数理解析研究所講究録
第37巻 1968年 127-140

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^n, R^m $(m \geqq n)$ 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 $\mathrm{grad}\, S(x) = 0$ 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 $g(x) = \mathrm{grad}\, S(x)$ 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 $x^{(0)}$ を $\bar{x}$ の十分近くに選んだとき Newton 法によって定まる点列 $\{x^{(s)}\}$ は $\rho^{(s)} = x^{(s)} - \bar{x}$ の2乗の 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 $\bar{x}$ よりやゝ離れている場合には Newton 法で決まる $\{x^{(s)}\}$ は発散し, Newton 法は役立たない。そこで収束の速さは少々

犠牲にしても，$\{x^{(\nu)}\}$が收束するための初期値の範囲が広く選ばれる Algorithm はまた意味があるという立場から Jacobi の Algorithm を設定した。そこでは[1] $f(x) \in C^3(D)$ の仮定のもとにこの Algorithm によつてきまる $\{x^{(\nu)}\}$ について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，殆ど同様な結果が成立つことを示す。

§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。$A(x)$ の階数が n ならば

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

を最小にする $h = \bar{h}$ は

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

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

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

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

(1) 例えば [2].

xは一応固定されたベクトルとする。絶対値の十分小さいhに対して

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

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

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

である。x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

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

であることゝ，$S(x^{(0)}, h) = |f(x^{(0)}) + A(x^{(0)})h|^2$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。いゝ換えれば$x = x^{(0)} + h^{(0)}$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。

帰納法により点列$\{x^{(s)}\}$, $\{h^{(s)}\}$が得られる。この点列の求め方をalgorithmの形に書けば次のようになる。

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

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

により $h^{(s)}$ をきめる。 $x^{(s+1)} = x^{(s)} + h^{(s)}$ 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 $C(x)$ を

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

によって定義する。こゝでわれわれの問題の仮定をのべる。

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

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

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

とおく。 R^n の領域 D において

(A1)．　$f(x) \in C^2(D)$,

(A2)　$\mathrm{grad}\, S(x) = 0$ をみたす $x = \bar{x}$ が D の中に存在する。

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

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妥当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 に対して，$\bar{x}$ の適当な閉近傍 V_δ を D の中にとれば

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

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をあらわす。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 を適当に選べば

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

(A3)，補助定理2，$C(x)$ の要素が D で連続ということを用いれば証明される。 ただし補助定理3の δ は補助定理2の δ と一般に異なる。

補助定理4. “任意の正数 ε に対して，$\bar{x}$ の δ_1 閉近傍 V_1 をとれば，$x^{(0)} \in V_1$ を満たす任意の $x^{(0)}$ に対して (2.2) の解

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

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

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

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

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

従って　$|h^{(0)}| \leqq |A(x^{(0)})f(x^{(0)})| / \mu \leqq \varepsilon$.（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）のもとに $0 \leqq \lambda \leqq 1$ の任意の λ に対して

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

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

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

さて $\min_H (B_\lambda(\bar{x})h, h) = (B_\lambda(\bar{x})\hat{h}, \hat{h})$ を満たす $\hat{h} \in H$ が存在する。従って

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

(証明終)

§4. Main Theorem.

定理を述べる前にそこで用いられる記号について述べる。

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

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

こゝに 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) $\operatorname{grad} S(x) = 0$ を満たす $x = \bar{x}$ が D の中に存在する。

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

(A 1), (A 2), (A 3) の仮定のもとに，適当な正数 δ_0 を選べば $|x^{(0)}-\bar{x}|\leqq\delta_0$ を満たす $x^{(0)}$ と Jacobi の algorithm (1.2) によってきまる点列 $\{x^{(s)}\}$ および $\{h^{(s)}\}$ に対して (I), (II), (III) および (IV) が成立つ．

(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) $$|x^{(s+1)}-\bar{x}|\leqq K|x^{(s)}-\bar{x}| \qquad (s=0,1,2,\cdots),$$

(III) $$|h^{(s+1)}|\leqq K|h^{(s)}| \qquad (s=0,1,2,\cdots),$$

(IV) $$S(x^{(s+1)})\leqq S(x^{(s)}) \qquad (s=0,1,2,\cdots).''$$

(I) の証明．$\operatorname{grad} S(\bar{x})=0$ であるから，補助定理5の直接の結果である。すなわち補助定理5で $\lambda=0$ とすればよい。

(II) の証明．$\rho^{(s)}=x^{(s)}-\bar{x}$ $(s=0,1,2,\cdots)$ とおく。
$h^{(s)}=x^{(s+1)}-x^{(s)}=\rho^{(s+1)}-\rho^{(s)}$ であるから，これを (2.2) に代入すると．

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

をうる．

(4. 2) $$g(\rho^{(s)})=(A^*(x^{(s)})A(x^{(s)})+C(\bar{x}))\rho^{(s)}-A^*(x^{(s)})f(x^{(s)})$$

とおき，これを成分について計算すれば

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

$$= \sum_{i,k} \left\{ \left(\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_j} + \sum_{p=1}^{n} \frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+\theta_j \rho^{(s)})}{\partial x_j \partial x_p} \rho_p^{(s)} \right) \cdot \right.$$

$$\cdot \left(\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_k} + \sum_{p=1}^{n} \frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+\theta_k \rho^{(s)})}{\partial x_k \partial x_p} \rho_p^{(s)} \right) +$$

$$\left. + f_i(\bar{x}) \frac{\partial^2 f_i(\bar{x})}{\partial x_j \partial x_k} \right\} \rho_k^{(s)}$$

$$- \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_j} + \sum_{p=1}^{n} \frac{\partial^2 f_i(\bar{x}+\theta_j \rho^{(s)})}{\partial x_j \partial x_p} \rho_p^{(s)} \right)$$

$$\cdot \left(f_i(\bar{x}) + \sum_{p=1}^{n} \frac{\partial f_i(\bar{x})}{\partial x_p} h_p^{(s)} + \cdots \right)$$

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

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

すなわち $\cdots$ は $\rho^{(s)}$ 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 $|x^{(s)}-\bar{x}| = |\rho^{(s)}| \leq \delta_0$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

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

が成り立つ. (4.1), (4.2) より

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

この両辺と $\rho^{(s+1)}$ との内積をとると

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

ところが $M(x) = \min_H |A(x)h|^2$ であるから

$$M(x^{(s)})\,|p^{(s+1)}|^2 \le |A(x^{(s)})\,p^{(s+1)}|^2$$
$$\le \|C(\bar{x})\|\,|p^{(s)}|\,|p^{(s+1)}| + |g(p^{(s)})|\,|p^{(s+1)}|$$

従って $|x^{(s)}-\bar{x}|\le\delta_0$ の任意の $x^{(s)}$ に対して

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

従って $|p^{(s+1)}|\le K\,|p^{(s)}|$ をうる。よって初期値 $x^{(0)}$ を δ_0 の範囲に選べば $|p^{(1)}|\le K\,|p^{(0)}|$。従って $x^{(1)}$ は $|x^{(1)}-\bar{x}|\le\delta_0$ の範囲にあり、帰納法を用いて

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

こゝに K は $K=(\max_{V}\|C(x)\|+\mu)/M<1$.

（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。まず $|h^{(s)}|$, $|h^{(s+1)}|$ の間の不等式を導く。(2.2) より

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

さて

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

とおき、この各成分について計算すれば

$$G_j(x^{(s)}, h^{(s)}) = \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f_i(x^{(s+1)})}{\partial x_j} f_i(x^{(s+1)}) - \sum_{i,k} f(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_k^{(s)}$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)} + \theta_j h^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_k^{(s)} \right)$$

$$\cdot \left(f_i(x^{(s)}) + \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f_i(x^{(s)})}{\partial x_k} h_k^{(s)} + \cdots \right)$$

$$- \sum_{i,k} f(x^{(s)}) \frac{\partial^2 f_i(x^{(s)})}{\partial x_j \partial x_k} h_k^{(s)}$$

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

よって補助定理3を満たす μ に対して適当に正数 $\delta_1\ (\leq \delta)$ と α を選べば

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

のすべての $(x^{(s)}, h^{(s)})$ に対して

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

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

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

とかれる。仮定より $h^{(s+1)} \neq 0$ であるから $h^{(s+1)}$ と (4.5) との内積を考えれば (II) の場合と同様にして

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

が成立つ。これが $|h^{(s)}|, |h^{(s+1)}|$ の間の不等式関係である。つぎに $\{h^{(s)}\}$ が $|h^{(s)}|$ の意味で単調減少で 0 に近づくことを示すた

め帰納法を用いる．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 $x^{(0)}$ に対して

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

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

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

とおくとき，補助定理3より $K < 1$，従って

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

よって $|h^{(1)}| \leq \alpha$　帰納法により

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

（証明終）

(iv) の証明．　$S(x^{(s+1)}) - S(x^{(s)})$

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

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

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

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

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

ところが，補助定理3のμに対して適当にαを選べば

$|x^{(s)}-\bar{x}|\leqq\delta,\quad |h^{(s)}|\leqq\alpha$ に対して

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

が成りたつ．よって補助定理4より適当な正数δ_3を選べば

$|x^{(0)}-\bar{x}|\leqq\delta_3$ の任意の $x^{(0)}$ に対して $|h^{(0)}|\leqq\alpha$ が成りたつ．

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

$$|x^{(s)}-\bar{x}|\leqq\delta_3,\quad |h^{(s)}|\leqq\alpha\qquad(s=0,1,2,\cdots)$$

が成りたつ．

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

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を用いて

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

が証明される。よって

$$\mathcal{S}(x^{(s+1)})\leqq\mathcal{S}(x^{(s)})\qquad(s=0,1,2,\cdots)$$

（証明終）

文献

[I] 田中専一郎　数値解法における二三の問題, 流体力学と数値計算シンポジウム報告 (京大数研講究録)

[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報告 (京大数研講究録)