計算工学講演会論文集 Vol. 29 (2024 年 6 月)　日本計算工学会

正則化解に基づく非斉次項復元の試み

Reconstruction of the Non-homogeneous Term Based on the Regularized Solution

繁田 岳美 [1)]
Takemi Shigeta

[1)]博（理） 昭和薬科大学 教授 （〒194–8543 東京都町田市東玉川学園 3 丁目 3165 番地, E-mail: shigeta@ac.shoyaku.ac.jp)

The purpose of this study is to reconstruct an exact non-homogeneous term from a slightly perturbed one in an ill-conditioned system of linear equations. A small perturbation of a non-homogeneous term retains the potential to affect sensitively on the accuracy of a solution. A regularization method can then be applied to the system of linear equations to obtain a regularized solution, which is a sufficiently good approximation of the exact solution to the system of linear equations with the exact non-homogeneous term. Hence, multiplying the regularized solution by the corresponding coefficient matrix leads to the possibility of reconstructing the exact non-homogeneous term. In this study, a coefficient matrix is considered such that the row vectors are approximately linearly dependent. The regularized solution is obtained by using the Tikhonov regularization method with a suitable regularization parameter determined by the L-curve. The proposed method can then reconstruct the non-perturbed non-homogeneous term from the perturbed one. A numerical example shows that the reconstructed non-homogeneous term is in very good agreement with the exact one.

Key Words : *Exact non-homogeneous term, Regularized solution, Tikhonov regularization*

1. 緒言

偏微分方程式の逆問題の一つとして知られている Laplace 方程式の Cauchy 問題 [2] は非適切問題 [3] である．Cauchy データに混入した微小な誤差が解の精度に大きく影響を与える．得られる解は真の解とは大きく異なるため，正則化法を適用する必要が生ずる．一方，誤差を含まない真の Cauchy データに対しては当然真の解が得られる．Cauchy データが誤差を含むか否かを問わず，いずれの場合も正則化解は真の解に対する良い近似となる [4]．したがって，正則化法を適用しない解が正則化解に一致するか否かにより，与えられた Cauchy データが誤差を含むか否かを判定できると考えられる．以下では，この状況を 2 元連立 1 次方程式を例に説明する．

係数行列 A と右辺非斉次項 $\boldsymbol{b}^{(k)}$ をそれぞれ

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 1 & 3.001 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{b}^{(1)} := \begin{pmatrix} 20 \\ 20.001 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}^{(2)} := \begin{pmatrix} 20 \\ 20.004 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}^{(3)} := \begin{pmatrix} 20 \\ 20.006 \end{pmatrix}$$

とおくと，係数行列 A の条件数は $\mathrm{cond}(A) = 20006$ と大きな値をとる．このとき，3 つの連立 1 次方程式

$$A\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{b}^{(k)} \qquad (k = 1, 2, 3) \tag{1}$$

の解 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ はそれぞれ

$$\boldsymbol{x}^{(1)} = \begin{pmatrix} 17 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x}^{(2)} = \begin{pmatrix} 8 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x}^{(3)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \end{pmatrix}$$

と求まる．非斉次項の微小変化に対して，解が大幅に変化していることがわかる．

このとき，正則化法を適用することにより，真の解に対する近似として適切な正則化解を求めることができる．実際，連立 1 次方程式 (1) において，正則化法として打ち切り特異値分解を適用すると，$k = 1, 2, 3$ のいずれの場合においても正則化解はほぼ $(2, 6)^T$ と得られる．この正則化解は $\boldsymbol{x}^{(3)}$ にほぼ等しいことから，誤差を含まない真の非斉次項は $\boldsymbol{b}^{(3)} = (20, 20.006)^T$ であるとみなすことができる [5,6]．このように，正則化解を通して，誤差を含む非斉次項から真の非斉次項を復元することができる．

本論文では，[6] における問題設定の不備を改善し，n 元連立 1 次方程式に対して，Tikhonov の正則化法を用いて，誤差を含む非斉次項から真の非斉次項を復元することを試みる．次章で 2 元連立 1 次方程式における非斉次項の復元を再掲し，これに基づいた自然な拡張により構成した n 元連立 1 次方程式の非斉次項を復元対象とする．

2. 2 元連立 1 次方程式における非斉次項の復元 [5,6]

実定数 a, b と十分小さい定数 $\epsilon > 0$ を与え，対象とする連立 1 次方程式の係数行列 A と非斉次項 $\boldsymbol{b}$ を以下のように定める．

$$A := \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & a+\epsilon \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{b} := \begin{pmatrix} b \\ b+\delta \end{pmatrix}.$$

ここに，実数 δ は摂動パラメータである．このとき，連立 1 次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{2}$$

の解は

$$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\delta}{\epsilon}\begin{pmatrix} -a \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

© 一般社団法人日本計算工学会

であり，δ の値の変化に応じて，解 $\boldsymbol{x}$ が大幅に変化することがわかる．

連立 1 次方程式 (2) の打ち切り特異値分解による正則化解は

$$\boldsymbol{x}_{\mathrm{reg}} = \frac{b}{a^2+1}\begin{pmatrix}1\\a\end{pmatrix} \tag{4}$$

と求められる．2 つの解 (3) と (4) を等しいとして δ について解くと，連立 1 次方程式 (2) の解 (3) が正則化解 (4) に一致するのは

$$\delta = \frac{\epsilon ab}{a^2+1} \tag{5}$$

のときとなる．(5) を $\boldsymbol{b} = (b, b+\delta)^T$ に代入することで，真の非斉次項を得る．

一方，正則化解 (4) は連立 1 次方程式 (2) の第 1 行の方程式

$$x_1 + ax_2 = b$$

の最小ノルム解に一致することを確認できる．

3. n 元連立 1 次方程式の構成

前章に基づき，以下のように係数行列と非斉次項を構成する．

まず，n 次元列ベクトルを

$$\boldsymbol{a}_1 := (1, 2, \ldots, n)^T$$

のように適当に与える（各成分の値に特に意味はない）．ベクトル $\boldsymbol{a}_1$ に対して，

$$\boldsymbol{a}_j := \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{r}_j \qquad (j = 2, 3, \ldots, n)$$

と定める．ここに，与えられた十分小さい $\epsilon > 0$ に対して，$\boldsymbol{r}_j$ の各成分は開区間 $(-\epsilon, \epsilon)$ の一様乱数とする．このとき，係数行列を

$$A := (\boldsymbol{a}_1\ \boldsymbol{a}_2\ \cdots\ \boldsymbol{a}_n)^T$$

で定めると，列ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ は明らかにほぼ線形従属であるため，A の条件数は大きくなる．

次に，与えられた実数 $b_1 \neq 0$ に対して，方程式

$$\boldsymbol{a}_1^T \boldsymbol{x} = b_1$$

の最小ノルム解を

$$\boldsymbol{x}_{\min} = \frac{b\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|^2} \tag{6}$$

と求める．ここに，$\|\cdot\|$ は 2 ノルムを表す．最小ノルム解 (6) が連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解となるよう，真の非斉次項を

$$\boldsymbol{b} := A\boldsymbol{x}_{\min}$$

として定める．

以上のように構成した n 元連立 1 次方程式は，前章で取り上げた 2 元連立 1 次方程式の自然な拡張になっていると考えられる．

4. 真の非斉次項の復元

前章より，真の非斉次項をもつ悪条件連立 1 次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{7}$$

の真の解は

$$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{x}_{\min} \tag{8}$$

である．

誤差が混入した非斉次項 $\boldsymbol{b}^\delta$ を真の非斉次項 $\boldsymbol{b}$ と誤差項 $\Delta\boldsymbol{b}$ との和で表す:

$$\boldsymbol{b}^\delta := \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}.$$

ここに，与えられた十分小さい $\delta > 0$ に対して，誤差項 $\Delta\boldsymbol{b}$ の各成分は開区間 $(-\delta, \delta)$ の一様乱数とする．

以上より，誤差が混入した非斉次項をもつ悪条件連立 1 次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^\delta \tag{9}$$

の $\boldsymbol{b}^\delta$ から (7) の $\boldsymbol{b}$ を復元することを目的とする．

いま，cond(A) は非常に大きいため，(9) の解

$$\boldsymbol{x}^\delta = A^{-1}\boldsymbol{b}^\delta$$

は (7) の解 (8) と大きく異なる可能性がある．そこで，(9) に Tikhonov の正則化を適用する．すなわち，次式を満たす $\boldsymbol{x}_\alpha^\delta$ を求める:

$$J_\alpha^\delta(\boldsymbol{x}_\alpha^\delta) := \min_{\boldsymbol{x}} J_\alpha^\delta(\boldsymbol{x}).$$

ここに，目的関数 J_α^δ は

$$J_\alpha^\delta(\boldsymbol{x}) := \|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^\delta\|^2 + \alpha^2\|\boldsymbol{x}\|^2$$

で定義され，$\alpha > 0$ は正則化パラメータである．このとき，I を n 次単位行列とすると，

$$\boldsymbol{x}_\alpha^\delta = (A^TA + \alpha^2 I)^{-1}A^T\boldsymbol{b}^\delta \tag{10}$$

と表すことができる．(10) は適切な α を選ぶことで，真の解 (8) を良好に近似できる正則化解である．

ここで，真の非斉次項を求めるために，真の解 (8) と正則化解 (10) が等しくなると仮定すると，

$$(A^TA + \alpha^2 I)^{-1}A^T\boldsymbol{b}^\delta = A^{-1}\boldsymbol{b}$$

を満たす $\boldsymbol{b}$ が復元された非斉次項であると考えられる．この $\boldsymbol{b}$ を $\boldsymbol{b}^r$ と表すと，

$$\boldsymbol{b}^r = R_\alpha \boldsymbol{b}^\delta$$

が得られる．ここに，

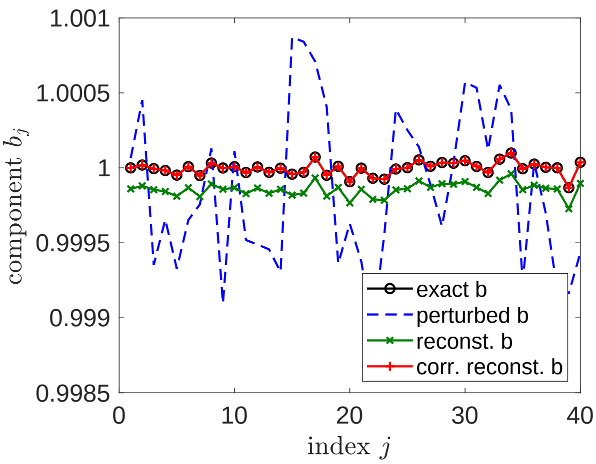
$$R_\alpha := A(A^TA + \alpha^2 I)^{-1}A^T$$

は誤差を含む非斉次項から誤差を取り除いて真の非斉次項を復元する行列を意味する．復元された $\boldsymbol{b}^r$ は正則化パラメータ α と摂動パラメータ δ に依存する．

© 一般社団法人日本計算工学会

5. 数値計算例

数値計算例として，$n = 40, \epsilon = 10^{-2}, \delta = 10^{-3}, b = 1$ と仮定する．このとき，図 1 に真の非斉次項 $\boldsymbol{b}$，誤差が混入した非斉次項 $\boldsymbol{b}^\delta$，復元された非斉次項 $\boldsymbol{b}^r$ の各成分をそれぞれ黒，青，緑の線により示す．非斉次項を復元する際に用いる正則化パラメータとして，L-curve 法 [1] により決定された $\alpha = 1.3016$ を用いる．誤差 $\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}^\delta\| = 3.3 \times 10^{-3}$ に対し，$\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}^r\| = 8.9 \times 10^{-4}$ であるので，復元された $\boldsymbol{b}^r$ は誤差が混入した $\boldsymbol{b}^\delta$ よりも真の $\boldsymbol{b}$ に近いことがわかる．



図–1 非斉次項の比較

さらに興味深いことに，復元された $\boldsymbol{b}^r$ は真の $\boldsymbol{b}$ からわずかにずれているものの，$\boldsymbol{b}^r$ と $\boldsymbol{b}$ の成分の挙動はほぼ同じであることを図 1 から確認できる．そこで，先見情報として，真の $\boldsymbol{b}$ の第 1 成分 b_1 が既知であると仮定する．このとき，復元された $\boldsymbol{b}^r$ の第 1 成分 b_1^r と b_1 の差 $b_1 - b_1^r$ を用いて，$\boldsymbol{b}^r$ を

$$\widetilde{\boldsymbol{b}}^r := \boldsymbol{b}^r + (b_1 - b_1^r)\mathbf{1}$$

と補正する．ここに，$\mathbf{1} = (1, 1, \ldots, 1)^T$ である．この結果，$\|\boldsymbol{b} - \widetilde{\boldsymbol{b}}^r\| = 4.7 \times 10^{-6}$ となり，復元された非斉次項の精度が大幅に改善できたことがわかる．実際，図 1 の赤線が $\widetilde{\boldsymbol{b}}^r$ の各成分を示すが，$\widetilde{\boldsymbol{b}}^r$ は $\boldsymbol{b}$ にほぼ一致していることを確認できる．

6. 結論

本論文では悪条件連立 1 次方程式の正則化解を用いて，誤差が混入した非斉次項から真の非斉次項を復元することを試みた．非斉次項は観測値由来のことが少なくない．したがって，本論文で提案した手法により，観測値から真の値を数値計算により復元できる可能性が期待される．

今後の課題は，より一般的な係数行列に対して真の非斉次項を定義し，本手法を発展させることである．

参考文献

[1] Hansen, P. C.: Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve, SIAM Review, 34 (4), 1992, pp. 561–580.

[2] Isakov, V.: Inverse Problems for Partial Differential Equations, Springer (2006).

[3] Kress, R.: Linear Integral Equations, Springer-Verlag (1989).

[4] Shigeta, T. and Young, D. L.: Method of fundamental solutions with optimal regularization techniques for the Cauchy problem of the Laplace equation with singular points, Journal of Computational Physics, 228 (6), 2009, pp 1903–1915.

[5] Shigeta, T.: Ill-conditioned simultaneous linear equations to which the regularized solution almost coincides with the exact one, 昭和薬科大学紀要, 52, 2018, pp. 1–9.

[6] 繁田岳美: 打ち切り特異値分解による連立 1 次方程式の非斉次項の復元, 計算数理工学論文集, 17, 2017, pp. 43–46.

© 一般社団法人日本計算工学会