正線形逆問題の解法

01701460 福岡大学 米田 清 YONEDA Kiyoshi

1. はじめに

線形逆問題において原因と結果がともに正の値をとる場合の解法を提案する.

2. 線形逆問題

原因xが機序fを通じて結果yを生む因果関係を写像$f: x \mapsto y$として表現する. 機序を仮定した上で結果を与えて原因を求めるのが逆問題である.

機序が線形の場合が線形逆問題で, fを行列 $F := [f_{ij}]$で表現して$Fx = y$を解く.

この方程式は通常, 矛盾を含んでいて線形代数の意味では解がない. そこでMoore-Penrose の一般化逆行列F^+によって最小２乗最短解$\hat{x} := F^+ y$を求める.

すると, yを僅かに変えると解$\hat{x}$が極端に変わってしまう, 不安定性, 不適切性, 多重共線性などとよばれる問題が起きることがある. そこでF^+の階数を何らかの方法で落とす. これは正規方程式$F'Fx = F'y$の$F'F$を逆行列があるように加工することに対応するので, 正則化と言う. F^+の計算には特異値分解を使うので計算量が大きい. そこで計算量の小さい正則化法が工夫されている[1].

3. 最適化による解法

一方, 計量経済学では Golan-Judge-Miller (GJM) の方法[2]が成功している. その方法は一般線形構造から情報量を用いた目的関数を作り, それを最適化するようにxとyを決める. 情報量の使用が目を引く. しかし成功の原因はむしろ最適化に定式化したことにあるように思う.

pをxの先験的な値とし, $\rho(x, p)$で両者間の違さを座標毎に計る. qを観測値として$\rho(y, q)$も同様. GJMではa, bを重みとして

$K(x) := a'\rho(x, p) + b'\rho(y, q)$,

$\hat{x} := \arg\min_x \{K(x) \mid Fx = y\}$とする.

Kの第2項は観測値に対するあてはまりの良さで, 最小2乗法と同様の思想である. 第1項は先験情報に対するあてはまりの良さで, 一般化逆行列F^+と同様の思想である. 不安定性は$K(x)$最小化にもとづくモデル選択で処理する.

4. 最小2乗法

これがGJMの要点なら, ρは2乗距離でも良かろう. $0 < u, v$をそれぞれx, pとy, qの計測単位としてp, q, u, v, a, bを外部的に与え,

$\rho(x, p, u) := \left[\cdots \left\{(x_j - p_j)/u_j\right\}^2 \cdots\right]'$とすれば

$$\frac{\partial K}{\partial x_j} = \frac{2a_j}{u_j^2}(x_j - p_j) + \sum_i \frac{2b_i f_{ij}}{v_i^2}\left(\sum_k f_{ik} x_k - q_i\right)$$

で, $\nabla K = 0$が正規方程式. Hessianは

$F' \operatorname{diag}(2b_i / v_i^2)\, F$.

5. 正線形逆問題

原因と結果が正値$0 < x, y$をとる場合を正線形逆問題とよぼう. 非負の逆問題は社会現象の扱いによく現れ, 0を個別に処理すれば正逆問題になる. 線形逆問題でρを以下のようにとれば無制約の最適化で正条件を満たせる.

6. 評価関数

$0 < x, p$ のとき, xとpの違さを図1のように面積$(x - p)(\log x - \log p)$で測りたい. これは

$0 \approx x < p$のときは桁数の差

$\log x - \log p$, $p < x \approx \infty$のときは差

$x - p$, $x \approx p$のときは両者の積$(x - p)\log(x/p)$によってxとpの違さを測ろうというものである. すなわちxが小さければ比を問題にし, 大きければ差を問題にする. この量の単位uはxとpの共通単位なので, uで割って無単位化し,

$J(x, p, u) := \{(x - p)/u\}\log(x/p)$, $0 < x, p, u$

でxとpの違さを計量する. この関数はxとpに関して対称$J(x, p, u) = J(p, x, u)$. $J(x, p, u)$は図２のような凸関数で最小値が$J(p, p, u) = 0$で

$J(0, p, u) = \infty$, そしてxが大きいとき

$J(x, p, u) \approx x \log x$.

誤差をξとして加法構造に従う観測値$p = x + \xi$から, 未知母数xをJの最小化によって推定することを考える. $J(x, x + \xi, u) \approx \xi^2 / ux$から, これは最小2乗法において$x$の推定値が0から離れるように$1/ux$で重み付けしたものに近い.

J最小の条件$dJ(x, p, u)/dx = 0$は

$\log(x/p) = (p - x)/x$に同値である. 一方

$\log(x/p) \approx (x - p)/p$なので, J最小の条件は2種

の相対誤差が等しい$(x-p)/p=(p-x)/x$という意味でもある．

損失Jの最小化は図3に示す充足e^{-J}の最大化に同値である．充足の面積を1に正規化して得られる確率密度分布は指数型分布族に属し，p,uはそれぞれ位置，尺度母数である．つまり最尤法が効く．

7．最適化問題

$0<p,q,u,v,a,b$を外部的に与え，対角行列を

$\mathrm{diag}\,\bullet$，$x/p:=[\cdots x/p\cdots]'$，

$\log\bullet:=[\cdots\log\bullet\cdots]'$ 等と書くと

$$K(x):=(x-p)'\,\mathrm{diag}(a/u)\log(x/p)+$$
$$(Fx-q)'\,\mathrm{diag}(b/v)\log(Fx/q)$$

はJeffrey' divergenceの各項に重みa/u, b/vをかけたものである．$\hat{x}:=\arg\min_x\{K(x)\mid Fx=y\}$.

8．解法

$K(x)$は凸でgradientとHessianはそれぞれ

$$G(x):=\left[\cdots a_j\left\{\log(x_j/p_j)-(p_j-x_j)/x_j\right\}\cdots\right]'+$$
$$F'\left[\cdots b_i\left\{\log([Fx]_i/q_i)-(q_i-[Fx]_i)/[Fx]_i\right\}\cdots\right]'$$
$$H(x):=F'\,\mathrm{diag}\left(\frac{b_i}{v_i}\cdot\frac{[Fx]_i+q_i}{[Fx]_i^2}\right)F$$

で，Newton 法が使える．τ_a, τ_rをそれぞれ絶対および相対誤差の上限とし，

$\varepsilon_0:=\|G(x)\|$

while $\tau_a+\tau_r\varepsilon_0<\|G(x)\|$ **do**

$H(x)=:LL'$ (Cholesky分解)

$x:=x-(L^{-1})'L^{-1}G(x)$

end_while

9．おわりに

正線形逆問題の解法を提案した．無制約の最適化に定式化され，Newton 法が使えるので，2次収束が保証される．発表では例題を示し，周辺領域との関連を論じる．

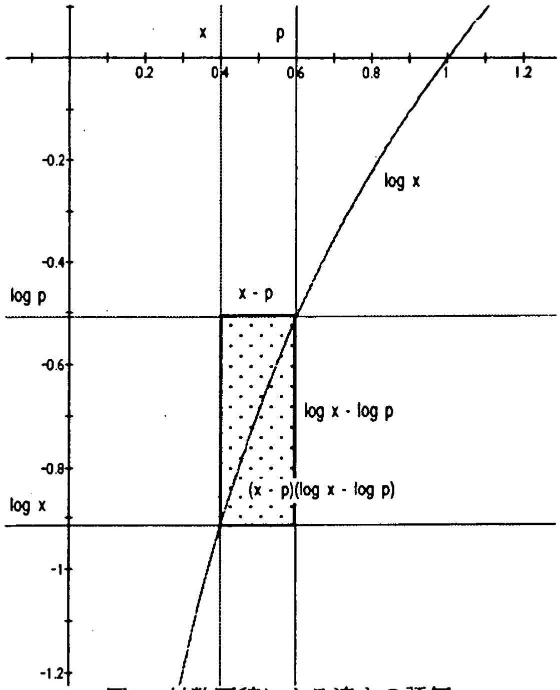

図1　対数面積による遠さの評価

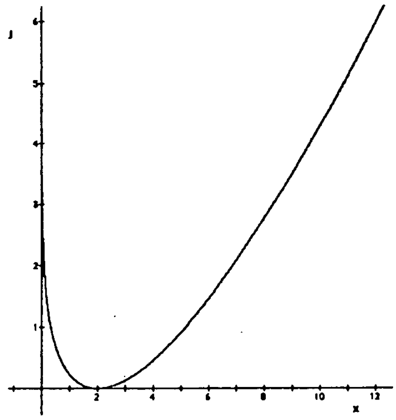

図2　$J(x,2,1)$

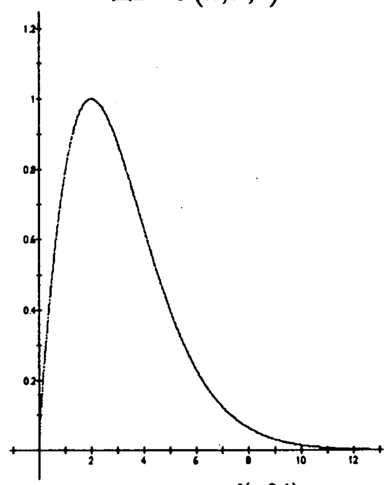

図3　充足$e^{-J(x,2,1)}$

文献

[1] S. L. Campbell and C. D. Meyer, Jr. Generalized Inverses of Linear Transformations. Dover, 1979.

[2] A. Golan, G. Judge, and D. Miller. Maximum Entropy Econometrics. Wiley, 1996.