数値計算

大阪大学基礎工学部

永原正章

2011年7月26日(6限)

多項式補間・最小2乗法・正則化法

データ$(x_1, y_1), \ldots, (x_N, y_N)$が与えられたとき, このデータ点のなるべく近くを通る多項式曲線

$$y = f_M(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \cdots + c_M x^M$$

を求めよ(係数ベクトル$c = [c_0, c_1, \ldots, c_M]^\top$を求めよ).

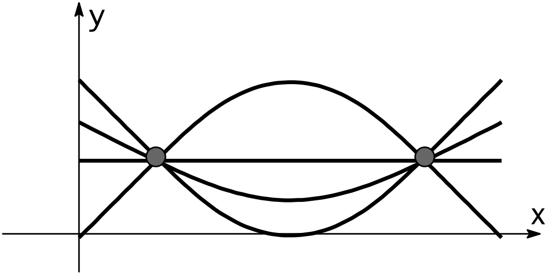
- 多項式補間: $M = N - 1$とし, $c = \Phi^{-1} y$
- 最小2乗法: $M < N - 1$とし, $c = (\Phi^\top \Phi)^{-1} \Phi^\top y$
- 正則化法: $M = N - 1$とし, $c = (\lambda I + \Phi^\top \Phi)^{-1} \Phi^\top y$

$\mathsf{M} \geq \mathsf{N} - 1$のとき

- 例えば「もとの多項式の次数は高々100次以下」という情報が得られたとする
- これまでの方法を使うなら,データは$\mathsf{N} = 101$個 (以上) 必要
  - $\mathsf{M} \leq \mathsf{N} - 1$ の場合のみを考えていたので
- データを101個も取ってくるのは大変
- データが10個程度でも ($\mathsf{M} > \mathsf{N} - 1$ の場合でも) 多項式を推定したい

$M \geq N - 1$のとき

- $M > N - 1$のとき



- N点を通るM次曲線は無数に存在する.$(N = 2, M = 2)$

$M \geq N - 1$のとき

- 補間多項式の係数 $c = [c_0, c_1, \ldots, c_M]$を求める方程式

$$y = \Phi c, \quad \Phi \in \mathbb{R}^{N \times (M+1)}$$

- Φ は横長の行列 $\Rightarrow$ 解は無数にある
- 無数にある解のうち,最も長さが小さいものを選ぶ

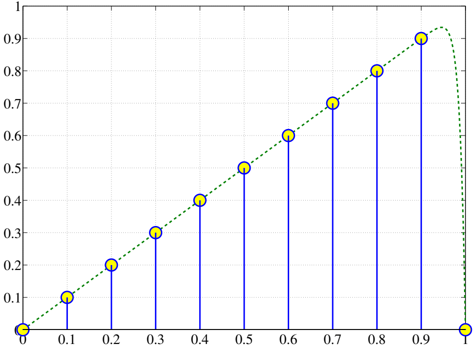
$$(P_2) \quad \min_{c} \|c\|_2 \text{ subject to } y = \Phi c$$

- これを最小ノルム解と呼び,以下で与えられる.

$$c^\star = \Phi^\top (\Phi \Phi^\top)^{-1} y$$

$M \geq N - 1$のとき

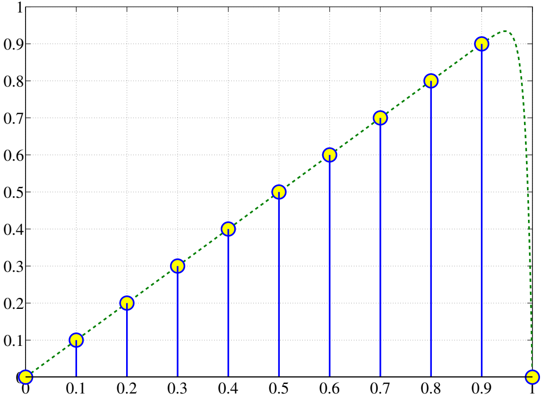
次のようなデータを考える.



$$y = -x^{80} + x$$

$M \geq N - 1$のとき

- $y = -x^{80} + x$ を 11点から推定したい
- 多項式の係数のほとんどは0 (スパース)



スパースな多項式

- 多項式

$$y = f_M(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \cdots + c_M x^M$$

の係数c_jのほとんどが0であるとき,この多項式はスパースであるという.

- ベクトル $c = [c_0, c_1, \ldots, c_M]^\top$ に対して

$$\|c\|_0 := 0\text{でない係数の数}$$

と定義する.

- スパースなベクトル c とは $\|c\|_0$ の値がMにくらべて十分小さいベクトルのことである.

スパースな多項式による補間

- 補間条件

$$E = \sum_{n=1}^{N} |y_n - f_M(x_n)|^2 = (y - \Phi c)^\top (y - \Phi c) = 0$$

すなわち,$y - \Phi c = 0$.

  - $M > N - 1$ であるから,行列$\Phi \in \mathbb{R}^{N\times(M+1)}$ は横長の行列.
  - 方程式 $y - \Phi c = 0$ を満たすcは無数に存在する.

- 次の最適化問題を解く

$$(P_0) \quad \min_c \|c\|_0 \ \text{subject to} \ y - \Phi c = 0$$

  - すなわち,無数に存在する補間多項式の中で,最もスパースなものを求める.
  - 真の解c^*が $\|c^*\|_0 < N$ を満たせば,ほとんどすべてのΦに対して, (P_0) の最適解は真の解 c^* に一致することが知られている.

ℓ^0最適化問題

- 最適化問題

$$(P_0) \quad \min_{c} \|c\|_0 \ \text{subject to} \ y - \Phi c = 0$$

をℓ^0最適化問題と呼ぶ.

- 最も単純な方法
  1. まず,$c = 0$が解であるかどうかを調べる.解であれば終了.そうでなければ,[2]へ進む.
  2. $i = 1$とおく.
  3. $\|c\|_0 = i$ の$\binom{M+1}{i}$種類のベクトルに対して,$\|y - \Phi c\|_2$ を最小化するベクトルを求める.
  4. 上の中で$\|y - \Phi c\|_2 = 0$となるものがあれば終了.そうでなければ,iを一つ増やして[3]へ戻る.

ℓ^1緩和

- 単純な方法の問題点:Mが大きくなるに従って,計算量は指数関数的に増大する.(難しい問題)
- 新しいアイデア:簡単な問題で難しい問題を近似する

$$(\mathrm{P}_1) \quad \min_{c} \|c\|_1 \ \text{ subject to } \ y - \Phi c = 0$$

ただし,

$$\|c\|_1 := \sum_{i=0}^{M} |c_i|$$

- これをℓ^1緩和と呼ぶ (0を1に変えただけ).これは線形計画法であるので,簡単に解ける.

ℓ^1緩和

- 最適化問題

$$(P_1) \quad \min_{c} \|c\|_1 \ \text{subject to} \ y - \Phi c = 0$$

- 補助変数 $t = [t_0, t_1, \ldots, t_M]^\top$ を導入することにより,

$$\min \sum_{i=0}^{M} t_i \ \text{subject to} \ -t \le c \le t, \ \ y - \Phi c = 0$$

と書き換えられる(線形計画問題).

- 線形計画問題はシンプレックス法や内点法により,効率よく解くことができる.
- 問題は,(P_1) の解が (P_0) の解と一致するのか?ということ.

(P_0)と(P_1)の解について

$\Phi \in \mathbb{R}^{N \times L}$, $L = M + 1$, $L > N$ (横長)とする.次の二つの最適化解は一致するか?

$$(P_0) \quad \min_c \|c\|_0 \ \text{ subject to } \ y - \Phi c = 0$$
$$(P_1) \quad \min_c \|c\|_1 \ \text{ subject to } \ y - \Phi c = 0$$

- 制限等長性 (restricted isometry property, RIP):
  $1 \le k \le N$ に対して,行列Φの等長性定数δ_k を, 不等式
  $$(1 - \delta)\|c\|_2^2 \le \|\Phi c\|_2^2 \le (1 + \delta)\|x\|_2^2$$
  が任意のk-スパースなベクトル$c \in \mathbb{R}^L$ に対して成り立つような最小のδ
  - k-スパースなベクトルc とは,$\|c\|_0 = k$ が成り立つベクトルのことである.

(P_0)と(P_1)の解について

$$(\mathrm{P}_0) \quad \min_{c} \|c\|_0 \ \text{subject to}\ y - \Phi c = 0$$

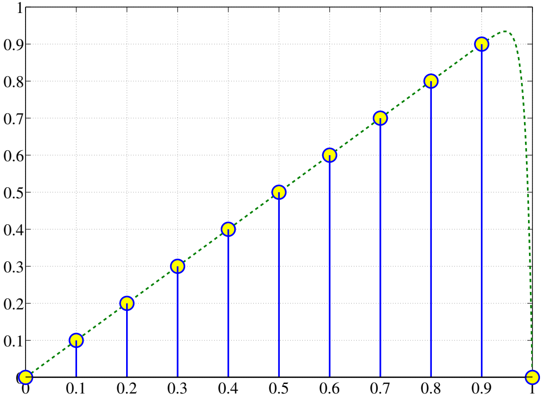
$$(\mathrm{P}_1) \quad \min_{c} \|c\|_1 \ \text{subject to}\ y - \Phi c = 0$$

行列 Φ に対して,$\delta_{2k} < \sqrt{2} - 1$ が成り立つようなk ≥ 1が存在すると仮定する. このとき,(P_0)の解$c_0 \in \mathbb{R}^L$が$\|c\|_0 \leq k$ を満たすなら, (P_0)の解と(P_1)の解は一致する.

- δ_{2k} の値を知ることは,(P_0) と解くのと同じ程度に難しい.
- 不等式 $\delta_{2k} < \sqrt{2} - 1$ が成り立つようにうまくΦを選ぶ(補間点を選ぶ)方法はいろいろ提案されている
- 実際のところは,「やってみてうまくいけばラッキー」という程度(まだまだ知られていないことが多い)

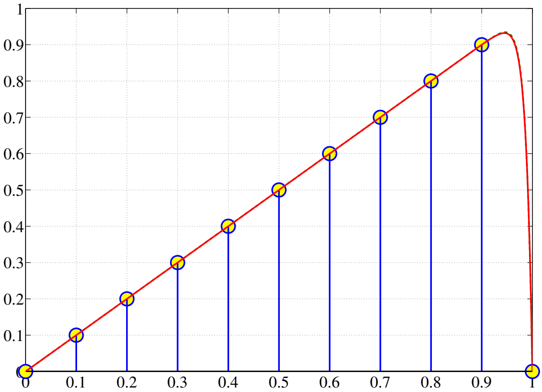
例題

- $y = -x^{80} + x$



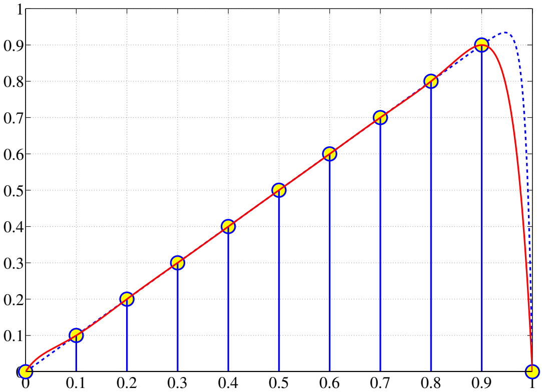
ℓ^1最適化による補間

- ほとんど一致！



10次多項式による補間

- **0.9 ∼ 1の範囲であまり一致せず**



練習問題

1. 授業の感想・要望などを書け.