

一般逆行列 (3)

田 辺 国 士

今回は, Moore-Penrose 一般逆行列とこれに関連する計算についてのべる.

§1. 直接法による A^+ の計算法

$m \times n$ 行列 A を $m \times r$ 行列 B と $r \times n$ 行列 C の積

$$A = BC \quad (1)$$

に分解するとき, A の Moore-Penrose 逆行列は

$$A^+ = C^+ B^+ \quad (2)$$

と表現されます. 直接法による A^+ の計算はすべてこの事実にもとづいて行なわれます[3]. B と C の階数が r のときには

$$B^+ = (B^t B)^{-1} B^t, \quad C^+ = C^t (C C^t)^{-1} \quad (3)$$

となりますから, A^+ は

$$A^+ = C^t (C C^t)^{-1} (B^t B)^{-1} B^t \quad (4)$$

と表現されます.

分解(1)を実行する代表的な方法は, つぎの3つの方法です.

□ ガウス消去法

消去法によって, A は下三角行列 L と上三角行列 U の積

$$A = LU \quad (5)$$

と分解されます.

□ ハウスホルダー変換法

ハウスホルダー変換[2]によると, 直交行列 Q と $r \times n$ 上三角行列 U が定まり

$$QA = \begin{bmatrix} U \\ O \end{bmatrix} \quad (6)$$

という分解が行なわれます. Q の最初の r 行からなる部分行列を Q_r とするとき, A は

$$A = Q_r^t U \quad (7)$$

と分解されたことになりますから

$$A^+ = U^+ Q_r \quad (8)$$

となります.

□ グラム=シュミット直交化法

行列 A の列ベクトルをグラム=シュミット法で直交化すると, A は直交行列の $m \times r$ 部分行列 Q_r と $r \times n$ 上三角行列 U の積

$$A = Q_r U \quad (9)$$

に分解されます. したがって

$$A^+ = U^+ Q_r^t \quad (10)$$

となります.

これらの分解を用いて A^+ を計算するためには, $r \times n$ 上三角行列 U の Moore-Penrose 逆行列 U^+ を計算することが必要です. このために, 基本的につぎの3つの方法が考えられます[3].

□ コレスキー法

UU^t をコレスキー法で

$$UU^t = FF^t \quad (11)$$

と分解すると, 式(3)より

$$U^+ = U^t (F^{-1})^t F^{-1} \quad (12)$$

□ ハウスホルダー変換法

ハウスホルダー変換によると, 直交行列 P と, $r \times r$ 上三角行列 R が定まり

$$PU^t = \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} \quad (13)$$

という分解が行なわれます. P の最初の r 行からなる $r \times n$ 部分行列を P_r とするとき

$$U^t = P_r^t R \quad (14)$$

となり, したがって

$$U^+ = P_r^t (R^{-1})^t \quad (15)$$

となります.

□ グラム=シュミット直交化法

行列 U^t の列ベクトルをグラム=シュミット法で直交化すると, U^t は直交行列の $n \times r$ 部分行列 N と $r \times r$ 上三角行列 R の積

$$U^t = NR \quad (16)$$

に分解されます. したがって

$$U^+ = N(R^{-1})^t \quad (17)$$

となります.

これらの方法を適当に組み合わせて用いることにより A^+ の計算法がえられます。私たちの経験では、ガウス消去法とコレスキー法を組み合わせて用いるとよい結果がえられるようです[3]。

§2. 擬ニュートン法による A^+ の計算法

$m \times n$ 行列 A に対して、擬ニュートン反復公式

$$\begin{aligned} X_{i+1} &= X_i + X_i(I_m - AX_i) \\ &= X_i + (I_n - X_i A)X_i \quad (i=0, 1, 2, \dots) \\ X_0 &= \alpha A^t \end{aligned} \quad (18)$$

によって生成された $n \times m$ 行列の系列を $\{X_i\}$ とします。有限系列 $S(k)$ を

$$\begin{aligned} S(k) &\equiv \alpha \sum_{i=0}^k A^t (I_m - \alpha A A^t)^i \\ &= \alpha \sum_{i=0}^k (I_n - \alpha A^t A)^i A \end{aligned} \quad (19)$$

とおきますと

$$X_i = S(2^i - 1) \quad (20)$$

が成り立ちます。前回にものべましたが

$$0 < \alpha < 2\|A\|_2^{-2} \quad (21)$$

となる α を選ぶとき

$$\lim_{k \rightarrow \infty} S(k) = A^+ \quad (22)$$

ですから

$$\lim_{i \rightarrow \infty} X_i = A^+ \quad (23)$$

となり、反復法(18)によって、 A^+ を計算することができます[1, 4]。このとき

$$\begin{aligned} A^+ - X_i &= A^+ (I - AX_{i-1})^2 = A^+ (I - AX_0)^{2^i} \\ &= (I - X_{i-1}A)^2 A^+ = (I - AX_0)^{2^i} A^+ \end{aligned} \quad (24)$$

となり、 X_i は A^+ に 2 次収束します。式(23)より

$$\begin{aligned} \lim_{i \rightarrow \infty} X_i A &= P_{R(A^t)N(A)} \\ \lim_{i \rightarrow \infty} A X_i &= P_{R(A)N(A^t)} \end{aligned} \quad (25)$$

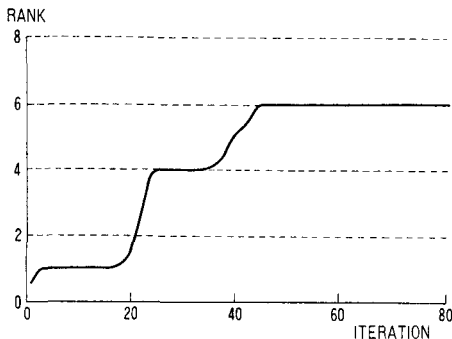


図 1 擬ニュートン法における $\text{trace } AX_i$

であることがわかりますが、さらに興味深いことには

$$\text{trace } X_i A = \text{trace } A X_i \quad (26)$$

は $l (\geq 1)$ の単調増加関数で

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \text{trace } X_l A = \lim_{l \rightarrow \infty} \text{trace } A X_l = \text{rank } A \quad (27)$$

が成り立ちます[1, 4]。したがって、反復法(18)を用いると、 A^+ のみならず、 A の階数をも計算できます。

行列 $A = (a_{ij})$ の 2 つのノルムを

$$\begin{aligned} \|A\|_\infty &\equiv \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \\ \|A\|_1 &\equiv \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \end{aligned} \quad (28)$$

と定義すると、不等式

$$\|A\|_2^2 \leq \|A\|_\infty \|A\|_1 \quad (29)$$

が成り立ちますから、不等式(21)を満たす α を容易にみつけることができます。

図 1 はある 8×8 行列 A に対して、反復法(18)を適用したときの $\text{trace } A X_i$ の動きを示したものです。この反復法の収束のしかたは、 A の特異値の分布に依存するのですが、この場合の特異値は $\sigma_1 = 8 \times 10^8$, $\sigma_2 = 5499$, $\sigma_3 = 5422$, $\sigma_4 = 5291$, $\sigma_5 = 19$, $\sigma_6 = 4$, $\sigma_7 = \sigma_8 = 0$ です[6]。

§3. 共役傾斜法と Moore-Penrose 逆行列

共役傾斜法と Moore-Penrose 逆行列は連立一次方程式の最小二乗解を介して密接に関連しています。

$m \times n$ 行列 A を係数行列とする連立一次方程式

$$Ax = b \quad (30)$$

の最小二乗解を、共役傾斜法で求めることができます。

共役傾斜法では、反復公式

$$\begin{aligned} r_0 &= b - Ax_0, \quad p_0 = A^t r_0 \\ \alpha_i &= \|A^t r_i\|_2^2 / \|A p_i\|_2^2 \\ x_{i+1} &= x_i + \alpha_i p_i \\ r_{i+1} &= b - A x_{i+1} = r_i - \alpha_i A p_i \\ \beta_i &= \|A^t r_{i+1}\|_2^2 / \|A^t r_i\|_2^2 \\ p_{i+1} &= A^t r_{i+1} + \beta_i p_i \end{aligned} \quad (31)$$

を用いて、 $p_i = 0$ となるまで、ベクトルの行列 $\{x_i\}$, $\{r_i\}$, $\{p_i\}$ が生成されます。理論的には有限回のステップ $k (< m \wedge n)$ で $p_k = 0$ となります。ただし $m \wedge n$ は m と n の小さいほうをあらわします。このとき

$$x_k = A^+ b + (I - A^+ A) x_0 \quad (32)$$

となり、連立一次方程式 (30) の最小二乗解がえられます。ただし、 x_0 は任意の初期ベクトルです。 $x_0 = 0$ と選ぶと、最小二乗解のなかで、ユークリッドノルム最小の解が生成されることになります。

(32)式の右辺の行列は

$$I - A^+A = P_{N(A)R(A^+)} \quad (33)$$

ですから、反復法(30)において $b=0$ とおけば、任意のベクトル x_0 の $N(A)$ の上への正射影が計算されます。これを応用して、確率行列の定常確率ベクトルを計算することができます。

$m \times m$ 行列 $P = (p_{ij})$ が

$$p_{ij} \geq 0, \sum_{j=1}^m p_{ij} = 1 (i=1, 2, \dots, m) \quad (34)$$

を満たすとき、 P を確率行列とよび、横ベクトル $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$ が

$$\alpha = \alpha P, \sum_{i=1}^m \alpha_i = 1, \alpha_i \geq 0 \quad (35)$$

を満たすとき、 α を P の定常確率ベクトルとよびます。定常確率ベクトル α は連立一次方程式

$$(I - P^t)\alpha^t = 0 \quad (36)$$

の解にはなりませんから、共役傾斜法(31)をこの方程式に適用することにより計算することができます。

確率行列 P が regular または cyclic ergodic である場合には、定常確率ベクトルは一意的に定まり、その各要素は正となります。このとき、反復公式(31)において

$$A = I - P^t, b = 0, x_0 = (1, 1, \dots, 1)^t \quad (37)$$

とおけば、方程式(36)の解 $x = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m)^t \neq 0$ がえられます。 $|x| \equiv \sum_{i=1}^m \xi_i$ とおくと、 $|x| \neq 0$ となり

$$\alpha = x/|x| \quad (38)$$

は、 P の定常確率ベクトルとなります。 P が一般の確率行列の場合に関しては文献[7]でのべてあります。数値計画法における Gradient Projection の計算にも共役傾斜法を用いることができます[8]。

Moore-Penrose 逆行列 A^+ は、 $n \times m$ 行列 X の二次関数

$$\|I_m - AX\|_F^2 \text{ または } \|I_n - XA\|_F^2 \quad (39)$$

を最小にする X のなかで、フロベニウス・ノルム $\|X\|_F \equiv (\text{trace } X^t X)^{1/2}$ が最小となる唯一の行列 X として特徴づけられます。この性質を利用すると A^+ を計算する行列の共役傾斜法がえられます。すなわち

共役傾斜反復公式

$$\begin{aligned} R_r^{(0)} &= I_m - AX_0 \\ P_r^{(0)} &= A^t R_r^{(0)} \\ \alpha_i &= \|A^t R_r^{(i)}\|_F^2 / \|AP_r^{(i)}\|_F^2 \\ X_{i+1} &= X_i + \alpha_i P_r^{(i)} \\ R_r^{(i+1)} &= I_m - AX_{i+1} = R_r^{(i)} - \alpha_i AP_r^{(i)} \\ \beta_i &= \|A^t R_r^{(i+1)}\|_F^2 / \|A^t R_r^{(i)}\|_F^2 \\ P_r^{(i+1)} &= A^t R_r^{(i+1)} + \beta_i P_r^{(i)} \end{aligned} \quad (40)$$

を用いて、 $P_r^{(i)} = 0$ となるまで、行列の系列 $\{X_i\}$, $\{R_r^{(i)}\}$, $\{P_r^{(i)}\}$ を計算します。ただし I_m は m 次の単位行列とします。理論的には有限回のステップ $k (k < m \wedge$

$n)$ で $P_r^{(k)} = 0$ となり、このとき

$$X_k = A^+ + (I_m - A^+A)X_0 \quad (41)$$

が成り立ちます。 X_k は A の最小二乗型一般逆行列です。反復公式(40)と双対な公式をもつことができますがそれは A のノルム最小型一般逆行列を生成します[6]。

いずれの公式においても初期行列を $X_0 = 0$ とするとき、Moore-Penrose 逆行列 A^+ が生成されます。このとき

$$\text{trace } AX_i = m - \|R_r^{(i)}\|_F^2 \quad (42)$$

が成り立ち、これは、 k の単調増加関数となることは先にのべた擬ニュートン法の場合と同じです[6]。また、 $X_i \equiv X_k (i > k)$ と解釈すると、この場合にも式(25), (27)が成り立ちます。前節にのべた 8×8 行列に、共役傾斜法(40)を適用したときの $\text{trace } AX_i$ の動きを示したものが図2です。(完)

なお前回の(29)式の V^t は U^t の誤りでしたのでお詫びして訂正いたします。

参 考 文 献

- [1] Ben-Israel, A. and Cohen, D., SIAM Jour. Numer. Anal., 3, (1966) pp. 410-419.
- [2] 渋谷政昭, 応用統計学, (1971) pp. 3-16.
- [3] N. Shinozaki, M. Sibuya and K. Tanabe, Ann. Inst. Statist. Math. 24, (1972) pp. 193-203.
- [4] N. Shinozaki, M. Sibuya and K. Tanabe, Ann. Inst. Statist. Math. 24, (1972) pp. 621-629.
- [5] K. Tanabe, Linear Algebra and its Appl. 10, (1975) pp. 163-175.
- [6] K. Tanabe, to appear in J. Optimization Th. and Appl.
- [7] K. Tanabe, Inst. Statist. Math. Res. Memo. no. 72, (1975)
- [8] 田辺国土, 微分方程式による数値計画法へのアプローチ, 数理科学, 予定 (1976. 7).

(たなべ・くにお 統計数理研究所)

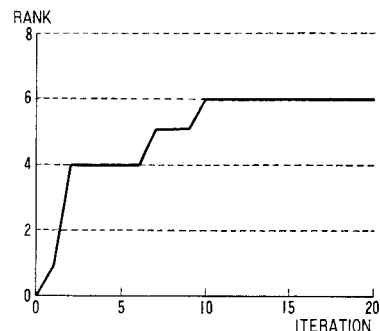


図 2 CG法における $\text{trace } AX_i$