数値計算

京都大学大学院情報学研究科
大木 健太郎
連絡先： ohki@i.kyoto-u.ac.jp

第13回

- 特異値分解
- 関数近似

本日の内容

- ❖特異値分解
  - ❖dqds法
  - ❖mdLVs法
- ❖関数近似
  - ❖有限次数の近似多項式
  - ❖最小二乗近似
  - ❖直交多項式

特異値分解

- 特異値を求める問題は工学で頻繁に出会う
  - 主成分分析（データサイエンス，統計学）
  - システム同定（システム制御）

- よく用いられる方法：
  dqds法(Differential Quotient Difference with Shifts)
  - 数値的安定性，計算速度，精度が良い

特異値分解の概要

- 行列 A を直交行列を用いて上2重対角化
- 上2重対角行列の特異値分解

Householder法を繰り返して
上2重対角化

$$A^{(1)} = Q_{R1} A = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1m}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nm}^{(1)} \end{bmatrix}$$

乗算・加減算ともに

$$2n^2\left(m - \frac{n}{3}\right)$$ 回程度

$$A^{(2)} = A^{(1)} Q_{L2} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & a_{2m}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \cdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & & a_{nm}^{(2)} \end{bmatrix}$$

上2重対角行列の特異値問題

$$Q_R \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad A \in \mathbb{R}^{n\times m}, \quad Q_L \in \mathbb{R}^{m\times m}$$

$$Q_R A Q_L = \begin{bmatrix} B & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad B \in \mathbb{R}^{r\times r}$$

dqds法の導出の概要

$B^\top B$ にシフト付きCholesky LR法を用いる

dqds法の導出法

$$B_1 = B = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & & \\ & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & b_{2r-2} \\ & & & b_{2r-1} \end{bmatrix}$$

$$s_1 = 0,\ \ s_k \in \left[0, (b_{2r-1}^{(k)})^2 + \sum_{i=1}^{k-1} s_i\right), k = 2, 3, \cdots$$

$$B_k B_k^\top - s_k I = B_{k+1}^\top B_{k+1}$$ Cholesky分解

対角成分 $(b_{2i-1}^{(k+1)})^2 + (b_{2i-2}^{(k+1)})^2 = (b_{2i-1}^{(k)})^2 + (b_{2i}^{(k)})^2 - s_k, \quad i = 1, \cdots, r$

非対角成分 $b_{2i-1}^{(k+1)} b_{2i}^{(k+1)} = b_{2i+1}^{(k)} b_{2i}^{(k)}, \quad i = 1, \cdots, r-1$

⇒ ゼロに収束

dqds 法のアルゴリズム（要素毎）

$$q_i^{(k)} := (b_{2i-1}^{(k)})^2, \quad e_i^{(k)} := (b_{2i}^{(k)})^2, \quad d_i^{(k+1)} := q_i^{(k)} - e_{i-1}^{(k+1)} - s_k$$

$$q_i^{(k+1)} = d_i^{(k+1)} + e_i^{(k)}, \quad i = 1, 2, \cdots, r$$

$$e_i^{(k+1)} = e_i^{(k)} \frac{q_{i+1}^{(k)}}{q_i^{(k+1)}}, \quad i = 1, 2, \cdots, r-1$$

$$d_{i+1}^{(k+1)} = d_i^{(k+1)} \frac{q_{i+1}^{(k)}}{q_i^{(k+1)}} - s_k, \quad i = 1, 2, \cdots, r$$

$$|e_r^{(k)}| < \epsilon \Rightarrow \sigma_r = \sqrt{q_r^k + \sum_{i=1}^{k-1} s_i}$$

B_k の r 行 r 列を除いて $r-1$ 次の行列に対して同じようにして求める

特異値分解の補足

- 特異値分解の詳細は，
[杉原，室田：線形計算の数理，岩波書店]
と，その参考文献を参照されたい
- 特異値分解のアルゴリズムは，物理学とも関連がある（ソリトン，可積分系）．
    - mdLVs法（modified discrete Lotka-Volterra with shift）

mdLVs法

- 修正シフト付き離散 Lotka-Vilterra 法（2006年）(modified discrete Lotka-Volterra with shift)

適切に選ばれた $\delta_k > 0$ に対し,

$$
\begin{cases}
\bar{B}_k^\top \bar{B}_k = B_k^\top B_k + \dfrac{1}{\delta_k} I \\
\hat{B}_k^\top \hat{B}_k = \bar{B}_k \bar{B}_k^\top - \dfrac{1}{\delta_k} I \\
\underline{B_{k+1}^\top B_{k+1}} = \hat{B}_k^\top \hat{B}_k - s_k I
\end{cases}
$$

→ 対角行列に収束

メリット

- 数値誤差：dqds法よりよい
- スピード： dqds法より少し遅い
- 重複特異値の収束性の保証

Iwasaki M. and Nakamura Y., ``Accurate computation of singular values in terms of shifted integrable schemes," Japan J. Indust. APPl. Math. 23 (2006), 239-259.

Lotka-Volterra方程式

- 被食者(e.g., シマウマ), 捕食者(e.g., ライオン)の平均数の方程式

Lotka-Volterra 方程式

$$\begin{cases} \dfrac{dx(t)}{dt} = x(t)(\alpha - \beta y(t)) \\ \dfrac{dy(t)}{dt} = -y(t)(\gamma - \delta x(t)) \end{cases}$$

x : 被食者
y : 捕食者

$$\alpha, \beta, \gamma, \delta > 0$$

dLVs法で t を固定して $t = \lim_{N\to\infty} \sum_{k=1}^{N} \delta_k$ を満たすようにパラメータを変化させると,

有限 Lotka-Volterra 方程式へ収束

$$\frac{du_k(t)}{dt} = u_k(t)(u_{k+1}(t) - u_{k-1}(t)) \quad (k = 1, \ldots, 2m-1) \quad u_0(t) \equiv 0, \quad u_{2m}(t) \equiv 0$$

本日の内容

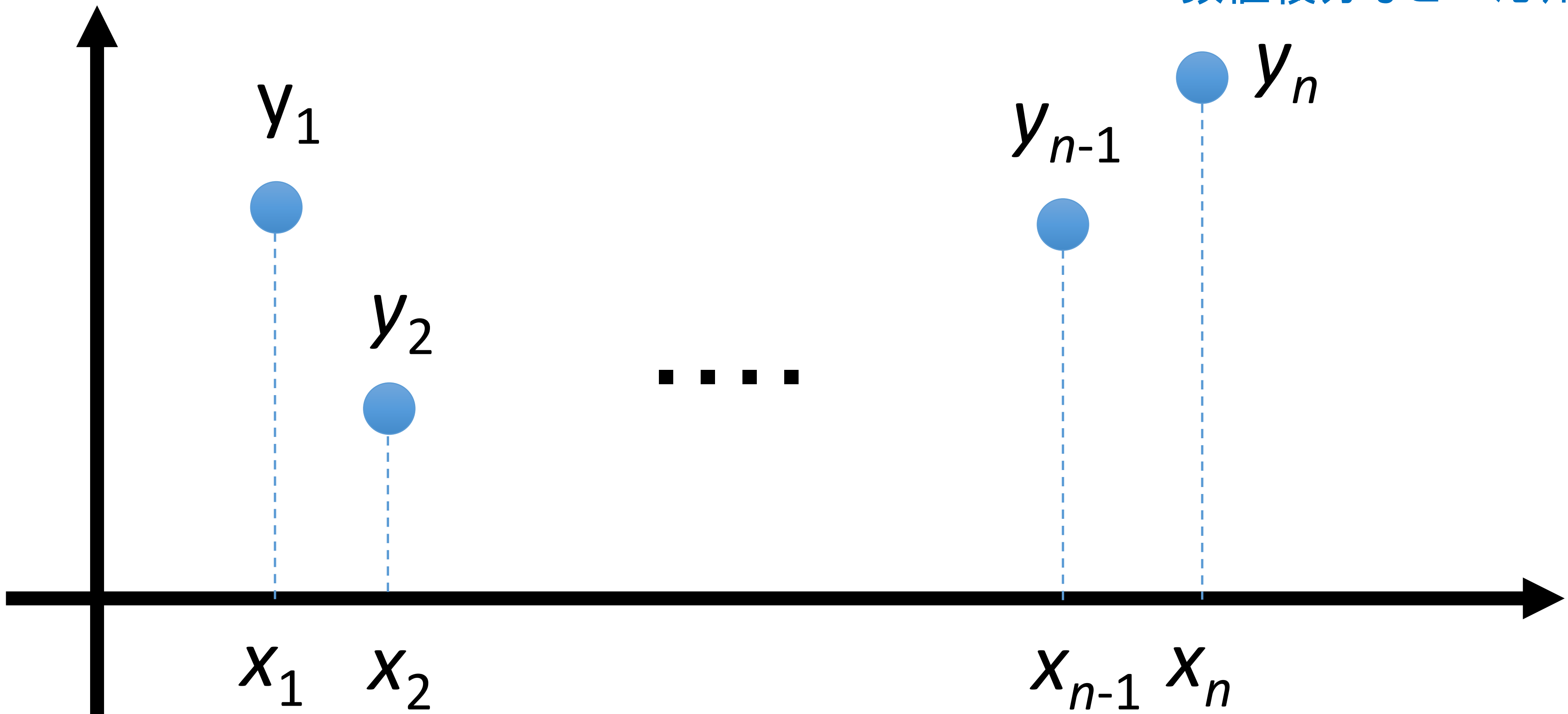
- 特異値分解
  - dqds法
  - mdLVs法
- 関数近似
  - 有限次数の近似多項式
  - 最小二乗近似
  - 直交多項式

データと曲線フィッティング

与えられたデータから，尤もらしい関係式を与えたい

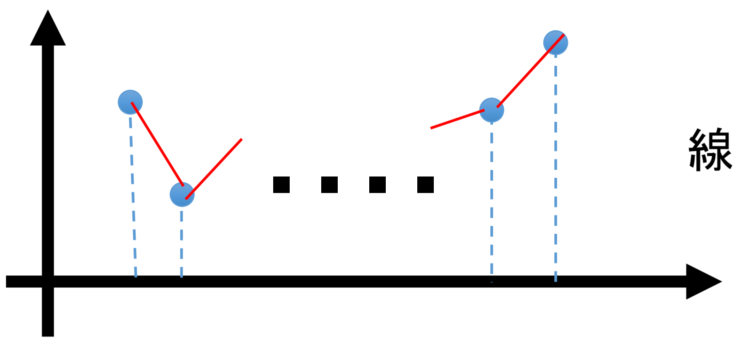
モチベーション：データのない箇所の推定値を知りたい

数値積分などへ応用



関数の近似

- 補間
  - 与えられたデータは正確であると仮定
  - 線形補間，Lagrange補間など



線形補間：データを直線で結ぶ補間法

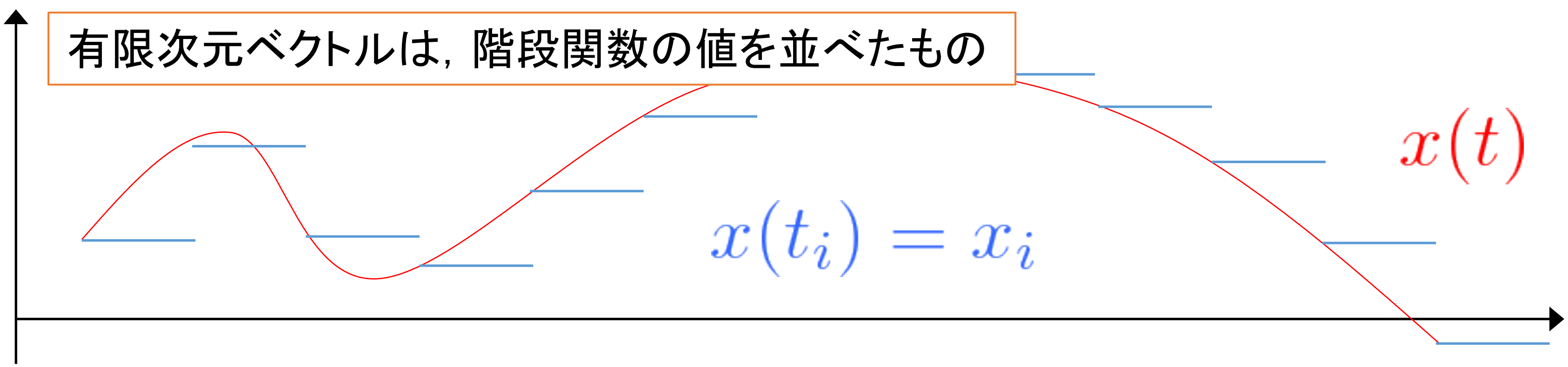
- 最小二乗法：
  - 与えられたデータには誤差があると仮定

関数とベクトル

- 関数はベクトル：和とスカラー倍が定義できる

要素毎に和が定義される $\Rightarrow$ 関数 $x, y : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ も同様

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \Rightarrow x(t) + y(t)$$



関数の測り方

- 関数の大きさを測る尺度:ノルムを利用

1. $\|x\| \geq 0, \forall x \in X$ かつ $\|x\| = 0 \;\Leftrightarrow\; x = 0$
2. $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|, \forall x \in X, \;\alpha \in \mathbb{C}$
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

- 関数間の類似度を測る尺度:内積を利用

1. $\langle x, y \rangle = \overline{\langle x, y \rangle}, \forall x, y \in \mathbb{C}$
2. $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle \;, \forall x, y \in X, \;\alpha \in \mathbb{C}$
3. $\langle x_1 + x_2, y \rangle = \langle x_1, y \rangle + \langle x_2, y \rangle$
4. $\langle x, x \rangle \geq 0$ かつ等号は $x = 0$ のときのみ

よく用いる関数空間：Hilbert空間

- [a, b] 上の関数の集合に対し
  - 内積を次で定義

$$\langle u, v \rangle := \int_a^b u(x)v(x)dx$$

  - ノルムを次で定義（ノルムの公理を満たすことが確認できる）

$$\|u\|_2 := \sqrt{\langle u, u \rangle}$$

- ノルムが有界になる関数の集合は完備になる（Hilbert空間という）

“ノルム”の注意

- ノルムでゼロになる関数は，恒等的にゼロではない

（例）
$$u(x) = \begin{cases} 1, & x = \frac{a+b}{2} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\|u\|_2^2 = \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\frac{a+b}{2}-\epsilon}^{\frac{a+b}{2}+\epsilon} u(x)dx = 0$$

$u = 0 \quad \text{a.e.}$ ほとんど至るところ（almost everywhere）でゼロ

ノルムとして使いたい尺度でゼロになる関数は，
ゼロとみなす

基本系と正規直交系

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j \psi_j(x)$$ とする

- $\{\psi_j\}$ がノルム空間 $(X_\alpha, \|\cdot\|_\alpha)$ の基本系とは,

$$\forall f \in X_\alpha, \lim_{n\to\infty} \inf_{c_j, j=1,2,\cdots} \|f - f_n\|_\alpha = 0$$

- $\{\psi_j\}$ がHilbert空間の正規直交系（ONS；orthonormal system）とは,

$$\langle \psi_i, \psi_j \rangle = \delta_{ij}$$

- 正規直交基底（ONB；orthonormal basis）とは，基本形かつ正規直交系

基本系の例: Weierstrassの定理

- 有限閉区間上の連続関数は，多項式でいくらでも近似できる.

ノルム空間: 連続関数の集合とmaxノルム

$$(C([a,b]),\ \|\cdot\|_\infty)\quad \|u\|_\infty := \max_{x\in[a,b]} |u(x)|$$

多項式 $f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j\psi_j(x), \quad \psi_j(x) := x^j$

$$\Rightarrow\quad \forall f \in C([a,b]),\ \forall\epsilon > 0,\ \exists n > 0;$$
$$\min_{c_j, j=1,2,\cdots} \|f - f_n\|_\infty < \epsilon$$

本日の内容

- 特異値分解
  - dqds法
  - mdLVs法
- 関数近似
  - 有限次数の近似多項式
  - 最小二乗近似
  - 直交多項式

有限次数の近似多項式

- Weierstrassの定理は，多項式が存在することしか述べてない
  $\Rightarrow$ 大きな次数の多項式にもなりうる
- 実際は適切な有限次元でとどめる必要がある

近似多項式問題のためのノルムの性質

i.　次の不等式を満たす正数 M_n が存在する

$$\|x^k\| \leq M_n, \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

ii. $\displaystyle\sum_{k=0}^{n} b_k^2 = 1$ を満足する全ての$(b_0, b_1, \cdots, b_n)$に対して,

$$0 < m_h \leq \left\| \sum_{k=0}^{n} b_k x^k \right\|$$

を満たす正の m_n が存在する

最良近似多項式の存在性

$$f_n(x) := a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$$

定理4.1

ノルムが先の条件（ｉ），（ⅱ）を満たすならば，

$\forall f \in C([a,b])$,

$$\inf_{a_0,\cdots,a_n} \|f - f_n\| = \min_{a_0,\cdots,a_n} \|f - f_n\|$$

※ 下限を達成するパラメータが存在

本日の内容

- 特異値分解
  - dqds法
  - mdLVs法
- 関数近似
  - 有限次数の近似多項式
  - 最小二乗近似
  - 直交多項式

最小二乗法

- 一次独立な関数の一次結合を考える

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j \psi_j(x), \quad \|\psi_j\| = 1$$

- 関数 f を L_2 の意味で最小化するパラメータを探す

$$S_n := \|f - f_n\|_2^2$$

これを最小化したい

正規直交系の場合

- 正規直交系の場合は計算が簡単

$$
\begin{aligned}
S_n :=& \|f - f_n\|_2^2 = \langle f - f_n, f - f_n \rangle \\
=& \|f\|_2^2 - 2\sum_{j=0}^{n} c_j \langle f, \psi_j \rangle + \sum_{j=0}^{n} c_j^2 \\
=& \sum_{j=0}^{n} (\underline{c_j - \langle f, \psi_j \rangle})^2 + \|f\|_2^2 - \sum_{j=0}^{n} |\langle f, \psi_j \rangle|^2
\end{aligned}
$$

➡ $$c_j = \langle f, \psi_j \rangle$$

➡ $$\hat{f}_n(x) = \sum_{j=0}^{n} \langle f, \psi_j \rangle \psi(x)$$

最良近似

一次独立性のみを仮定

- 平方完成して整理

$$
\begin{aligned}
S_n &= \|f\|_2^2 - 2\sum_{j=0}^{n} c_j \underbrace{\langle f, \psi_j \rangle}_{b_j} + \sum_{i,j=0}^{n} c_i c_j \underbrace{\langle \psi_i, \psi_j \rangle}_{=:a_{ij}} \\
&= \|f\|_2^2 - 2c^\top b + c^\top A c \\
&= (Ac - b)^\top A^{-1}(Ac - b) + \|f\|_2^2 - b^\top A^{-1} b
\end{aligned}
$$

正規方程式

$$Ac = b$$

※ $A = A^\top > 0$ に注意

最小二乗近似

- 正規方程式(連立一次方程式)を解くと,

$$c = A^{-1}b$$

$$\hat{f}_n(x) = \sum_{j=0}^{n} (A^{-1}b)_j \psi_j(x)$$

条件数が悪いと，近似解の精度が悪くなる

条件数が悪くなる例：多項式

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j \psi_j(x), \quad \psi_j(x) = x^j$$

- 多項式による正規方程式

$$Ac = b$$

$$a_{ij} = \langle \psi_i, \psi_j \rangle = \frac{1}{i+j+1}(b^{i+j+1} - a^{i+j+1})$$

$$b_i = \langle \psi_i, f \rangle$$

n が大きくなると，行列 *A* の条件数が悪くなる

条件数を改善: 直交多項式

- Gram-Schmidtの直交化

$$
\begin{aligned}
p_0 &= \frac{\psi_0}{\|\psi_0\|_2} \\
q_k &= \psi_k - \sum_{j=0}^{k-1} \langle \psi_k, p_j \rangle p_j \\
p_k &= \frac{q_k}{\|q_k\|_2}
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow$

直交多項式

$$\{p_k\}_{k=0}^{n}$$

L^2 ノルムの意味で最適な近似多項式

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \tilde{c}_k p_n(x) \qquad \tilde{c}_k = \langle p_k, f \rangle$$

密度関数を用いた内積・ノルム

- 有限次元の正定値対称行列 P を用いた内積

$$\langle x, y \rangle_P := x^\top P y = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} x_i y_j P_{ij}, \quad x, y \in \mathbb{R}^n$$

- 正定値対称行列の関数版

$$P(\cdot, \cdot) : [a, b] \times [a, b] \to \mathbb{R}$$

$$P(x, y) = P(y, x), \ \iint_a^b f(x) P(x, y) f(y) dx dy > 0, \ \forall f : \|f\|_2 \neq 0$$

- 内積・ノルム

$$\langle f, g \rangle_P := \iint_a^b f(x) P(x, y) g(y) dx dy, \ \|f\|_P := \sqrt{\langle f, f \rangle_P}$$

よく用いる密度関数

- 対角行列の関数版

$$P(x, y) = w(x)\delta(x - y)$$

- 関数 *w* の条件

$$\begin{cases} w(x) > 0, \quad \forall x \in [a, b] \\ \displaystyle\int_a^b x^k w(x) dx < \infty, \ \forall k \in \mathbb{N} \end{cases}$$

密度関数を用いた正規直交多項式

- Gram-Schmidt の直交化

$$p_0 = \frac{\psi_0}{\|\psi_0\|_w}$$

$$q_k = \psi_k - \sum_{j=0}^{k-1} \langle \psi_k, p_j \rangle_w p_j$$

$$p_k = \frac{q_k}{\|q_k\|_w}$$

⇒ 直交多項式

$$\{p_k\}_{k=0}^n$$

重み付き L^2 ノルムの意味で最適な近似多項式

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \tilde{c}_k p_n(x) \quad \tilde{c}_k = \langle p_k, f \rangle_w$$

直交多項式展開

- 定められた内積における直交多項式: $\{p_k\}_{k=0}^{\infty}$
- 直交多項式展開

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k p_k(x), \qquad c_k = \langle p_k, f \rangle_w$$

n 次で打ち切ると, L_2 ノルムによる *f* の最良近似多項式

非直交関数が嬉しくない例

- 次数を変えると係数を計算し直す必要がある

$$f(x) = \sin(x), \quad x \in [0, \pi]$$

$$f_1(x) = \frac{2}{\pi} + 0 \times x$$

異なる

$$f_2(x) = \frac{12(\pi^2 - 10)}{\pi^3} - \frac{60(\pi^2 - 12)}{\pi^4} x + \frac{60(\pi^2 - 12)}{\pi^5} x^2$$

直交多項式の場合

- 直交多項式

$$
\begin{cases}
p(x) = 1 \\
p_1(x) = x - \dfrac{1}{2}\pi \\
p_2(x) = x^2 - \pi x + 16\pi
\end{cases}
$$

- 増やした次数分だけ計算すればよい

$$
\begin{aligned}
f(x) &= \sin(x), \quad x \in [0, \pi] \\
f_1(x) &= c_0 p_0(x) + c_1 p_1(x) \\
f_2(x) &= c_0 p_0(x) + c_1 p_1(x) + c_2 p_2(x)
\end{aligned}
$$

本日の内容

- 特異値分解
  - dqds法
  - mdLVs法
- 関数近似
  - 有限次数の近似多項式
  - 最小二乗近似
  - 直交多項式

様々な直交多項式

- 密度関数 *w* と定義域によってバリエーション

$$
\begin{cases}
\langle p_i, p_j \rangle_w = \delta_{ij}\lambda_i, \quad \lambda_i > 0 \\
p_0(x) = \mu_0 > 0
\end{cases}
$$

直交多項式	$[a, b]$	$w(x)$	λ_n
$P_n(x) = \frac{1}{2^n(n!)}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n,$	$[-1, 1],$	$1,$	$2/(2n+1),$
$T_n(x) = \frac{(-1)^n 2^n (n!)}{(2n!)}\sqrt{1-x^2}\frac{d^n}{dx^n}(1-x^2)^{n-1/2},$	$[-1, 1],$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}},$	$\pi/2$
$L_n(x) = \frac{e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^n),$	$[0, \infty),$	$e^{-x},$	1
$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2},$	$(-\infty, \infty),$	$e^{-x^2},$	$\sqrt{\pi}2^n n!$

直交多項式の用途

- 補間問題に使いやすい（次回の講義）
- 数値積分に使いやすい
- 物理学の固有関数として現れる
  - 量子力学における水素原子のハミルトニアン

直交多項式の性質

- 直交多項式の零点は全て[*a*, *b*]内の単根
- 3項漸化式で表せる(次ページ)
- 最高次数の係数が正の直交多項式の列

$$p_n(x),\ p_{n-1}(x), \cdots,\ p_0(x)$$

は区間 [*a*, *b*] においてSturm列をなす

3項漸化式

- 直交多項式には次の3項漸化式(three term recurrence relation)が成り立つ（Lanczos過程）

$$p_k(x) =(\alpha_k x + \beta_k)p_{k-1}(x) - \gamma_k p_{k-2}(x), \quad k = 1, 2, \cdots$$
$$p_{-1}(x) =0$$

各係数は,

$$\alpha_k = \frac{\mu_k}{\mu_{k-1}}, \ \beta_k = -\frac{\alpha_k \langle x p_{k-1}, p_{k-1} \rangle_w}{\lambda_{k-1}}, \ \gamma_k = \frac{\mu_k \mu_{k-2} \lambda_{k-1}}{\mu_{k-1}^2 \lambda_{k-2}}$$

μ_k は直交多項式 p_k の最高次係数

3項漸化式：無限次行列表示

- 3項多項式の書き換え： Jacobi 行列

$$x\begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_0 & c_0 & & \\ b_0 & a_1 & c_1 & \\ & b_1 & a_2 & \ddots \\ & & b_2 & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \end{bmatrix}$$

※ 正規直交多項式の場合

$$x\begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_0 & b_0 & & \\ b_0 & a_1 & b_1 & \\ & b_1 & a_2 & \ddots \\ & & b_2 & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_0(x) \\ p_1(x) \\ \vdots \end{bmatrix}$$

直交多項式に関する参考文献

- G. Szego: *Orthogonal Polynomials*, 4th ed., American Mathematical Society (1981)
- B. Simon: *Szego's Theorem and Its Descendants: Spectral Theory for L^2 Perturbations of Orthogonal Polynomials*, Princeton University Press(2010)
- 青本 : 直交多項式入門, 数学書房 (2013)
- 伏見，赤井: 復刊 直交関数系 増補版，共立出版 (2011)