

観測ノイズを含むクリロフ部分空間に基づく固有値の一致推定量

Consistency of an Eigenvalue Estimator Based on Krylov Subspace with Observation Noise

相島 健助 (Kensuke Aishima)¹¹ 法政大学 (Hosei University)

e-mail : aishima@hosei.ac.jp

1 概要

行列の固有値を求めるために、クリロフ部分空間を基に計算手法を設計することは多く、時系列データ解析のための動的モード分解等もこの種の固有値計算に帰着する。ただし、動的モード分解では、固有値を計算したい行列は未知であり、クリロフ部分空間も観測ノイズを含むことが多い。本講演では、部分的にノイズを含まないデータを得られる場合に、適切な直交射影に基づき固有値を推定する手法を提案し、その推定量の一致性を示す。

2 問題設定

まず固有値を求めたい $m \times m$ 行列 A に対して、求めたい非零固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_r$ とする。行列 A のランクは r とする。さらに、 $m \times n$ 行列 X_1, X_2, \dots, X_ℓ は

$$\mathcal{R}(X) = \mathcal{R}(A), \quad X_k = A^{k-1}X \quad (k = 1, \dots, \ell)$$

を満たす。ただし、 X_1, X_2, \dots, X_ℓ は直接観測できず、誤差を含む $\hat{X}_k = X_k + E_k$ ($k = 1, \dots, \ell$) が得られ、これに基づき A の固有値を推定したい。このような問題意識は、Koopman 作用素を用いる動的モード分解に現れ、その種の最近の研究の進展は [1] 等に詳しい。

本稿では、観測ノイズを含むデータに対する解析を行うため

$$Y = [X_1^\top, X_2^\top, \dots, X_\ell^\top]^\top, \quad E = [E_1^\top, E_2^\top, \dots, E_\ell^\top]^\top, \quad \hat{Y} = Y + E$$

とおき、[2] と同様の解析を行う関係で、下記の仮定の下で考える。

仮定 1 $m\ell \times n$ 行列 E の各列をなすベクトルは、平均 0 であり、各確率変数同士の共分散を表す共分散行列は $\sigma^2 I$ とする。さらに、各列ベクトルは独立同一分布に従う。

さらに、本研究では、線形回帰モデルに対する [3, 4] の問題設定を意識して、 \hat{X} とは別に

$$x \in \mathcal{R}(A), \quad \ell < r, \quad x_k = A^{k-1}x \quad (k = 1, \dots, \ell)$$

となる x_1, \dots, x_ℓ が誤差無しで得られているとする。そこで $y = [x_1^\top, x_2^\top, \dots, x_\ell^\top]^\top$ を用いて、ノイズ付きで観測できる \hat{Y} のみで推定するよりも、固有値を精度よく推定する手法を考えたい。なお $\ell = r$ であれば、 y のみで固有値を正確に復元できるため、 $\ell < r$ を条件にしている。

3 提案する固有値の推定手法

この節で、提案する固有値の推定手法を述べる。通常の推定手法は、何らかの最適化に基づいて設計されるため、特異値分解の計算が行われることが多い。この場合、 \hat{Y} の特異値分解を行うのが自然であるが、計算量の観点から、できるだけ特異値分解の対象となる行列のサイズは小さくしたい。そのため、 \hat{Y} に対して以下のような前処理を行うことを考える。

整数 j は $r \leq j \leq m$ の範囲にとり, $m \times j$ 行列 Q は $Q^\top Q = I$ を満たす. この Q を用いて

$$z = [x_1^\top Q, x_2^\top Q, \dots, x_\ell^\top Q]^\top, \quad \hat{Z} = [\hat{X}_1^\top Q, \hat{X}_2^\top Q, \dots, \hat{X}_\ell^\top Q]^\top$$

を計算する. Q の与え方としては, $\mathcal{R}(QQ^\top A)$ が $\mathcal{R}(A)$ に近いほどよい. Q を $m \times m$ の直交行列にすればその条件は等号で満たされるが, 上記の通り行列サイズを小さくするため, 小さい j による Q を決めたい. 例えば, 今, A の値域に属するベクトル x_1, \dots, x_ℓ が与えられているので, この ℓ 本のベクトルを直交化して Q の列ベクトルを与えることが考えられる. ただしこれで r 本には達しないので, 残り $r - \ell$ 本を何らかの方法で推定する必要がある. これは, \hat{Y} の大きい特異値に対応する左特異ベクトルで与える, などが考えられる.

以下, 上記の射影の後の z と \hat{Z} を用いた推定手法について述べる. z に対して,

$$P^\top z = 0_{j\ell-1}, \quad P^\top P = I$$

を満たす $j\ell \times (j\ell - 1)$ 行列 P を定める. ただし, $0_{j\ell-1}$ は $j\ell - 1$ 次元の零ベクトルである. そして U_{r-1} を $P^\top \hat{Z}$ の大きい $r - 1$ 個の特異値に対応する左特異ベクトルからなる $(j\ell - 1) \times (r - 1)$ 行列とする. ここで z と PU_{r-1} を並べてできる $W = [z, PU_{r-1}]$ は $j\ell \times r$ 行列であることに注意し, W の部分行列 W_1, W_2 を以下のように定義する. W の第 1 行から第 $j\ell - r$ 行までの $(j\ell - r) \times r$ 行列を W_1 , 第 $r + 1$ 行から第 $j\ell$ 行までの $(j\ell - r) \times r$ 行列を W_2 とする. このとき $W_1^\dagger W_2$ の固有値を目的の推定量とする. ただし \dagger は Moore-Penrose の一般逆行列とする.

4 提案する推定量の一致性

提案手法は, 一定の条件下で次の定理のような収束性を有し, 固有値の一致推定量を与える.

定理 2 E は仮定 1 を満たし, Q は $n \rightarrow \infty$ の極限において $\text{rank}(Q^\top A) = r$ を満たすと仮定する. さらに, $S = \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} Q^\top X X^\top Q$ が存在し, $\text{rank}(S) = r - 1$ が成り立つとする. このとき, $n \rightarrow \infty$ として $W_1^\dagger W_2$ の固有値は A の固有値に概収束する.

定理の条件の意味や証明については, 講演時に簡単に説明したい.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP22K03422 の助成を受けた.

参考文献

- [1] Steven L. Brunton, Marko Budišić, Eurika Kaiser, and J. Nathan Kutz, Modern Koopman theory for dynamical systems, SIAM Review, Vol. 64 (2022), 229–340.
- [2] K. Aishima, Strong consistency of the projected total least squares dynamic mode decomposition for datasets with random noise, Jpn. J. Ind. Appl. Math., Vol. 40 (2023), 691–707.
- [3] K. Aishima, Consistent estimation with the use of orthogonal projections for a linear regression model with errors in the variables, Linear Algebra Appl., Vol. 684 (2024), 101–126.
- [4] K. Aishima, Strong consistency of an estimator by the truncated singular value decomposition for an errors-in-variables regression model with collinearity, Linear Algebra Appl., Vol. 721 (2025), 520–541.

RBF 補間に現れる連立一次方程式の反復解法について

On iterative solvers for linear systems arising from RBF interpolation

家田 雅志 (Masashi IEDA)¹, 中野 張 (Yumiharu NAKANO)²,

¹ 東京理科大学 (Tokyo University of Science), ² 東京科学大学 (Institute of Science Tokyo)
e-mail : ieda_at_rs.tus.ac.jp

1 はじめに

本研究は、高次元偏微分方程式への応用を念頭に、RBF 補間における補間係数がある程度の精度で現実的な計算時間で求めることを目的とする。計算の本質は連立一次方程式の解法にあり、その係数行列は大規模な密行列で一般に悪条件である。本発表では、上記のような連立一次方程式に対して精度と計算時間のトレードオフを意識した新しい反復解法を提案する。なお、紙面の都合で掲載できなかった関数補間に関連する事項の詳細については [1] を参照されたい。

2 RBF 補間

RBF 補間は与えられたデータに対して動径基底関数 (Radial Basis Function) の線形結合による補間関数を構築する方法である。補間関数を $s(x)$ と書くことにすれば、例えば

$$s(x) = \sum_{i=1}^N \xi_i \phi(\|x - x^{(i)}\|), \quad x \in \mathbb{R}^d \quad (1)$$

の形で表されるものが RBF 補間である。ただし、 $N \in \mathbb{N}$, $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N, x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)} \in \mathbb{R}^d$, ϕ は動径基底関数である。さて、補間対象データを (x_j, y_j) , $x_j \in \mathbb{R}^d, y_j \in \mathbb{R}$, $j = 1, 2, \dots, N$ とすると、補間係数 ξ_i は以下の連立一次方程式を解くことで求められる。

$$\sum_{i=1}^N \xi_i \phi(\|x_j - x^{(i)}\|) = y_j, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad \Leftrightarrow \quad A\xi = y \quad (2)$$

ここで、 $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)^\top$, $y = (y_1, y_2, \dots, y_N)^\top$ であり、 $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ は $A_{ji} = \phi(\|x_j - x^{(i)}\|)$, $i, j = 1, 2, \dots, N$ により定める。

連立一次方程式 (2) の係数行列 A は正定値行列であるため、通常は共役勾配法 (CG 法) を用いて解くことができる。しかし、 A は一般に CG 法が苦手とする悪条件な行列である。実際、後の数値例で示す様に、CG 法により得られた補間係数 ξ を用いた補間関数の精度を計測すると、反復回数の増加に対して補間精度が不安定になることが確認された。また、基底関数の選択にもよるが行列 A は密行列であるため、行列サイズ N が大きくなると直接解法を用いることも困難である。

3 常微分方程式の視点からの反復解法

上記の問題に対応するため、本研究では以下の常微分方程式 (ODE) から新しい反復解法を提案する。

$$\frac{dX_t}{dt} = \frac{1}{1-t}(y - AX_t), \quad 0 < t < 1; \quad X_0 = x_0$$

この ODE には解析的明示解が存在し

$$X_t = e^{\log(1-t)A}x_0 + A^{-1}(I - e^{\log(1-t)A})y, \quad 0 \leq t < 1$$

である。また、係数行列 A の固有値はすべて正であるため $\lim_{t \nearrow 1} X_t = A^{-1}y$ が成り立つ。したがって、 X_t は $t \simeq 1$ において連立一次方程式 (2) の近似解として機能する。

ここで、 $\varepsilon > 0$ を固定し、 $t_i = 1 - (1 - \varepsilon)^i$, $i = 0, 1, \dots, N_{\text{itr}}$ とおく。このとき、行列指数関数の展開を有限回で止めると、 X_{t_i} についての近似漸化式

$$X_{t_{i+1}} \approx \left(\sum_{\ell=0}^m \frac{(\delta A)^\ell}{\ell!} \right) X_{t_i} - A^{-1} \left(\sum_{\ell=1}^k \frac{(\delta A)^\ell}{\ell!} \right) y, \quad i = 0, 1, \dots, N_{\text{itr}} \quad (3)$$

が得られる。ただし、 $\delta = \log(1 - \varepsilon)$ である。適当な初期値 x_0 を与え、式 (3) の反復計算により得られる $X_{t_{N_{\text{itr}}}}$ を補間係数 ξ の近似値とみなすことが本研究のアイディアである。

4 数値検証

本節では、提案した ODE 型解法と直接法および CG 法の性能検証例を示す。補間対象は $d = 1$ の三角関数 $f(x) = \sin(x)$ とする。補間係数決定のためのデータは区間 $[-2\pi, 2\pi]$ 上から等間隔に $N = 5 \times 10^4$ 点を選ぶ。つまり、 $x^{(i)} = -2\pi + 4\pi(i-1)/(N-1)$, $i = 1, 2, \dots, N$ とし、対応する y_i は $y_i = \sin(x^{(i)})$ とする。補間精度の評価には、区間 $[-\pi, \pi]$ に等間隔に配置した $N_{\text{eval}} = 100$ 点を用いる。これを $\{(\tilde{x}_j, \tilde{y}_j)\}_{j=1}^{N_{\text{eval}}}$ と表記し、上記と同様に定める。そして、以下の最大誤差評価と RMSE 評価の 2 種類を用いて補間精度を評価する。

$$E_{\max} = \max_{1 \leq j \leq N_{\text{eval}}} |s(\tilde{x}_j) - \tilde{y}_j|, \quad E_{\text{RMSE}} = \sqrt{\frac{1}{N_{\text{eval}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{eval}}} |s(\tilde{x}_j) - \tilde{y}_j|^2}$$

図 1 に、基底関数 ϕ に Matérn5 カーネルを採用した場合の補間精度を比較結果を示す。紫色は直接法、青色は CG 法、赤色は ODE 型解法 ($m = 1, k = 1$) を表し、縦軸と横軸はともに対数スケールである。まず、CG 法を見ると最大誤差・RMSE の両方において反復回数の増加に対して補間精度が不安定な様子が確認できる。対して、赤色の ODE 型解法の補間精度が安定していることがわかる。なお、直接法の補間精度は圧倒的に高いものの、手元の計算環境では計算時間は約 180 秒かかり、ODE 型解法と CG 法は $N_{\text{itr}} = 100$ では約 25 秒と比較的短時間で計算が終了した。よって、補間精度の悪化をある程度許容可能ならば ODE 型解法は一つの選択肢となることが示唆される。

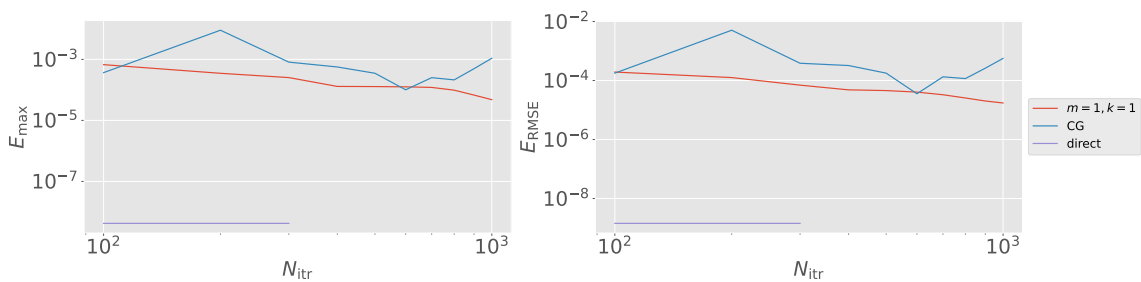


図 1. 各解法における補間精度の比較

講演スライドのオンライン共有

講演当日は <https://tus.box.com/v/IedaJsiam202509> にて講演スライドを共有します。

参考文献

- [1] Holger Wendland, Scattered Data Approximation, Cambridge University Press, 2004.

一体型二層流れ解析における Krylov 部分空間法に基づく 並列線形ソルバの breakdown 抑制

Breakdown Avoiding in Parallel Krylov Subspace Solvers for Two-phase Flow Analysis with Monolithic Coupling Scheme

森田 直樹 (Morita Naoki)¹, 川上 幸亮 (Kawakami Kosuke)²,

三目 直登 (Mitsume Naoto)¹

¹ 筑波大学システム情報系 (University of Tsukuba), ² 株式会社サイバーメカニクス
e-mail : nmorita@kz.tsukuba.ac.jp

1 概要

BiCGStab 法 [1] に代表される Krylov 部分空間法に基づく連立一次方程式の反復解法は、大規模・疎な係数行列をもつ線形方程式系の求解に広く用いられる。BiCGStab 法では、反復アルゴリズム中に必要な内積や係数がゼロになり、ゼロ割によって計算が破綻する問題が知られている。この問題は breakdown [2] と呼ばれ、数値計算誤差に起因する near breakdown とあわせて、反復法の数値的安定性に関する重要な問題である。

BiCGStab 法の breakdown は、高レイノルズ数の流体解析や音響解析で生じることが報告されている。本研究では、計算精度の観点から一体型解法を採用し、有限要素法に基づいた気液二相流れのシミュレーションを対象として、反復法の breakdown を回避・抑制する手法について検討する。なお検討に用いるシミュレータは、大規模問題に対応できるよう、グラフ構造で一般化された領域分割法に基づく分散メモリ型並列化 [3] を施した。

このシミュレータに対し、本研究では 4 つの手法（標準的な BiCGSTAB 法 [1]、内積演算に擬似四倍精度 [4] を導入した BiCGSTAB 法、BiCGSafe 法 [5]、IDR(s) 法 [6]）を線形ソルバとして選択し、反復回数（反復法の収束可否）と計算時間の観点から性能を評価する。

2 数値実験

本研究では、はじめに基礎的検討として、Graves-Morris が提案した行列 A を係数行列とする問題 [2] に対して、反復法ごとのソルバの収束可否と計算時間を評価する。式 (1) に、行列 A の成分を示す。ここで行列サイズ N を 100、1,000、10,000、行列の性質を決定するパラメータ γ を 1.0、 1.0×10^{-2} 、 1.0×10^{-4} 、 1.0×10^{-6} 、 1.0×10^{-8} 、 1.0×10^{-10} 、 1.0×10^{-12} 、並列数（領域分割数） P を 1、2、4、8、16 と設定した。IDR(s) 法の基底数 s は 1、2、4、8 と設定した。また、解ベクトルの要素が全て 1 となるように右辺ベクトルを設定し、すべての反復法に対して対角スケーリング前処理を用いた。収束判定値は 1.0×10^{-8} である。

$$A = \begin{pmatrix} 2 & \gamma & & & \\ 0 & 2 & \gamma & & \\ 1 & 0 & 2 & \gamma & \\ & 1 & 0 & 2 & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1)$$

表 1. 反復法ごとの breakdown 回数および合計計算時間

	STAB	STAB_DD	SAFE	IDR(1)	IDR(2)	IDR(3)	IDR(4)
breakdown 回数	11	0	5	0	0	0	0
計算時間	0.382*	0.661	0.335*	0.482	0.536	0.689	1.1

表 1 に、Graves-Morris の問題に対する、反復法ごとの breakdown 回数および合計計算時間を示す。ここで、STAB は標準的な BiCGSTAB 法、STAB_DD は内積演算に擬似四倍精度を導入した BiCGSTAB 法、SAFE は BiCGSafe 法、IDR(1) から IDR(4) は IDR(s) 法のうち基底数 s を 1、2、4、8 と設定したものである。

表 1 より、反復法ごとに行った全 105 回の計算のうち、標準的な BiCGSTAB 法では 11 回、BiCGSafe 法では 5 回の breakdown が発生した。一方、内積演算に擬似四倍精度を導入した BiCGSTAB 法と IDR(s) 法では、breakdown が見られなかった。標準的な BiCGSTAB 法に対しては、擬似四倍精度を用いた高精度演算が breakdown 解決のひとつの方策となりえる。次に計算時間について、IDR(s) 法では、基底数 s を増やすと計算時間の増加がみられ、IDR(1) 法が最も計算時間が短く 0.482 s となった。内積演算に擬似四倍精度を導入した BiCGSTAB 法では、0.661 s であった。また参考として、breakdown が発生した計算については、収束した計算時間の合計を * で示している。以上の結果より、breakdown が生じず、最も計算時間が短い結果が得られた IDR(1) 法が有用である可能性がある。一方、標準的な BiCGSTAB 法と IDR(1) 法が数学的に同一 [6] であることが知られている。標準的な BiCGSTAB 法でのみ breakdown が生じた理由については、IDR(s) 法との実装アルゴリズムの差異が考えられるため、継続して検討を行う。

気液二相流れのシミュレーションを対象とした検証結果は、講演にて示す。

参考文献

- [1] Van der Vorst, H. A., Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, SIAM Journal on scientific and Statistical Computing, 13(2), 1992, 631–644.
- [2] Graves-Morris, P. R., The breakdowns of BiCGStab, Numerical Algorithms, 29(1), 2002, 97–105.
- [3] 森田直樹, 集路幸正, 田中克治, 馬込望, 新館京平, 柴沼一樹, 三目直登, 領域分割型並列シミュレーションのためのグラフ構造に基づく統一的ライブラリと多手法への展開, 日本計算工学会論文集, 2024(1), 2024, 20241008-20241008.
- [4] Bailey, D. H., High-precision floating-point arithmetic in scientific computation. Computing in science & engineering, 7(3), 2005, 54-61.
- [5] 藤野清次, 藤原牧, 吉田正浩, 準残差の最小化に基づく BiCGSafe 法の収束性について, 日本計算工学会論文集, 2005, 2005, 20050028-20050028.
- [6] Sonneveld, P., and Van Gijzen, M. B., IDR (s): A family of simple and fast algorithms for solving large nonsymmetric systems of linear equations, SIAM Journal on Scientific Computing, 31(2), 2009, 1035-1062.

分散共分散行列の逆行列の対角成分の逆数の高精度計算から拡張版 Lotka-Volterra 方程式へ

From accurate computation of the inverse of the diagonal elements of the inverse of the variance-covariance matrix to the extended version of the Lotka-Volterra equation

千代延 未帆 (Miho Chiyonobu)¹, 石川 貴弘 (Takahiro Ishikawa)², 新庄 雅斗 (Masato Shinjo)³,
 關戸 啓人 (Hiroto Sekido)³, 高田 雅美 (Masami Takata)⁴, 〇木村 欣司 (Kinji Kimura)⁵,
 岩崎雅史 (Masashi Iwasaki)⁶, 山本 有作 (Yusaku Yamamoto)⁷,
 中村 佳正 (Yoshimasa Nakamura)³,

¹ 滋賀大学 (Shiga University), ² 三菱電機 (Mitsubishi Electric Corporation),

³ 大阪成蹊大学 (OSAKA SEIKEI UNIVERSITY),

⁴ 奈良女子大学 (Nara Women's University), ⁵ 福井大学 (UNIVERSITY OF FUKUI),

⁶ 京都府立大学 (Kyoto Prefectural University),

⁷ 電気通信大学 (The University of Electro-Communications)

e-mail : kkimur@u-fukui.ac.jp

1 概要

線形回帰において、最小二乗モデルを採用する。適当な有意水準 α を設定した後、回帰係数 a_k について、帰無仮説 $a_k = 0$ 、対立仮説 $a_k \neq 0$ のもとで検定を行うことができる。分散共分散行列の逆行列の対角成分の逆数を利用して、検定のための検定統計量は計算される [1]。しかし、逆行列の計算は数値安定な計算ではないため、逆行列の計算を行うことなしに、分散共分散行列の逆行列の対角成分の逆数を計算する方法を提案する。さらに、提案法が機能する根拠として、提案法の連続極限から、特異値を収束先とする下三角行列に対する拡張版 Lotka-Volterra 方程式 [2] が得られることを示す。

2 提案法

厳密な定義とは矛盾するが、この予稿では、次の行列 X に対する $X^T X$ を分散共分散行列と呼ぶ。

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} 1 & x_1^{(1)} & \cdots & x_1^{(m)} \\ 1 & x_2^{(1)} & \cdots & x_2^{(m)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n^{(1)} & \cdots & x_n^{(m)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}$$

とすると、線形回帰における最小二乗法とは、 $\hat{\mathbf{a}} = \underset{\mathbf{a}}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{y} - X\mathbf{a}\|^2$ を求めることである。 X がフルランクの行列の場合には、 $\hat{\mathbf{a}} = \underset{\mathbf{a}}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{y} - X\mathbf{a}\|^2 = \underset{\mathbf{a}}{\operatorname{argmin}} \|X^T \mathbf{y} - X^T X \mathbf{a}\|^2$ であり、 $X^T X$ は正則な正方行列であるから逆行列が存在し、 $\hat{\mathbf{a}} = (X^T X)^{-1} X^T \mathbf{y}$ となる。残差平方和 (RSS : Residual Sum of Squares, 二乗和残差) は、 $\text{RSS} \equiv \|\mathbf{y} - X\hat{\mathbf{a}}\|^2$ によって定義される。次に、特定の k を固定し、 $a_k = 0$ とする。 a_k に関する列を行列 X から取り除き、その行列を $X^{(k)}$ とする。 $\hat{\mathbf{a}}^{(k)} = ((X^{(k)})^T X^{(k)})^{-1} (X^{(k)})^T \mathbf{y}$ を計算する。 $\text{RSS}^{(k)} = \|\mathbf{y} - X^{(k)} \hat{\mathbf{a}}^{(k)}\|^2$ とすると、検定統計量 $W_0^{(k)}$ は、 $W_0^{(k)} \equiv \frac{\text{RSS}^{(k)} - \text{RSS}}{\text{RSS}} \times (n - (m + 1))$, ($k = 0, \dots, m$) として定義される。 $W_0^{(k)}$ は、自由度 $(1, n - (m + 1))$ の F 分布に従うため、自由度 $n - (m + 1)$ の t 分布を利用した両側検定を行う。RSS は、行列 $W = \begin{pmatrix} X & \mathbf{y} \end{pmatrix}$ の QR 分解 $W = Q'R'$ を利用すると、 R' の $(m + 2, m + 2)$

成分より得られる. $\text{RSS}^{(k)} - \text{RSS} = \frac{(\hat{a} \text{の } k+1 \text{ 行目の } a_k)^2}{(X^\top X)^{-1} \text{の } (k+1, k+1) \text{ 成分}}$ も知られている. X の QR 分解 $X = QR$ は, W の QR 分解 $W = Q'R'$ の途中に得られる. $X^\top X = R^\top R$ が成立するため, $(X^\top X)^{-1}$ の $(k+1, k+1)$ 成分は, $(R^\top)^{-1}$ の $k+1$ 番目の列ベクトルのノルムより計算できる.

逆行列を利用しない数値安定な計算法を提案する. e_ℓ は, ℓ 番目が 1 でそれ以外が 0 の縦ベクトルとする. $e_\ell^\top (R^\top R)^{-1} e_\ell$ は, $(R^\top R)^{-1}$ の (ℓ, ℓ) 成分を表す. $e_\ell^\top (R^\top R)^{-1} e_\ell = e_\ell^\top R^{-1} (R^\top)^{-1} e_\ell = \left((R^\top)^{-1} e_\ell \right)^\top \left((R^\top)^{-1} e_\ell \right)$ が成立する. いま, $R^\top \hat{Q} e_\ell = \gamma_\ell e_\ell$ を満たす直交行列 \hat{Q} と $\gamma_\ell (\neq 0)$ を見つけられたとすると, $\frac{1}{\gamma_\ell} \hat{Q} e_\ell = (R^\top)^{-1} e_\ell$ より, $e_\ell^\top (R^\top R)^{-1} e_\ell = \left(\frac{1}{\gamma_\ell} \hat{Q} e_\ell \right)^\top \left(\frac{1}{\gamma_\ell} \hat{Q} e_\ell \right) = \frac{1}{\gamma_\ell^2}$ であるから, $(R^\top R)^{-1}$ の対角成分 (ℓ, ℓ) の逆数 $= \gamma_\ell^2$ を得られる.

直交行列 \hat{Q} は次のように構成する. 例として, 4×4 の行列 R^\top を考える. $\hat{Q} = I$ として R^\top の $(4, 4)$ 成分が γ_4 である. G_1 は $(4, 3)$ 成分を, G_2 は $(4, 2)$ 成分を, G_3 は $(4, 1)$ 成分を 0 にするためのギブンス回転行列とすると, $R^\top G_1 G_2 G_3$ の第 3 列目は, $(3, 3)$ 成分以外すべて 0 になる. $\hat{Q} = G_1 G_2 G_3$ として $R^\top \hat{Q}$ の $(3, 3)$ 成分は, γ_3 となる. 次に, G_4 は $(3, 2)$ 成分を, G_5 は $(3, 1)$ 成分を 0 にするためのギブンス回転行列とすると, $R^\top G_1 \cdots G_5$ の第 2 列目は, $(2, 2)$ 成分以外すべて 0 になる. $\hat{Q} = G_1 \cdots G_5$ として $R^\top \hat{Q}$ の $(2, 2)$ 成分は, γ_2 となる. 最後に, G_6 は $(2, 1)$ 成分を 0 にするためのギブンス回転行列とすると, $R^\top G_1 \cdots G_6$ の第 1 列目は, $(1, 1)$ 成分以外すべて 0 になる. $\hat{Q} = G_1 \cdots G_6$ として $R^\top \hat{Q}$ の $(1, 1)$ 成分は, γ_1 となる. 最後に定義された \hat{Q} に対して, \hat{R} を新たな上三角行列とすると, $R^\top \hat{Q} = \hat{R}$ が成立する. この式は, 特異値分解を計算するための Orthogonal QD 法の 1 回の反復計算のための式である. 以上の計算法は, VIF (Variance Inflation Factor) を計算する際にも利用できる.

$R^\top \hat{Q} = \hat{R}$ より, $R^\top R = \hat{R} (\hat{R})^\top$ を得る. $R^\top R = \hat{R} (\hat{R})^\top$ は,

$$F = \begin{pmatrix} O & & 1 \\ & \ddots & \\ 1 & & O \end{pmatrix}, \quad L = FRF, \quad \hat{L} = F(\hat{R})F$$

を導入すると, $L^\top L = \hat{L} (\hat{L})^\top$ と書き換えることができる. ここで, L, \hat{L} は下三角行列である. $L^\top L = \hat{L} (\hat{L})^\top$ は, 特異値を計算するためのコレスキー LL^\top 法の 1 回の反復計算のための式である. コレスキー LL^\top 法の連続極限は, $\dot{L} = L (L^\top L)_L - (LL^\top)_L L$ となる. ここで, 行列 Z に対して Z_L を $Z_L = Z_- + \frac{1}{2} Z_0$ として定義する. Z_- は Z の狭義下三角部分のみを残した行列, Z_0 は Z の対角成分のみを残した行列である. $\dot{L} = L (L^\top L)_L - (LL^\top)_L L$ は, Moody T. Chu 氏が導入した拡張版 Lotka-Volterra 方程式 [2] と等価な式である. 提案法の計算速度, 提案法によって得られる分散共分散行列の逆行列の対角成分の逆数の精度, さらに, 拡張版 Lotka-Volterra 方程式と Lotka-Volterra 方程式の相違点については, 当日報告する.

参考文献

- [1] 佐和 隆光, 回帰分析 (新装版) (統計ライブラリー), 朝倉書店 (2020/2/17).
- [2] Moody T. Chu, A differential equation approach to the singular value decomposition of bidiagonal matrices, Linear Algebra and its Applications, Volume 80, pp.71-79, 1986.