数値解析（松尾）　配付資料　　　　2019 年 11 月 11 日（訂正版 V2）

発展的話題：特異値分解とその周辺

※以下，実数体上の場合を書くが，複素数体上でも概ね成立する．

定義 (特異値分解)．行列 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ に対して，ある直交行列 $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ $(U^\top U = I_m)$，$V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ $(V^\top V = I_n)$，および対角行列 $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(\sigma_i > 0,\ r \le \min(m,n))$ が存在して，

$$A = U\Sigma V^\top.$$

固有値問題に対する QR 法の場合と同様に，(i) Householder 変換などで上二重対角行列に変換し，(ii) その行列に反復法（QR 法，dqds 法など）を施す手順で計算する．

応用例：行列の低ランク近似　（→ 3A「応用統計学」）

定理 1（Eckart–Young).

整数 $k \le \min(m,n)$ をとる．このとき，

$$\min_{\substack{\hat{X} \in \mathbb{R}^{m\times n} \\ \mathrm{rank}\hat{X} \le k}} \|X - \hat{X}\|_\mathrm{F}{}^2 = \|X - X^*\|_\mathrm{F}{}^2 = \sum_{i=k+1}^{\min(m,n)} \sigma_i{}^2.$$

ただし

$$X^* = U_1\Sigma_1 V_1{}^\top,$$

$$U =: [U_1\ U_2]\ (U_1 \in \mathbb{R}^{m\times k}),\quad V =: [V_1\ V_2]\ (V_1 \in \mathbb{R}^{n\times k}),\quad \Sigma =: \begin{bmatrix} \Sigma_1 & O \\ O & \Sigma_2 \end{bmatrix}\quad (\Sigma_1 \in \mathbb{R}^{k\times k}).$$

応用例：一般化逆行列

定義（一般化逆行列）．行列 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ に対して，(i) $AA^-A = A$ を満たす A^- を A の「一般化逆行列」とと呼ぶ（常に存在するが一意とは限らない）．さらに (ii) $A^-AA^- = A^-$，(iii) $(AA^-)^\top = AA^-$，(iv) $(A^-A)^\top = A^-A$ をも満たすとき，これを「Moore–Penrose 型一般化逆行列」と呼ぶ（常に存在し一意；A^+ などで表す）．

定理 2．行列 A の特異値分解が $A = U\Sigma V^\top$ で与えられたとき，$A^+ = V\Sigma^+U^\top$．

応用例：最小二乗問題

問題：$A \in \mathbb{R}^{m\times n}, b \in \mathbb{R}^m$ が与えられているとき，

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2.$$

定理 3．上の最小化を達成する $x \in \mathbb{R}^n$ は常に存在する．$m \ge n$ かつ $\mathrm{rank}A = n$ ならばそれは一意，さもなくば無数に存在するがその中に最小ノルム解（$\|x\|_2$ を最小にする x）が存在する．

定理 4．上の最小ノルム解（のひとつ）は $x = A^+b$ で与えられる．

【演習】（自分の興味に従って自習し，理解・実装力を高めることを奨励する）

1. 定理 2，定理 3 を示せ．(余力があれば定理 1，定理 4 も示せ．)

発展的話題：大規模固有値問題に対する部分空間法

ここでは行列 A を $n \times n$ の実行列とする．

Rayleigh–Ritz の技法

ある（求めたい）不変部分空間 E ($\mathrm{dim}E = m \ll n$) の近似 $E \simeq \tilde{E} = \mathrm{Range}(Q)$ ($Q \in \mathbb{R}^{n\times m},\ Q^\top Q = I$) があるとき，

1. 小規模固有値問題：$Q^\top AQY = Y\tilde{\Lambda}$ ($Y \in \mathbb{R}^{n\times m}$) を解く．
2. 近似固有値：$\tilde{\Lambda}$ の成分，近似固有ベクトル：QY の列ベクトル，

とする方法．

Arnoldi 法（A が非対称なとき）

Rayleigh–Ritz の技法において，近似部分空間 $\tilde{E}$ を A の Krylov 部分空間にとる方法．ある初期ベクトル $x_0 \in \mathbb{R}^n$ に対し，Krylov 列 $\{x_0, Ax_0, \ldots, A^{m-1}x_0\}$ を直交化したベクトルを並べた行列を Q とする．このとき，$Q^\top AQ$ は Hessenberg．

Lanczos 法（A が対称なとき）

Arnoldi 法と全く同じ手順により，$Q^\top AQ$ は三重対角．

詳細な手順（アルゴリズム）は参考文献参照．

参考文献

[1] 杉原正顯, 室田一雄, 線形計算の数理, 岩波書店, 東京, 2009.

[2] 櫻井鉄也, 松尾宇泰, 片桐孝洋（編），数値線型代数の数理と HPC, 共立出版, 東京, 2018.