

MATLAB による連立一次方程式の解法

ベクトルと行列のノルム

ベクトル x の p -ノルムは、つぎのように定義され、

$$\|x\|_p = \left(\sum |x_i|^p \right)^{1/p}$$

`norm(x, p)` で計算されます。これは、 $p > 1$ を満足する任意の値で定義されていますが、実際に使う p の値は、1、2、および ∞ です。デフォルト値は $p = 2$ で、ユークリッド長に対応しています。

- `v = [2 0 -1];`
- `[norm(v, 1) norm(v) norm(v, inf)]`
-
- `ans =`
- `3.0000 2.2361 2.0000`

行列 A の p -ノルム

$$\|A\|_p = \max_x \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p}$$

は $p = 1, 2, \infty$ について `norm(A, p)` で計算されます。ここでもデフォルト値は $p = 2$ です。

- `C = fix(10*rand(3, 2));`
- `[norm(C, 1) norm(C) norm(C, inf)]`
-

- ans =
- 19.0000 14.8015 13.0000

線型方程式の解法

技術計算の中で最も重要な問題の一つは、連立線形方程式を解くことです。行列表記法では、この問題はつぎのように記述できます。

2つの行列 A と B があるとき、 $AX = B$ または $XA = B$ の条件のいずれかを満たす一意の行列 X は存在しますか。

1行1列の簡単な例を考えましょう。

つぎの方程式

- $7x = 21$

に、一意の解はありますか。

もちろん、あります。方程式には、一意の解 $x = 3$ があります。解は割り算によって簡単に得られます。

- $x = 21/7 = 3$

解を求める際には通常 7 の逆数、すなわち $7^{-1} = 0.142857\cdots$ を計算し、この 7^{-1} に 21 を乗算する方法は使いません。この方法では余計な計算ステップが必要となり、 7^{-1} を有限の小数値で打ち切ると精度も落ちます。複数の未知数がある連立方程式にも同様な考えを適用します。

MATLAB では、このような方程式を逆行列を使わずに解きます。

標準の数学的な記法ではありませんが、MATLAB ではスカラの場合と同じ除算記号を使って、一般的な連立方程式の解を記述します。2つの除算記号、スラッシュ/とバックスラッシュ¥は、それぞれ未知行列が係数行列の左または右からかかっている場合に使用します。

$X = A \backslash B$ 行列方程式 $AX = B$ の解です。

$X = B / A$ 行列方程式 $XA = B$ の解です。

$AX = B$ または $XA = B$ の方程式の両側を A で割ることを考えてください。係数行列 A は、常に分母になります。

$X = A \backslash B$ に対する次元の整合性条件は、2つの行列 A と B の行数が同じであることです。その結果、解 X は、 B と同じ列数になり、行次元は A の列次元と等しくなります。 $X = B / A$ においては、行と列の役割は反転します。

実際に、 $AX = B$ の形式の線形方程式は、 $XA = B$ の形式のものよりも頻繁に発生します。したがって、バックスラッシュはスラッシュよりも頻繁に使われます。この節の残りの部分では、バックスラッシュ演算子を中心に説明します。スラッシュ演算子の対応特性は、つぎの等式から推定できます。

- $(B/A)' = (A' \backslash B')$

係数行列 A は、正方である必要はありません。 A が m 行- n 列の行列の場合、つぎの3つのケースが考えられます。

$m = n$ 正方システム。厳密解が得られます。

$m > n$ 過多システム。最小二乗解を求めます。

$m < n$ 過少システム。最大で m 個のゼロでない構成要素をもつ基本解を求めます。

バックslash演算子は、さまざまなアルゴリズムでさまざまなタイプの係数行列を取り扱います。

一般解

線形方程式システム $AX = b$ の一般解では、すべての可能な解を記述しています。つぎのようにして、一般解を導出することができます。

1. 対応する同次方程式 $AX = 0$ を解きます。 `null(A)` と入力し、`null` コマンドを使って作成します。 $AX = 0$ としての解空間の基底が返されます。解はすべて、基底ベクトルの線形結合になります。
2. 非同次方程式 $AX = b$ の特殊解を導出します。

$AX = b$ の解はすべて、ステップ 2 からの $AX = b$ の特殊解に、ステップ 1 からの基底ベクトルの線形結合を加えたものとして表わせます。

正方システム

共通点は、正方係数行列 A と単一右辺列ベクトル b を含んでいる点です。

特異でない係数行列

行列 A が特異でない場合、 $x = A \setminus b$ は、 b と同じサイズになります。たとえば、

- $A = \text{pascal}(3);$
- $u = [3; 1; 4];$
- $x = A \setminus u$
-
- $x =$
- $\quad 10$
- $\quad -12$
- $\quad 5$

$A * x$ が、 u と完全に一致することを確認してください。

A と B が正方で同じサイズの場合は、 $X = A \setminus B$ も同じサイズになります。

- $B = \text{magic}(3);$
- $X = A \setminus B$
-
- $X =$
- $\quad 19 \quad -3 \quad -1$
- $\quad -17 \quad 4 \quad 13$
- $\quad 6 \quad 0 \quad -6$

$A * X$ が B と完全に一致することを確認してください。

これら 2 つの例題は、厳密な意味で整数解になります。これは係数行列が pascal (3) として選択されたためです。すなわち、この行列の行列式は 1 になっているためです。節の後半で、丸め誤差の影響を考えてより現実的な計算を考えます。

特異な係数行列

正方行列 A が線形に独立した列をもっていない場合を、特異 といいます。 A が特異な場合、 $AX = B$ での解は存在しないかまたは一意な解ではありません。 バックスラッシュ演算 $A \setminus B$ は、 A が特異に近い場合には警告を出し、完全に特異である場合はエラーを発生します。

A が特異で $AX = b$ が解をもつ場合は、つぎのように入力することで一意ではない特殊解を導出できます。

- $P = \text{pinv}(A) * b$

P は A の擬似逆行列です。 $AX = b$ が厳密解でない場合、 $\text{pinv}(A)$ は最小二乗解を出力します。

たとえば、

- $A = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 7 \\ -1 & 4 & 4 \\ 1 & 10 & 18 \end{bmatrix}$

が特異であることは、つぎのように入力することでわかります。

- $\det(A)$

-
- ans =
- 0

注意 長方形係数行列をもつシステムを解くための [pinv](#) の使用方法については、["擬似逆行列"](#)を参照してください。

厳密解 $b = [5; 2; 12]$ に対して、方程式 $AX = b$ はつぎのような厳密解をもちます。

- $\text{pinv}(A)*b$
-
- ans =
- 0.3850
- -0.1103
- 0.7066

つぎのように入力して、 $\text{pinv}(A)*b$ が厳密解であることを確かめることができます。

- $A*\text{pinv}(A)*b$
-
- ans =
- 5.0000
- 2.0000
- 12.0000

最小二乗解 一方、 $b = [3;6;0]$ の場合、 $AX = b$ は厳密解をもちません。
この場合、 $\text{pinv}(A)*b$ は最小二乗解を出力します。つぎのように入力すると、

- `A*pinv(A)*b`
-
- `ans =`
- `-1.0000`
- `4.0000`
- `2.0000`

元のベクトル b には戻りません。

$AX = b$ が厳密解であるかどうかは、拡大係数行列 $[A \ b]$ を階段型行列に変換することによって判断できます。つぎの例題で以下のように入力します。

- `rref([A b])`
- `ans =`
- `1.0000 0 2.2857 0`
- `0 1.0000 1.5714 0`
- `0 0 0 1.0000`

一番下の行は最後のエントリ以外はすべてゼロであるため、方程式は解をもちません。この例題の場合、 $\text{pinv}(A)$ は最小二乗解を出力します。

過多システム

連立線形方程式の過剰システムは、実験データの種々の曲線近似で使われています。ここでは、仮想の例題を考えてみます。値 y は時刻 t のさまざまな値で測定されたもので、観測値はつぎのとおりです。

t y

0.0 0.82

0.3 0.72

0.8 0.63

1.1 0.60

1.6 0.55

2.3 0.50

このデータを、MATLAB につぎのステートメントで入力します。

- $t = [0 \ .3 \ .8 \ 1.1 \ 1.6 \ 2.3]'$;
- $y = [.82 \ .72 \ .63 \ .60 \ .55 \ .50]'$;

このデータを、指数的に減衰する関数でモデル化します。

- $y(t) \approx c_1 + c_2 e^{-t}$

この方程式は、ベクトル y を、定数 1 を含む定数ベクトルと構成要素 e^{-t} をもつベクトルの 2 つのベクトルの線形結合で近似するものです。未知係数 c_1 と c_2 は、モデルとデータとの偏差の二乗和を最小にする最小二

乗 を行うことで計算します。2つの未知数をもつ6つの方程式が、6行2列の行列で表されます。

- $E = [\text{ones}(\text{size}(t)) \exp(-t)]$
-
- $E =$
- | | |
|--------|--------|
| 1.0000 | 1.0000 |
|--------|--------|
- | | |
|--------|--------|
| 1.0000 | 0.7408 |
|--------|--------|
- | | |
|--------|--------|
| 1.0000 | 0.4493 |
|--------|--------|
- | | |
|--------|--------|
| 1.0000 | 0.3329 |
|--------|--------|
- | | |
|--------|--------|
| 1.0000 | 0.2019 |
|--------|--------|
- | | |
|--------|--------|
| 1.0000 | 0.1003 |
|--------|--------|

最小二乗解はバックスラッシュ演算子で求めます。

- $c = E \backslash y$
-
- $c =$
- | |
|--------|
| 0.4760 |
|--------|
- | |
|--------|
| 0.3413 |
|--------|

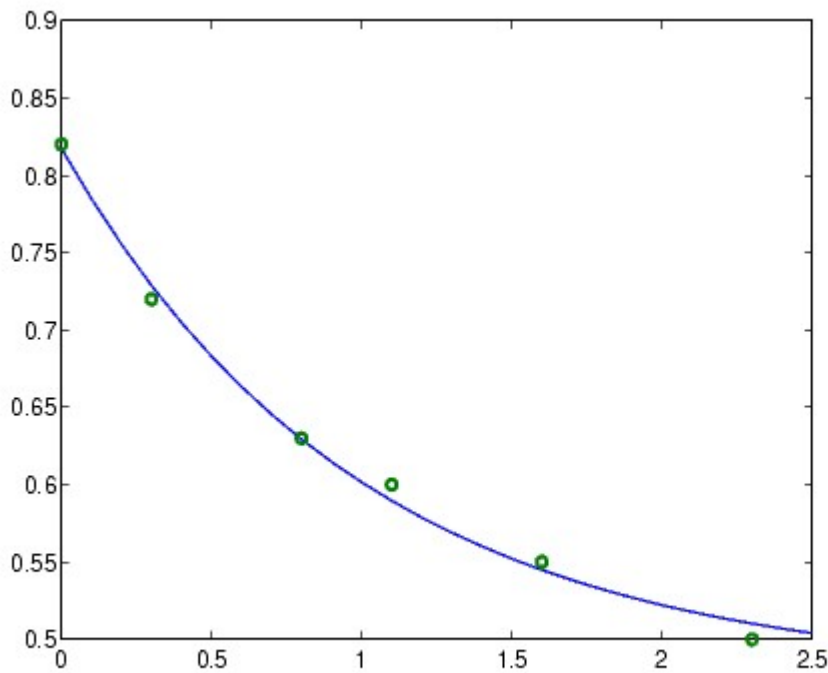
別な表現をすると、データの最小二乗適合はつぎのように表せます。

- $y(t) \approx 0.4760 + 0.3413 e^{-t}$

つぎのステートメントは、定間隔に刻まれた時刻 t についてモデルを計算し、元のデータと共に結果をプロットします。

- $T = (0:0.1:2.5)'$;
- $Y = [\text{ones}(\text{size}(T)) \exp(-T)]*c$;
- $\text{plot}(T, Y, '-'$, $t, y, 'o')$

$E*c$ は、 y と全く同じではありませんが、その違いは、元データに含まれる測定誤差よりもかなり小さいものです。



長方形行列 A は、線形に独立していない列があると、ランク落ち になります。 A がランク落ちの場合、 $AX = B$ の最小二乗解は一意ではなくなります。 バックスラッシュ演算子 $A \setminus B$ は、 A がランク落ちの場合に警告を出し、最大 $\text{rank}(A)$ のゼロ以外の最小二乗解を生成します。

過少システム

過少線形システムは、方程式の数より未知数の数が多いシステムです。付加的な制約を追加すると、線形計画法 になります。 バックスラッシ

演算子自体は、制約のないシステムのみを取り扱います。解が一意となることはありません。MATLAB は、**基本解**を求めます。この解は最大 m のゼロ以外の構成要素をもちますが、この解も一意にはなりません。実際に計算される特殊解は、列ピボットを使った QR 因子分解(後半の QR 因子分解を参照)で決定されます。

ここで、小さいランダム行列の例題を考えます。

- `R = fix(10*rand(2,4))`
-
- `R =`
- | | | | |
|---|---|---|---|
| 6 | 8 | 7 | 3 |
| 3 | 5 | 4 | 1 |
-
- `b = fix(10*rand(2,1))`
- `b =`
- | |
|---|
| 1 |
| 2 |
-

線形方程式 $Rx = b$ が、4つの未知数をもつ2つの方程式を含むものとして、係数行列には小さな整数が含まれるため、[format](#) コマンドを使用して解を *rational* 形式で表示するのが適切です。特殊解がつぎのステートメントで得られます。

- `format rat`
- `p = R\b`

- $p =$
- 0
- $5/7$
- 0
- $-11/7$

$R(:, 2)$ は最大ノルムをもつ R の列であるため、ゼロ以外の構成要素の1つは $p(2)$ です。 $R(:, 2)$ を取り除くと $R(:, 4)$ が優位になるため、ほかのゼロ以外の構成要素は $p(4)$ になります。

過少システムの完全な解は、ヌル空間の任意のベクトルを付加することによって特徴付けられます。それは、“有理”基底を求めるようにオプション指定した関数 `null` を使って求めることができます。

- $Z = \text{null}(R, 'r')$
- $Z =$
- $\begin{matrix} -1/2 & -7/6 \\ -1/2 & 1/2 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{matrix}$

$R*Z$ がゼロになり、任意のベクトル q に対する

- $x = b + Z*q$

任意のベクトル x が $R*x = b$ を満足します。

逆行列と行列式

この節では、つぎの内容を説明します。

- 線形方程式の正則なシステムを解く [逆行列と行列式の使用法の概要](#)
- 線形方程式の長方形システムを解く [Moore-Penrose 擬似逆行列の説明](#)

概要

A が正方で特異でない場合、方程式 $AX = I$ と $XA = I$ は同じ解 X となります。この解は A の逆行列 と呼ばれ、 A^{-1} で表し、関数 `inv` で計算できます。行列の *行列式* は理論的な考察やある種の数式計算で利用可能ですが、そのスケールリングや丸め誤差の特性が、数値的な計算の信頼性を低下させます。その条件下で、関数 `det` は正方行列の行列式を計算します。

- $A = \text{pascal}(3)$
-
- $A =$
- $\begin{matrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 6 \end{matrix}$
- $d = \det(A)$
- $X = \text{inv}(A)$
-
- $d =$

- 1
-
- $X =$
- 3 -3 1
- -3 5 -2
- 1 -2 1

また、A は対称で整数要素をもち、行列式が 1 であるため、逆行列も整数要素になります。一方、

- $B = \text{magic}(3)$
-
- $B =$
- 8 1 6
- 3 5 7
- 4 9 2
- $d = \det(B)$
- $X = \text{inv}(B)$
-
- $d =$
- -360
-
- $X =$
- 0.1472 -0.1444 0.0639
- -0.0611 0.0222 0.1056

- $$\begin{matrix} -0.0194 & 0.1889 & -0.1028 \end{matrix}$$

Xの要素を細かくチェックする、または `format rat` を使用すると、これらは 360 で割った整数であることがわかります。

A が正方で特異でない場合に丸め誤差を無視すると、理論的には $X = \text{inv}(A)*B$ は $X = A \setminus B$ と等価で、 $Y = B*\text{inv}(A)$ は $Y = B/A$ と等価です。ただし、バックスラッシュとスラッシュを含む計算の方が優れています。これは、計算時間および使用メモリが小さく、かつエラーの検出が容易であるという特性があるためです。

擬似逆行列

長方形行列は、逆行列または行列式をもたないことがあります。少なくとも方程式 $AX = I$ と $XA = I$ のいずれかが解をもちません。逆行列に対する部分置換は *Moore-Penrose 擬似逆行列* にて指定され、関数 [pinv](#) で計算されます。

- $C = \text{fix}(10*\text{rand}(3, 2));$
- $X = \text{pinv}(C)$
-
- $X =$
- $$\begin{matrix} 0.0401 & -0.1492 & 0.1050 \\ 0.0110 & 0.1657 & -0.0055 \end{matrix}$$

行列

- $Q = X*C$

-
- $Q =$
- $\begin{matrix} 1.0000 & 0.0000 \\ 0.0000 & 1.0000 \end{matrix}$

は2行2列の単位行列になりますが、行列

- $P = C*X$
-
- $P =$
- $\begin{matrix} 0.2044 & 0.0663 & 0.3978 \\ 0.0663 & 0.9945 & -0.0331 \\ 0.3978 & -0.0331 & 0.8011 \end{matrix}$

は3行3列の単位行列ではありません。ただし、Pは対称で、 $P*C$ はCに等しく、 $X*P$ はXに等しいという意味では、Pはその空間の一部で単位行列のように機能します。

フルランクでないシステムに対する解法

A が $m \times n$ の m 行 n 列で、フルランク n の場合、つぎの3つの各ステートメントは、

- $x = A \setminus b$
- $x = \text{pinv}(A) * b$
- $x = \text{inv}(A' * A) * A' * b$

理論的には、同じ最小二乗解 x を計算します。ただし、バックスラッシュ演算子の方が高速で処理できます。

ただし、 A がフルランクでないと、最小二乗問題に対する解は一意ではなくなります。つぎの値を最小にするベクトル x は多数あります。

- $\text{norm}(A*x - b)$

$x = A \setminus b$ によって計算される解が基本解です。この解は、 r を A のランクとすると、最大 r 個のゼロ以外の構成要素をもちます。 $x = \text{pinv}(A) * b$ によって計算される解は $\text{norm}(x)$ を最小にするため、最小ノルム解といえます。 $A' * A$ が特異であるため、 $x = \text{inv}(A' * A) * A' * b$ を使って解を計算しても失敗します。

種々の解を示す例題を示します。

- $A = [1 \ 2 \ 3$
- $4 \ 5 \ 6$
- $7 \ 8 \ 9$
- $10 \ 11 \ 12]$

は、フルランクではありません。2 番目の列は、1 番目の列と 3 番目の列の平均になっています。ここで

- $b = A(:, 2)$

が2番目の列の場合、 $A*x = b$ になる解は $x = [0 \ 1 \ 0]'$ になります。ただし、この x を計算する方法はありません。バックslash演算子は、つぎの結果を出力します。

- $x = A \backslash b$
-
- Warning: Rank deficient, rank = 2.
-
- $x =$
- 0.5000
- 0
- 0.5000

この解は、2つのゼロ以外の構成要素をもっています。擬似逆行列のアプローチはつぎのようになります。

- $y = \text{pinv}(A) * b$
-
- $y =$
- 0.3333
- 0.3333
- 0.3333

ランクの欠落に対する警告はありません。ただし、 $\text{norm}(y) = 0.5774$ は $\text{norm}(x) = 0.7071$ よりも小さくなっています。最後に、

- $z = \text{inv}(A' * A) * A' * b$

は全く動作しません。

- Warning:Matrix is singular to working precision.
-
- z =
- Inf
- Inf
- Inf

コレスキ、LU、およびQR分解

MATLAB の線形方程式の数値計算は、3つの基本的な行列分解をベースにしています。

- [対称、正定行列に対してはコレスキ分解](#)
- [一般的な正方行列に対してはLU分解\(Gauss 消去法\)](#)
- [長方形行列に対してはQR\(直交化\)](#)

これら3つの因子分解は、関数 chol、lu、および qr を使って行われます。

これらの3つの因子分解では、対角要素の上部または下部のいずれかの要素がすべてゼロである三角行列を使います。三角行列を含む線形方程式システムは、前置代入 または後退代入 のいずれかを使って、簡単かつ高速で解かれます。

コレスキ分解

コレスキ分解は、対称行列を三角行列とその転置行列との積として表現します。

- $A = R'R$

ここで、 R は上三角行列です。

対称行列すべてがこの方法で分解できるわけではありません。すなわち、因子分解による行列は正定行列である必要があります。これは、 A の対角要素はすべて正で、非対角要素はあまり大きくないということです。

Pascal 行列は興味のある例題です。この章を通して、例題の行列 A は 3 行 3 列の Pascal 行列です。一時的に、6 行 6 列の行列を考えてみましょう。

- $A = \text{pascal}(6)$

-

- $A =$

- $\begin{matrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} 1 & 3 & 6 & 10 & 15 & 21 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} 1 & 4 & 10 & 20 & 35 & 56 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} 1 & 5 & 15 & 35 & 70 & 126 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} 1 & 6 & 21 & 56 & 126 & 252 \end{matrix}$

A の要素は二項係数になります。各要素は、その上と左の要素の和になります。コレスキ分解はつぎのようになります。

- $R = \text{chol}(A)$
-
- $R =$
- $\begin{matrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 6 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix}$

要素は再び二項係数になっています。 $R' * R$ が A に等しいことは、二項係数の積の和を含んでいることを示すものです。

注意 コレスキ分解は、複素数行列にも適用できます。コレスキ分解を行った複素数行列は $A' = A$ を満たし、*Hermitian positive definite* といわれます。

コレスキ分解を使用すると、つぎの線形システム

- $Ax = b$

を、つぎの式で置き換えることができます。

- $R'Rx = b$

バックスラッシュ演算子は三角システムを見分けることができるため、つぎのようにして高速に解くことができます。

- $x = R \backslash (R' \backslash b)$

A が n 行 n 列の行列の場合、chol(A) の計算の複雑さは $O(n^3)$ になりますが、バックスラッシュによる解の複雑さは $O(n^2)$ だけです。

LU 分解

LU 分解またはガウス消去法は、下三角行列の置換行列と上三角行列の積で表される任意の正方行列 A を表します。

- $A = LU$

ここで、 L は対角要素に 1 をもつ下三角行列を並べ替えたもので、 U は上三角行列です。

並べ替えは、理論上および計算上の双方の理由から必要です。行列

- $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

は、2 つの行を交換しないで三角行列の積として表現することはできません。ただし、行列

- $\begin{bmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

は、三角行列の積として表すことができます。 ϵ が小さい場合、因子内の要素は大きくなり誤差も大きくなります。この組み替えは厳密には必要ないとしても、望ましいものです。部分的なピボットは L の要素の

大きさを1以下に制限し、 U の要素は A の要素より大きくなるようにします。

たとえば、つぎのようになります。

- $[L, U] = \underline{lu}(B)$
-
- $L =$
- $\begin{matrix} 1.0000 & 0 & 0 \\ 0.3750 & 0.5441 & 1.0000 \\ 0.5000 & 1.0000 & 0 \end{matrix}$
-
- $U =$
- $\begin{matrix} 8.0000 & 1.0000 & 6.0000 \\ 0 & 8.5000 & -1.0000 \\ 0 & 0 & 5.2941 \end{matrix}$

A のLU分解によって、線形システム

- $A*x = b$

は、つぎの式を使用して迅速に解けるようになります。

- $x = U \backslash (L \backslash b)$

行列式と逆行列は、つぎの関係を使ってLU分解から計算されます。

- $\det(A) = \det(L) * \det(U)$

および

- $\text{inv}(A) = \text{inv}(U) * \text{inv}(L)$

$\det(A) = \text{prod}(\text{diag}(U))$ を使用して行列式を計算することもできますが、行列式の符号が逆になる場合もあります。

QR 分解

直交行列または直交性の列をもつ行列は、各列が単位長さをもち、相互に直交関係になる実数行列に分解されます。 Q が直交であれば、

- $Q'Q = 1$

になります。最も簡単な直交行列は、2次元の座標回転変換に使うものです。

$$\begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

複素数行列に対して、対応する概念はユニタリです。直交ユニタリ行列は長さや角度が保存され誤差が大きくならないため、数値計算に対して望ましいものです。

直交または QR 分解は、任意の直交行列を、1つの直交行列またはユニタリ行列と1つの上三角行列の積で表現します。列の置換も含まれています。

- $A = QR$

または

- $A P = Q R$

ここで、 Q は直交またはユニタリ行列、 R は上三角行列、 P は置換行列です。

QR分解には、フルサイズとエコノミサイズ、列置換をもつものともたないものの、4つの種類があります。

過多線形システムは、列よりも多くの行をもつ長方形行列を含んでいます。すなわち、 m 行 n 列で $m > n$ です。フルサイズQR分解は、 m 行 m 列の正方直交行列 Q と m 行 n 列の上三角行列 R の積になります。

- $[Q, R] = \text{qr}(C)$

-

- $Q =$

- $\begin{matrix} -0.8182 & 0.3999 & -0.4131 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} -0.1818 & -0.8616 & -0.4739 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} -0.5455 & -0.3126 & 0.7777 \end{matrix}$

-

- $R =$

- $\begin{matrix} -11.0000 & -8.5455 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} 0 & -7.4817 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} 0 & 0 \end{matrix}$

多くの場合、 Q の最後の $m - n$ 列は R の下部にゼロを乗算することになるため、必要ありません。したがって、エコノミ サイズの QR 分解は、直交要素をもつ m 行 n 列の長方形行列 Q と、正方の n 行 n 列の上三角行列 R の積で表されます。ここでの 3 行 2 列の例題ではあまり大きな影響はありませんが、非常に大きい長方形行列の場合は、時間とメモリの節約になり非常に重要になります。

- $[Q, R] = \text{qr}(C, 0)$
-
- $Q =$
- -0.8182 0.3999
- -0.1818 -0.8616
- -0.5455 -0.3126
-
- $R =$
- -11.0000 -8.5455
- 0 -7.4817

LU 分解とは異なり、QR 分解ではピボットや置換は必要ありません。ただし、オプションの列の置換は設定した 3 番目の引数に出力され、特異性を見つけたりランク落ちを調べる場合に便利です。因子分解の各ステップで、大きなノルムをもつ残りの分解されていない行列の列が、そのステップでの基底として使われます。この計算方法により、 R の対角要素を小さい順に並べることができ、かつ要素間の関係性を調べることによって、各列の間に存在する線形依存性を明らかにすることができます。

この簡単な例題では、Cの2番目の列は1番目の列のノルムよりも大きいノルムをもちます。そこで、2つの列を交換します。

- $[Q, R, P] = \text{qr}(C)$

-

- $Q =$

- $\begin{matrix} -0.3522 & 0.8398 & -0.4131 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} -0.7044 & -0.5285 & -0.4739 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} -0.6163 & 0.1241 & 0.7777 \end{matrix}$

-

- $R =$

- $\begin{matrix} -11.3578 & -8.2762 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} 0 & 7.2460 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} 0 & 0 \end{matrix}$

-

- $P =$

- $\begin{matrix} 0 & 1 \end{matrix}$

- $\begin{matrix} 1 & 0 \end{matrix}$

エコノミサイズと列の置換を組み合わせると、3番目の引数は置換行列でなく置換ベクトルになります。

- $[Q, R, p] = \text{qr}(C, 0)$

-

- $Q =$

- $\begin{matrix} -0.3522 & 0.8398 \end{matrix}$

- $-0.7044 \quad -0.5285$
- $-0.6163 \quad 0.1241$
-
- $R =$
- $-11.3578 \quad -8.2762$
- $0 \quad 7.2460$
-
-
- $p =$
- $2 \quad 1$

QR 分解では、過多線形システムを等価な三角システムに変換します。つぎの式

- $\text{norm}(A*x - b)$

は、つぎの式と等価です。

- $\text{norm}(Q*R*x - b)$

直交行列の乗算はユークリッドノルムを保存するため、この式はつぎのものとも等価です。

- $\text{norm}(R*x - y)$

ここで、 $y = Q' * b$ です。 R の最後の $m-n$ 行はゼロであるため、この式は2つの部分に分けられます。

- $\text{norm}(R(1:n, 1:n)*x - y(1:n))$

および

- $\text{norm}(y(n+1:m))$

Aがフルランクのときは、xに対して解くことができ、最初の式はゼロです。つぎに、2番目の式が残差のノルムを指定します。Aがフルランクでないときは、Rの三角構造は最小二乗問題に対する基本解を探します。

特異値分解

長方形行列 A の特異値 と対応する特異ベクトル は、スカラー σ と、 u と v の 1 組のベクトルで表され、つぎの式を満たします。

$$Av = \sigma u$$

$$A^T u = \sigma v$$

対角行列の対角要素に特異値を配置し、 Σ 対応する 2 つの直交行列の列からなる特異ベクトルを U および V とすると、つぎのような関係になります。

$$AV = U\Sigma$$

$$A^T U = V\Sigma$$

U と V は直交であるため、これは特異値分解 になります。

$$A = U\Sigma V^T$$

m 行 n 列の行列のフル特異値分解は、 m 行 m 列の U 、 m 行 n 列の Σ 、および n 行 n 列の V になります。言い換えれば、 U と V は共に正方で、 Σ は A と同じサイズです。 A が列数より行数のほうが多いと、結果 U は非常に大きくなりますが、その列の大部分は、 Σ の中のゼロと乗算されます。このような場合、エコノミ サイズの分解は、 m 行 n 列の U 、 n 行 n 列の Σ 、および同じ大きさの V を作成し、計算時間もメモリサイズも節約します。

ある行列が常微分方程式を表現するように、あるベクトル空間からそれ自体へのマッピングを表すとき、固有値分解はその行列を解析するのに

適切な方法です。一方、特異値分解は、一つのベクトル空間をほかのベクトル空間へマッピングする行列を解析する適切なツールです。これは、異なる次元についても取り扱えます。ほとんどの連立方程式システムは、この2番目のカテゴリに入ります。

A が正方、対称、かつ正定の場合は、この固有値と特異値分解は等しくなります。ただし、 A が対称および正定でなくなると、2つの分解の結果のズレは大きくなります。特に、実数行列の特異値分解は常に実数ですが、実数で非対称行列の特異値は複素数になることもあります。

例題の行列に対して、

- $A =$
- $\begin{matrix} 9 & 4 \\ 6 & 8 \\ 2 & 7 \end{matrix}$

フル特異値分解は、つぎのようになります。

- $[U, S, V] = \text{svd}(A)$
- $U =$
- $\begin{matrix} -0.6105 & 0.7174 & 0.3355 \\ -0.6646 & -0.2336 & -0.7098 \\ -0.4308 & -0.6563 & 0.6194 \end{matrix}$
- $S =$
- $\begin{matrix} 14.9359 & & 0 \\ & 0 & 5.1883 \end{matrix}$

- $$\begin{matrix} & 0 & 0 \\ & & \end{matrix}$$
- $$V =$$
- $$\begin{matrix} & -0.6925 & 0.7214 \\ & -0.7214 & -0.6925 \end{matrix}$$

$U*S*V'$ が、丸め誤差の範囲内で A に等しいことを確かめることができます。この小さな問題に対しては、エコノミーサイズでの分解はわずかで、使用メモリサイズを小さくできます。

- $$[U, S, V] = \text{svd}(A, 0)$$
- $$U =$$
- $$\begin{matrix} & -0.6105 & 0.7174 \\ & -0.6646 & -0.2336 \\ & -0.4308 & -0.6563 \end{matrix}$$
- $$S =$$
- $$\begin{matrix} 14.9359 & 0 \\ 0 & 5.1883 \end{matrix}$$
- $$V =$$
- $$\begin{matrix} & -0.6925 & 0.7214 \\ & -0.7214 & -0.6925 \end{matrix}$$

$U*S*V'$ が、丸め誤差の範囲内で A に等しいことを再確認します。