

悪条件問題に対する数値解法

愛媛大学 理学部 北川高嗣

(Takashi Kitagawa)

本稿に於いては、悪条件問題 (Ill-posed Problems) に対する数値的取り扱いについて考える。ここに扱う悪条件問題とは、以下のようなものを指すことにする。

1. 線型作用素方程式に於ける Ill-posedness の特徴づけ。

$$Kf = g \quad : \quad K \in [X \rightarrow Y], f \in X, g \in Y.$$

ここに K は、完備距離空間 X から Y へのコンパクト線型作用素とし、 f, g は各々 X, Y の要素とする。

Hadamard によって定義された Well-posed の概念は、次の二つの条件を満たすものとして知られている。

a) Y の任意の要素 $g \in Y$ に対し解 f が X 内に一意に存在する。(i.e. for $\forall g \in Y, \exists! f \in X$ s.t. $Kf = g$.)

b) 解 $f \in X$ は、 g に連続に依存する。

(The solution $f \in X$ depends continuously on $g \in Y$.)

Well-posed とはい問題と、Ill-posed Problems という。

b) の条件は、安定性 (stability) に関するものがあるが、厳密に述べれば次の様になる。

今 $Kf = g$, $K \in [X \rightarrow Y]$: compact, linear X, Y : complete Metric sp.
 であるが、 X, Y の metric を各々 $\rho_X(\cdot, \cdot)$, $\rho_Y(\cdot, \cdot)$ とすれば、

For $\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta(\varepsilon) > 0$ such that

$$\rho_Y(g_1, g_2) \leq \delta(\varepsilon) \Rightarrow \rho_X(f_1, f_2) \leq \varepsilon$$

where $Kf_1 = g_1$, $Kf_2 = g_2$, $f_1, f_2 \in X$, $g_1, g_2 \in Y$.

この条件は、線型作用素 K に関し2言えは、

「 K の逆作用素 (Inverse operator) K^{-1} が不連続。」

である事を意味し、これは、「 K^{-1} が非有界。」と同値である。

要条件作用素方程式の性質は、特異関数 (Singular Function) と展開する事により、容易に理解される。今 K の特異関数と ϕ_n, ψ_n に対して対応する特異値と λ_n とすれば、

$$K\psi_n = \lambda_n \phi_n, \text{ かつ } K^* \phi_n = \lambda_n \psi_n, \text{ 或いは}$$

$$KK^* \phi_n = \lambda_n^2 \phi_n, \quad K^* K \psi_n = \lambda_n^2 \psi_n \quad (n=0, 1, \dots)$$

である。今 $X=Y=L_2(a,b)$ とすれば、 ϕ_n, ψ_n は orthonormal system であり $L_2(a,b)$ の basis となる。このとき、

$\lambda_0^2 > \lambda_1^2 > \dots > \lambda_n^2 > \dots \rightarrow 0$ と singular values の列は $n \rightarrow \infty$ で $\lambda_n^2 \rightarrow 0$ に収束する。(Ill-posed problems の上記の性質「 K^{-1} 非有界」は $\lambda_n^2 \rightarrow 0, \text{ as } n \rightarrow \infty$ により特徴づけられる。)

そこで元方程式 $Kf = g$ の解 f は singular functions と singular values を使って表わせば以下の様になる。

$$f = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_i} (g, \phi_i) \psi_i \quad (1)$$

ϕ_i, ψ_i : singular functions $i=1, 2, \dots$

λ_i : singular values $i=1, 2, \dots$

where $\lambda_1^2 > \lambda_2^2 > \dots > \lambda_n^2 > \dots \rightarrow 0$

2. 解 f の存在と一意性.

前節の式から、ただちに次の結果が得られる。

定理 1 (Picard)

前節の線型作用素方程式が解をもつための必要十分条件

は、 (i) $\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_i^2} |(g, \phi_i)|^2 < \infty$

かつ (ii) $g \in R(K)$ なる事である。

一意性に関して、次の事が言える。今 $\{\lambda_i\}$ は 0 に収束し 2 中 ∞ sequence である。今 もし $\lambda_i = 0 \quad i > k$ であるならば、解に一意性はない。よ、2 解が一意的であるためには、 λ_i は limit point であるか 0 となす列をなすわけなければならない。(即ち $\lambda_i \neq 0$)

具体的に悪条件線型作用素方程式の数値的取り扱いを考える時、一つの重要な要素は $\lambda_i \rightarrow 0$ に収束する速さである。

λ の収束の速さにより) 方程式の "conditioning" が支配される。

3. 一般積分方程式の "conditioning".

今、具体的に線型作用素 K と (2) 次を考へる。

$$Kf = \int_a^b k(t,s) f(s) ds \quad (2)$$

この時 方程式 $Kf = g$ は、一般積分方程式 (フレッドホルムタイプ) となる。多くの重要な要素条件問題 (数学的, 物理的諸問題) が、この一般積分方程式に帰着される事が知られてゐる。今 $f, g \in L_2(a,b)$ とし $k(s,t)$ は、 L_2 カルノール $\int_a^b \int_a^b |k(s,t)|^2 dt ds < \infty$ とする。

この時、作用素 K の Singular values の収束に関し、次の定理がある。

定理 2 (H. Weyl)

今、 $k(t,s) = k(s,t)$ とする。(この場合 Singular values は Eigen values に等しい。)

$k(t,s)$ が p 階微分可能かつ p 次導関数が連続、すなわち、

$$\left(\begin{array}{l} \text{i.e.} \\ k(t,s) = k(s,t) \\ \exists \frac{\partial^r k(t,s)}{\partial t^r} \in C^0 \quad \text{for } r=0, \dots, p \end{array} \Rightarrow |\lambda_n| = O(n^{-p-\frac{1}{2}}) \right)$$

すなわち、 $k(s,t) \neq k(t,s)$ の場合に對し、より精密化された

結果とし2次がある。

定理3 (F. Smithies)

$1 < \beta < 2$ とする。ある $p \geq 0$ に対し $k(t, s)$ が、

(i) $k^{(n)}(t, s) \equiv \frac{\partial^n k(t, s)}{\partial t^n}$ が存在し、(ほとんど) すべての s と

$r = 0, \dots, n-1$ に対し、 $k^{(r)}(t, s)$ が 絶対連続 (int),

(ii) $k^{(p)}(t, s) \in L_\beta$ ($p > 0, 1 < \beta < 2$)

(iii) $\int_a^b \left\{ \int_a^b |k^{(p)}(t+\theta, s) - k^{(p)}(t-\theta, s)|^p dt \right\}^{\frac{2}{\beta}} ds \leq A |\theta|^{2\alpha}$ for
some A and all suff. small θ ,

(iv) $p > 0, \alpha > 0$ かつ $p=0, \alpha > \frac{1}{\beta} - \frac{1}{2}$

2つある時、

$$\lambda_n = O(n^{-\alpha-1-p+1/\beta}).$$

定理2, 定理3. の結論は、其に、積分作用素のカーネル $k(s, t)$ が 滑らかであればある程、Singular value の0に収束する速さが増える事を意味する。よく知られた例として、 $k(x, y)$ が、対数特異点を持つ様な場合、積分作用素 K の Singular values は $O(1/n)$ 程度でしか収束しない。二様な場合は、積分の実行は、困難であるが、"conditioning" の点から言えば、右辺関数 f の精度を十分にあれば、ほとんど問題にはならない。これに対し、カーネル $k(x, y)$ が十分滑らか (Analytic) の場合一般に、作用素 K の特異値は 急速に (exponential に) 0に収

束しとゆくと考えられる。この様な場合とは、どんな方法で離散化したをも、直接、離散化された線型方程式を解く事によって満足な解を得る事は出来ない。(n と十分大きくした場合。) 直接法による数値解の求めにくさは、 λ_i および (この問題点を避ける数値解法について後述に体系的に述べる。) 意味のある解が求まるための必要条件は、 (g, ϕ_i) が十分速く収束する事である。ここを言う十分速くの意味は、 λ_i が 0 に収束するよりも速く、という意味である。この条件は、(2) のカーネンが前述した様に、解析的である場合には、 λ_i は 0 に相当速く、指数的に収束する為、 g に対する強い制約となる。しかしながら g がその制約を満たさなければ、意味のある解、増しと数値解は、求める事は出来ない。

‘悪条件問題の解まじくさ’、は、確かに広く知られている様に、系の ‘conditioning’ に依存する。それは、直接法のみを考える時、 $\lambda_i \rightarrow 0$ の収束の速さのみに依存する様に見える。しかし、後述する方法群を用いれば、 $\lambda_i \rightarrow 0$, つまり ‘conditioning’ 自体は、重要な問題とはならぬ。

例えば、次の様な場合を考えなければ、この事は、容易に理解されるであろう。今、カーネンが、解析的であり、 λ_i が指数的に 0 に収束すると仮定する。(実際、問題となるのは、この様な場合である。) つまり、離散化した時の、

線型連立方程式の、いわゆる条件数 (Condition Number) が、指数的に増加しゆく場合である。この場合、直接的な解法による解は、一般に全く信頼できない。ところが、今、 (g, ϕ_i) が、非常に速く収束する、或いは、小エラッタの ϕ_i に対し非零であると仮定しゆ。例えば、 $(g, \phi_i) = 0$ $i \geq k$ としゆ。この時、 ϕ_i が $i \geq k$ に於いて、いくつ速く収束しようとも、単に、解 f 、即ち

$$f = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_i} (g, \phi_i) \phi_i$$

に於いて、 ϕ_i 以後は、強制的に 0 と置く事により、十分満足する解 (従って数値解) を求める事が出来る。

これが、悪条件問題に対する数値解法を考える時、一つの依り所である。以下に、4つの代表的な悪条件問題に対する数値解法を列挙し、上記の視座から、解法間の関係について見てゆき。

3. 悪条件問題に対する数値解法とその解法間の関係

3.a) 最小自乗最小ノルム解 (Minimum Norm Least Squares Solution.)

M.N.L.S.S. と略される。この解を f_a とすれば、

$$f_a = \underset{f}{\operatorname{argmin}} \|Kf - g\|^2$$

とし、(即ち、最小自乗解に一意性がなくその集合を B_a とし

左時。この時 $N(K) \neq \{0\}$, $N(K)$: Null Space of K

$$f_a \leftarrow \min_{f \in B_a} \|f\|^2$$

この場合, Singular values に関し言えば, $\exists k$ s.t. $\lambda_i = 0$ for $i > k$ である事を意味する。 $\lambda_i = 0$ に対する, フーリエ係数 (f, ϕ_i) と $\frac{1}{\lambda_i}$ の積は, 強制的に, 0 と置く。

3.b) Truncated Singular (eigen) Value (T.S.V.)

T.S.V. と以下略す。この解を f_b , とすれば,

$$B_b = \text{Span}(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n)$$

$$f_b \leftarrow \min_{f \in B_b} \|Kf - g\|^2$$

特異関数を表現した場合に於て, 以下の様に表現される。

$$f_b = \sum_{i=1}^n \frac{1}{\lambda_i} (f, \phi_i) \phi_i$$

一般に $\lambda_i \neq 0$ $i > n$ である。微小な λ_i による誤差の増大が誘発される前に, n を Series と打ち切り, 2 (する)。

3.c) Standard Regularization (標準型正則化法)

S. R. と略す事にする。この解を f_c , とすれば,

$$f_c \in \min_f (\|Kf - g\|^2 + \mu \|f\|^2)$$

ここに, μ は Regularization parameter と呼ばれる。

又これは, 方程式

$$K^*Kf + \mu f = K^*g$$

の解, 2 個の解と同等である。 f_c を陽に表わせば,

$$f_c = (K^*K + I\mu)^{-1} K^*g$$

又, 特異値数系によつて表わせば

$$f_c = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\lambda_i}{\lambda_i^2 + \mu} (g, \phi_i) \phi_i \quad \text{となる。}$$

2.d). (Modified) Regularization.

一般に正則化法と言えはこれに指す。M.R. と略す事にし,

その解を f_d とすれば,

$$f_d \in \min_f (\|Kf - g\|^2 + \mu \|\mathcal{L}f\|^2)$$

ここに μ は Regularization Parameter, $\mathcal{L}$ は stabilizer (一般には differential operator) と呼ばれる。 f_d を陽に表わせば,

$$f_d = (K^*K + \mu \mathcal{L}^*\mathcal{L})^{-1} K^*g$$

と表わされる。以下に方法間の関係について述べる。

(1) 3.a) M.N.L.S.S (Minimum Norm Least Squares Solution) と

3.b) T.S.V (Truncated Singular Value) の関係.

3.a) と 3.b) は 形式上は 全く同じに見える. しかし解の意味は厳密に区別されるべきである.

M.N.L.S.S. は $\lambda_i \neq 0$ に対応する特異関数全てを使って解を構成する. T.S.V. は $\lambda_i \neq 0$ に対応する特異関数の一部 (選むおとに存在性が残る.) を使って解を構成する.

つまり M.N.L.S.S. に関しては 構成する特異関数の選むおとに 解は 変化する. T.S.V. に関しては 解は 特異関数の部分空間の選むおとに依存する.

(2) 3.c) Standard Regularization (S.R) と

3.d) Modified Regularization (M.R) の関係.

3.d) の M.R. は 3.c) の S.R の一般化になる. 即ち M.R. には α stabilizer $\alpha = I$ とおけば S.R. と同値となる. 一般に M.R. $\alpha \neq I$ は S.R. $\alpha = I$ の場合へ帰着する事が出来る. 具体的には α が invertible (すなわち α^{-1} 存在) である場合は Cholesky 分解により α が invertible である場合は (すなわち α^{-1} 存在) Q-R 分解により α が invertible である場合は (すなわち α^{-1} 存在) 標準型正規化法 ($\alpha = I$) へ帰着する事が出来る. S.R. M.R. とも 解は Regularization Parameter μ の選むおとに依存する. 3.c) は α Damped Least Squares と呼ばれる事もある.

iii) 3b) T.S.V. と 3c) Regularization の間の関係。

3b) の解 f_b , 3c) の解 f_c と、特異関数系を使つて表わすと、

$$3b) \text{ T.S.V. } \{f_b\}_i = \begin{cases} \frac{1}{\lambda_i} (g, \phi_i) \psi_i & i \leq n \\ 0 & i > n \end{cases}$$

$$3c) \text{ S.R. } \{f_c\}_i = \frac{\lambda_i}{\lambda_i^2 + \mu} (g, \phi_i) \psi_i \quad i=1, 2, \dots$$

となり、どちらも同じ特異関数で解を構成し、同じフーリエ係数 (g, ϕ_i) を用いている。3b) と 3c) の形式上の違いは、必ずしも、最初の Singular value を含む係数が、

$$\text{T.S.V. 2-は } \begin{cases} \frac{1}{\lambda_i} & (i \leq n) \\ 0 & (i > n) \end{cases} \quad \text{S.R. 2-は } \frac{\lambda_i}{\lambda_i^2 + \mu} \quad i=1, 2, \dots$$

となり、2-は所々ある。これを μ の Damping factor と呼ぶことにしよう。

ここで、作用素 K の Singular value が、指数的に 0 に収束（2-の場合、（例えば、1-種積分方程式に於いて、カーネル $k(s, t)$ が、Analytic な場合））には、Regularization parameter μ に、適当な変数変換を行つて、2-をいふ、T.S.V と S.R は、ほぼ同一視できることが出来ることを示す。

まず、Standard Regularization の Damping factor を $d(\mu)$ とおき、
即ち $d(\mu) = \lambda_i / (\lambda_i^2 + \mu)$.

今、 K の singular values λ_i が、指数的に 0 に収束 (24) と仮定する。その連立が、 β^{-i} に比例するとすれば、($\beta \gg 1$)

$\lambda_i = O(\beta^{-i})$ とある。そこで、Regularization parameter μ に対し $\nu = -\log_p \mu$ なる変数変換を行なう。これは、regularization parameter μ を、 λ_i の収束に合わせて、指数的に変化させる事を意味する。つまり $\mu = \beta^{-\nu}$ とある。

そこで $\mu = \beta^{-\nu}$ が $\lambda_m^2 > \mu > \lambda_{m+1}^2$ となる場合と仮定すれば、

$$d_i(\mu) = \frac{\lambda_i}{\lambda_i^2 + \mu} = \frac{1/\lambda_i}{1 + \frac{\mu}{\lambda_i^2}} = \frac{1/\lambda_i}{1 + \frac{\beta^{-\nu}}{\lambda_i^2}}$$

△ $i \leq m$ とすれば、 $\beta^{-\nu} = o(\lambda_i^2)$

つまり、 $d_i(\mu) \approx \frac{1}{\lambda_i}$ for $i \leq m$
(μ の近さは、 β の大きさに依存する。)

さらに $i > m$ とすれば、逆に $\beta^{-\nu} \gg \lambda_i^2$, $i > m$ とあるから $d_i(\mu) \approx 0$ for $i > m$ 。

まとめをすれば、

$$d_i(\mu) \approx \begin{cases} \frac{1}{\lambda_i} & i \leq m \\ 0 & i > m \end{cases}$$

つまり、これは、Truncated Singular Value or Damping factor に一致する。この値何れ、 β が大きければ大きい程、即ち、 λ_i が 0 に収束する速さが、速ければ速い程、強くなる。

さらに, Damping factor α による $R^i(\mu)$ は

$$R^i(\mu) = \frac{\lambda_i}{\lambda_i^2 + \mu} \bigg/ \frac{1}{\lambda_i} \quad (\mu = \beta^{-\nu})$$

$$= \left(1 + \frac{\beta^{-\nu}}{\lambda_i^2}\right)^{-1}$$

$$\begin{aligned} \text{とすれば, } R^i(\mu) &= 1 & \lambda_i^2 \gg \beta^{-\nu} \\ &= 0 & \lambda_i^2 \ll \beta^{-\nu} \end{aligned}$$

となり, λ_i の収束が速い事 (即ち $\beta \gg 1$), $\nu = -\log_{\beta} \mu$ の変数変換を行なう事, $\alpha = 1$ の条件下で Truncated Singular Value のしきい値 τ , (しきい値の意味は, $\lambda_i \geq \tau$ であれば $\frac{1}{\lambda_i}$, $\lambda_i < \tau$ であれば 0 とする判定値) と Regularization parameter μ の間には, $\tau = \sqrt{\mu}$ の関係が成立する事がわかる。

以上により, 既存の数値解法に対し, 一つの統一的な視点が与えられた。これは, 例えば, パラメータ μ を決定する時等に有用である。一つの数値解法で, (今, S.R.Z.) μ の値が決まったとし, その値を μ_{opt} とすれば, 同時に, T.S.V. の最適しきい値 τ_{opt} は $\tau_{\text{opt}} = \sqrt{\mu_{\text{opt}}}$ である事に注意。

References.

- [1] Smithies, F. "The eigenvalues and singular values of integral equations," *Proc. London Math. Soc.*, 43 (1937), PP 255-279.
- [2] Weyl, H. Das asymptotische verteilungsgesetz der eigenwerte linear partieller differentialgleichungen, *Math. Annalen.*, 71 (1912), PP 471-479.
- [3] Invers, B.A. On the numerical solution of Fredholm integral equations of the 1st kind, *JIMA*, 16 (1975), PP 207-220.
- [4] Varah, J.M. On the numerical solution of ill-conditioned linear systems with application to ill-posed problems, *SIAM J. Num. Anal.* Vol. 10, No. 2, April 1973. PP 257-266.
- [5] ——— A practical examination of some numerical methods for linear discrete ill-posed problems, *SIAM Rev.* Vol 21 No. 1 (1979)
- [6] Wahba, G. Practical approximate solutions to linear operator equations when the data are noisy. *SIAM J. Num. Anal.* Vol 14 No. 4 (1977) pp 651-667.
- [7] Hilgers, J.W. On the equivalence of regularization and certain reproducing kernel Hilbert space approaches for solving first kind problems.

SIAM J. Num. Anal., 13, (1976) pp 172-184.

[8] Hanson, R. A numerical method for solving Fredholm integral equations of the first kind using singular values. SIAM J Num. Anal. 8, 1971, pp 616-622.

[9] Tikhonov, A.N. Solutions of ill-posed problems. 1977. V.H. Winston & Sons.