(s)}) A(x^{(s)}) p^{(s+1)} = -c(\bar{x}) p^{(s)} + g(p^{(s)}),$$

この両辺と $p^{(s+1)}$ との内積をとると

$$|A(x^{(s)}) p^{(s+1)}|^2 = -(c(\bar{x}) p^{(s)}, p^{(s+1)}) + (g(p^{(s)}), p^{(s+1)}).$$

よって $M(x) = \min_H |A(x)h|^2$ であるから

$$\begin{aligned} M(x^{(s)}) |p^{(s+1)}|^2 &\leq |A(x^{(s)}) p^{(s+1)}|^2 \\ &\leq \|C(\bar{x})\| |p^{(s)}| |p^{(s+1)}| + |g(p^{(s)})| |p^{(s+1)}| \end{aligned}$$

従つて $|x^{(s)} - \bar{x}| \leq \delta_0$ の任意の $x^{(s)}$ に対し

$$|p^{(s+1)}| \leq \frac{\|C(x)\| + \mu}{M(x^{(s)})} |p^{(s)}| \leq \frac{\|C(\bar{x})\| + \mu}{M} |p^{(s)}|$$

従つて $|p^{(s+1)}| \leq K |p^{(s)}|$ となる。よつて初期値 $x^{(0)}$ と δ_0 の範囲に選べば $|p^{(1)}| \leq K |p^{(0)}|$ 。従つて $x^{(1)}$ は $|x^{(1)} - \bar{x}| \leq \delta_0$ の範囲にあり、帰納法を用ゐる。

$$|x^{(s+1)} - \bar{x}| \leq K |x^{(s)} - \bar{x}| \quad (s=0, 1, 2, \dots),$$

$$\therefore K \text{ は } K = (\max_x \|C(x)\| + \mu) / M < 1.$$

(証明終)

(Ⅲ) の証明. $h^{(s+1)} = 0$ のとき (Ⅲ) は明らかに成立つから $h^{(s+1)} \neq 0$ とする。また $|h^{(s)}|, |h^{(s+1)}|$ の間の不等式を導く。(2.2)より

$$-A^*(x^{(s+1)}) A(x^{(s+1)}) h^{(s+1)} = A^*(x^{(s+1)}) f(x^{(s+1)}).$$

さう

$$G(x^{(s)}, h^{(s)}) = A^*(x^{(s+1)}) f(x^{(s+1)}) - C(x^{(s)}) h^{(s)}$$

と置き、この各成分を次の計算すれば

$$\begin{aligned}
G_j(x^{(s)}, h^{(s)}) &= \sum_{i=1}^m \frac{\partial f_i(x^{(s+1)})}{\partial x_j} f_i(x^{(s+1)}) - \sum_{i,k} f_i(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_k^{(s)} \\
&= \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)} + \theta_i h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_k^{(s)} \right) \\
&\quad \cdot \left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^n \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_k} h_k^{(s)} + \dots \right) \\
&\quad - \sum_{i,k} f_i(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_k^{(s)}
\end{aligned}$$

故に $G_j(x^{(s)}, h^{(s)}) = \sum_{i,k} f_i(x^{(s)}) \left(\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)} + \theta_i h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right) h_k^{(s)} + O(h^2).$

よって補助定理3を満足す μ に對して適當に正数 $\delta_1 (\leq \delta)$ と α を選べば

$$|x^{(s)} - \bar{x}| \leq \delta_1, \quad |h^{(s)}| \leq \alpha$$

の對へての $(x^{(s)}, h^{(s)})$ に對して

$$|G(x^{(s)}, h^{(s)})| \leq \mu |h^{(s)}|$$

が成立す。 $G(x^{(s)}, h^{(s)})$ の定義式より (4.3) は

$$-A^*(x^{(s+1)})A(x^{(s+1)})h^{(s+1)} = G(x^{(s)}, h^{(s)}) + C(x^{(s)})h^{(s)}$$

とされる。仮定より $h^{(s+1)} \neq 0$ であるから $h^{(s+1)}$ と (4.5) との

内積を取れば (II) の場合と同様にして

$$|h^{(s+1)}| \leq \frac{\|C(x^{(s)})\| + \mu}{M} |h^{(s)}|$$

が成立す。これより $|h^{(s)}|, |h^{(s+1)}|$ の間の不等式関係が得る。つまり

に $|h^{(s)}|$ の意味の単調減少 $\neq 0$ に近づく $\neq 0$ を示す。

の帰納法を用いる。補助定理4より適当に $\delta_2 (\leq \delta_1)$ を選べば、
 $|x^{(0)} - \bar{x}| \leq \delta_2$ の任意の $x^{(0)}$ に対し

$$|h^{(0)}| \leq \alpha$$

が成り立つ。よって $h^{(0)}$ は (4.4) の範囲にある。従って

$$K = \frac{\max_{V \times H} \|C(x)\| + \mu}{\min_{V \times H} |A(x)h|^2}$$

と表わす。補助定理3より $K < 1$ 、従って

$$|h^{(1)}| \leq K |h^{(0)}|$$

よって $|h^{(1)}| \leq \alpha$ 帰納法より

$$|h^{(s+1)}| \leq K |h^{(s)}| \quad (s=0, 1, 2, \dots).$$

(証明終)

(IV) の証明. $S'(x^{(s+1)}) - S'(x^{(s)})$

$$= \sum_{i=1}^m (f_i(x^{(s+1)} + h^{(s+1)}))^2 - \sum_{i=1}^m (f_i(x^{(s)}))^2$$

$$= \sum_{i=1}^m \left[(f_i(x^{(s)}) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} h_j^{(s)} + \frac{1}{2} \sum_{j,k} \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)} + \theta h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_j^{(s)} h_k^{(s)})^2 - (f_i(x^{(s)}))^2 \right]$$

$$= 2 \sum_{i,j} f_i(x^{(s)}) \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} h_j^{(s)} + \sum_{i,j,k} f_i(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)} + \theta h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_j^{(s)} h_k^{(s)} + \sum_{i,j,k} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_k} h_j^{(s)} h_k^{(s)}$$

$$= -|A(x^{(s)})h^{(s)}|^2 + (C(x^{(s)})h^{(s)}, h^{(s)})$$

$$+ \sum f_i(x^{(s)}) \left(\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)} + \theta h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right) h_j^{(s)} h_k^{(s)}$$

とよが、補助定理3の μ と δ と ϵ の適当な d を選べば

$$|x^{(s)} - \bar{x}| \leq \delta, \quad |h^{(s)}| \leq d \quad \text{と許す}$$

$$\left| \sum f_i(x^{(s)}) \left(\frac{\partial^2 f_i(x^{(s)} + \theta h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} - \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} \right) h_j^{(s)} h_k^{(s)} \right| \leq \mu |h^{(s)}|^2$$

が成り立つ。よって補助定理4より適当な正数 δ_3 を選べば

$$|x^{(0)} - \bar{x}| \leq \delta_3 \text{ の任意の } x^{(0)} \text{ と許す } |h^{(0)}| \leq d \text{ が成り立つ。}$$

$\{x^{(s)} - \bar{x}\}$ および $\{h^{(s)}\}$ の単調性より

$$|x^{(s)} - \bar{x}| \leq \delta_3, \quad |h^{(s)}| \leq d \quad (s=0, 1, 2, \dots)$$

が成り立つ。

$$S(x^{(s+1)}) - S(x^{(s)}) = -|A(x^{(s)}) h^{(s)}|^2 + (C(x^{(s)}) h^{(s)}, h^{(s)}) + \mu |h^{(s)}|^2$$

である。 δ_3 は補助定理3の δ より小さく選ぶから、補助定理3を用いる

$$|A(x^{(s)}) h^{(s)}|^2 \geq (C(x^{(s)}) h^{(s)}, h^{(s)}) + \mu |h^{(s)}|^2$$

が証明される。よって

$$S(x^{(s+1)}) \leq S(x^{(s)}) \quad (s=0, 1, 2, \dots)$$

(証明終)

文献

- [I] 田中尊一郎 数値解法における \equiv の問題, 流体力学と数値計算シンポジウムの報告(京大数研講義録)
- [II] ———, 最小自乗法における Algorithm について, 数値解析の基礎理論および偏微分方程式の数値解法シンポジウムの報告(京大数研講義録)