計算数理工学論文集 Vol. 17 (2017 年 12 月)，論文 No. 08–171215 JASCOME

打ち切り特異値分解による連立１次方程式の非斉次項の復元

RECONSTRUCTION OF THE NON-HOMOGENEOUS TERM OF SIMULTANEOUS LINEAR EQUATIONS USING THE TRUNCATED SINGULAR VALUE DECOMPOSITION

繁田 岳美

Takemi SHIGETA

昭和薬科大学 応用数学研究室 (〒194–8543 東京都町田市東玉川学園 3 丁目 3165 番地, E-mail: shigeta@ac.shoyaku.ac.jp)

Simultaneous linear equations with a non-singular square matrix as a coefficient matrix have a unique solution. When the condition number of the matrix is large, a small noise contained in the non-homogeneous term of the right-hand side retains the potential to affect sensitively on the accuracy of the solution. A regularization method can then be applied to the simultaneous linear equations to obtain a regularized solution of which the change is sufficiently small for the noise of the non-homogeneous term. In this study, the non-homogeneous term such that the regularized solution (almost) coincides with the conventional exact one is defined to be “exact”. The purpose of the study is to reconstruct the unknown “exact” non-homogeneous term from the regularized solution obtained by the truncated singular value decomposition as a regularization method. Based on simple numerical experiments, it is concluded that the “exact” non-homogeneous term reconstructed from the noisy one is the best approximation to the exact one.

Key Words : Truncated singular value decomposition, Regularized solution, Moore-Penrose pseudo-inverse matrix, Exact non-homogeneous term

1. はじめに

正則な行列 A に対して，連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の右辺が $\Delta\boldsymbol{b}$ だけ微小変化したとき，解は $\Delta\boldsymbol{x}$ だけ変化したとすると，$A(\boldsymbol{x} + \Delta\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}$ である．簡単な計算により，以下の不等式を得る:

$$\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \le \|A\|\|A^{-1}\|\frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}. \tag{1}$$

行列 A の条件数は $\mathrm{cond}(A) := \|A\|\|A^{-1}\|$ と定められる．(1) より，条件数が小さければ，$\boldsymbol{b}$ の微小変化に対して解 $\boldsymbol{x}$ の相対変化は小さいことがわかる．一方，条件数が大きければ，$\boldsymbol{b}$ の微小変化に対して解 $\boldsymbol{x}$ の相対変化が大きくなる恐れがある．条件数が大きいとき，連立 1 次方程式は悪条件であるという．正則化法 [1] を用いれば，適切な正則化パラメータを選択できる場合，悪条件な連立 1 次方程式の非斉次項 $\boldsymbol{b}$ の微小変化に対して，解の相対変化が小さくなるような正則化解を得ることができる．

ところで，Laplace 方程式の Cauchy 問題は非適切問題であり，離散化して得られる連立 1 次方程式は悪条件である．Cauchy データは連立 1 次方程式の右辺非斉次項に反映される．Cauchy データに誤差が混入していなければ，連立 1 次方程式の解から Cauchy 問題の良好な数値解が構成される．この場合，正則化法は必要ないが，正則化法を用いても良好な数値解が得られる．一方， Cauchy データに誤差が混入していれば，連立 1 次方程式の右辺非斉次項にも誤差が混入され，連立 1 次方程式の解から構成された Cauchy 問題の数値解は激しく振動する．この場合，正則化法により得られた連立 1 次方程式の正則化解を用いて，Cauchy 問題の良好な数値解を得ることができる [2]．

以上より，係数行列の逆行列を左から非斉次項に乗じて得られた解（通常解）が正則化法により得られた解（正則化解）と（ほぼ）一致するような連立 1 次方程式の非斉次項が “誤差の混入していない正しい” 非斉次項と考えることができる．

本来，与えられた任意の悪条件な連立 1 次方程式において，非斉次項の正しさに対する基準がない．本研究では，上記の考え方に基き，“正しい” 非斉次項を定義し，そのような非斉次項を求める手法を考える．

2. 2 元連立 1 次方程式

2017 年 9 月 23 日受付，2017 年 10 月 30 日受理

本節では，簡単のため，以下の 2 元連立 1 次方程式を考える [3]．

$$x_1 + ax_2 = b, \tag{2}$$

$$x_1 + (a+\varepsilon)x_2 = b + \delta. \tag{3}$$

ここに，a, b は与えられた実定数，$\varepsilon > 0$ は与えられた十分小さい定数であり，δ は摂動すると仮定する．係数行列 A と，δ に依存したベクトル $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(\delta)$, $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}(\delta)$ を

$$A := \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & a+\varepsilon \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x}(\delta) := \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}(\delta) := \begin{pmatrix} b \\ b+\delta \end{pmatrix}$$

とおく．このとき，A は正則であるので，連立 1 次方程式 (2), (3) すなわち

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}(\delta)$$

の解は

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(\delta) = A^{-1}\boldsymbol{b}(\delta) = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\delta}{\varepsilon}\begin{pmatrix} -a \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

と求められる．ここで，δ が δ' だけ微小変化すると，非斉次項と解の変化量はそれぞれ

$$\Delta\boldsymbol{b} := \boldsymbol{b}(\delta') - \boldsymbol{b}(\delta) = \begin{pmatrix} 0 \\ \delta' - \delta \end{pmatrix},$$

$$\Delta\boldsymbol{x} := \boldsymbol{x}(\delta') - \boldsymbol{x}(\delta) = \frac{\delta' - \delta}{\varepsilon}\begin{pmatrix} -a \\ 1 \end{pmatrix}$$

となる．連立 1 次方程式の右辺の微小変化 $\Delta\boldsymbol{b}$ ($\|\Delta\boldsymbol{b}\|_2 = |\delta' - \delta|$) に対して，$\Delta\delta \geq \varepsilon$ のとき，解の変化量 $\Delta\boldsymbol{x}$ は大きくなる．したがって，正則化法により解の変化量を微小にする必要がある．

2.1. 特異値分解

行列 A^TA に対して，固有値問題

$$A^TA\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}, \quad \boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0} \tag{5}$$

を考える．(5) に対する固有方程式

$$|A^TA - \lambda I| = \lambda^2 - (a^2 + (a+\varepsilon)^2 + 2)\lambda + \varepsilon^2 = 0$$

の解は A^TA の固有値 λ_1, λ_2 ($\lambda_1 > \lambda_2$) であり，解と係数の関係から，

$$\lambda_1 + \lambda_2 = a^2 + (a+\varepsilon)^2 + 2 = 2(a^2+1) + O(\varepsilon), \tag{6}$$

$$\lambda_1\lambda_2 = \varepsilon^2 \tag{7}$$

を満たす．解の公式より

$$\lambda_1 = 2(a^2+1) + O(\varepsilon)$$

であり，(7) より，

$$\lambda_2 = \frac{\varepsilon^2}{\lambda_1} = \frac{\varepsilon^2}{2(a^2+1) + O(\varepsilon)} = \frac{\varepsilon^2}{2(a^2+1)} + O(\varepsilon^3)$$

を得る．ここに，$\varepsilon > 0$ は定数であるが，漸近展開を求めるために $\varepsilon \to 0$ と仮定した．

固有値 λ_1, λ_2 に対する正規化した固有ベクトルはそれぞれ

$$\boldsymbol{v}_1 := \frac{1}{\sqrt{a^2+1+O(\varepsilon)}}\begin{pmatrix} 1+O(\varepsilon) \\ a+O(\varepsilon) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{a^2+1}}\begin{pmatrix} 1 \\ a \end{pmatrix} + O(\varepsilon),$$

$$\boldsymbol{v}_2 := \frac{1}{\sqrt{a^2+1+O(\varepsilon)}}\begin{pmatrix} a+O(\varepsilon) \\ -1+O(\varepsilon) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{a^2+1}}\begin{pmatrix} a \\ -1 \end{pmatrix} + O(\varepsilon)$$

で与えられる．ここに，各成分が $O(\varepsilon)$ からなるベクトルや行列を単に $O(\varepsilon)$ と略記する．また，$\sigma_j := \sqrt{\lambda_j}$ ($j = 1, 2$) とおき，

$$\boldsymbol{u}_1 := \frac{1}{\sigma_1}A\boldsymbol{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + O(\varepsilon),$$

$$\boldsymbol{u}_2 := \frac{1}{\sigma_2}A\boldsymbol{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + O(\varepsilon)$$

と定める．すると，$\sigma_j\boldsymbol{u}_j = A\boldsymbol{v}_j$ ($j = 1, 2$) より，行列 A は

$$A = U\Sigma V^T = \sum_{j=1}^{2} \sigma_j \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{v}_j^T \tag{8}$$

と特異値分解される．ここに，直交行列 U, V と対角行列 Σ は

$$U := (\boldsymbol{u}_1 \ \boldsymbol{u}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} + O(\varepsilon),$$

$$V := (\boldsymbol{v}_1 \ \boldsymbol{v}_2) = \frac{1}{\sqrt{a^2+1}}\begin{pmatrix} 1 & a \\ a & -1 \end{pmatrix} + O(\varepsilon),$$

$$\Sigma := \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2(a^2+1)} & 0 \\ 0 & \dfrac{\varepsilon}{\sqrt{2(a^2+1)}} \end{pmatrix} + O(\varepsilon)$$

で与えられ，σ_j は A の特異値，$\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{v}_j$ はそれぞれ σ_j に対する左特異ベクトルと右特異ベクトルである．

最大特異値 σ_1 と最小特異値 σ_2 を用いて，A の（2 ノルム $\|\cdot\|_2$ に関する）条件数は

$$\mathrm{cond}(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_2} = \frac{2(a^2+1)}{\varepsilon} + O(1)$$

と表される．行列式 $|A| = \varepsilon > 0$ が 0 に近づくにつれ，$\mathrm{cond}(A)$ は大きくなることがわかる．

2.2. 正則化解

行列 A の逆行列は特異値分解を用いると

$$A^{-1} = (U\Sigma V^T)^{-1} = V\Sigma^{-1}U^T = \sum_{j=1}^{2} \frac{1}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{u}_j^T$$

と表される．(8) において特異値 $\sigma_2 = \varepsilon/\sqrt{2(a^2+1)} \approx 0$ より，行列 A は

$$A_1 := \sigma_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^T = \begin{pmatrix} 1 & a \\ 1 & a \end{pmatrix} + O(\varepsilon)$$

と近似される．このとき，A_1 の Moore-Penrose 一般逆行列は

$$A_1^{\dagger} := \frac{1}{\sigma_1}\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{u}_1^T = \frac{1}{2(a^2+1)}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ a & a \end{pmatrix} + O(\varepsilon)$$

と定められる．すると，正則化解は $\delta \to 0$ のとき

$$\boldsymbol{x}_1(\delta) := A_1^{\dagger}\boldsymbol{b}(\delta) = \frac{b}{a^2+1}\begin{pmatrix}1\\a\end{pmatrix} + O(\varepsilon) + O(\delta) \tag{9}$$

で与えられ，δ の摂動に対して正則化解の変化は微小であることがわかる．

いま，正則化解 (9) の右辺第 1 項が通常解 (4) に一致するような $\boldsymbol{b}(\delta)$ が "正しい" 非斉次項であると定義する．(9) の右辺第 1 項と (4) が等しいとおくと，

$$\delta = \delta_1 := \frac{\varepsilon ab}{a^2+1} \tag{10}$$

を得る．(10) の δ_1 で与えられる $\boldsymbol{b}(\delta_1)$ が "正しい" 非斉次項である．

2.3. 最小ノルム解

連立 1 次方程式の 1 行目 (2) だけを考えると，(2) の一般解は

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix}b\\0\end{pmatrix} + t\begin{pmatrix}-a\\1\end{pmatrix}, \quad \forall t \in \boldsymbol{R} \tag{11}$$

である．すると，

$$\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = (b-at)^2 + t^2 = (a^2+1)\left(t - \frac{ab}{a^2+1}\right)^2 + \frac{b^2}{a^2+1}$$

より，

$$t = \frac{ab}{a^2+1} \tag{12}$$

のとき，最小ノルム解

$$\boldsymbol{x}_0 = \frac{b}{a^2+1}\begin{pmatrix}1\\a\end{pmatrix} \tag{13}$$

が得られ，(13) と (9) の右辺第 1 項が一致することがわかる．

一方，連立 1 次方程式 (2), (3) の通常解 (4) と (11) を比較すると，

$$t = \frac{\delta}{\varepsilon} \tag{14}$$

となり，(12) と合わせることで (10) を容易に得る．

また，連立 1 次方程式の 2 行目 (3) の一般解は

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}b\\0\end{pmatrix} + t\begin{pmatrix}-a\\1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\delta - t\varepsilon\\0\end{pmatrix}, \quad \forall t \in \boldsymbol{R} \tag{15}$$

である．(15) が (4) と一致するのは，$\delta - t\varepsilon = 0$ のときであり，改めて (14) を得る．

2.4. 数値例

連立 1 次方程式 (2), (3) において，$a = 3, b = 20, \varepsilon = 10^{-3}$ とおき，いくつかの δ の値に対して，通常解と正則化解を数値的に求める．

Table 1　Conventional and regularized solutions

δ	$\boldsymbol{x}(\delta)$	$\boldsymbol{x}_1(\delta)$
$1 \cdot 10^{-3}$	$(17, 1)^T$	$(1.9995, 5.9993)^T$
$4 \cdot 10^{-3}$	$(8, 4)^T$	$(1.9996, 5.9998)^T$
$6 \cdot 10^{-3}$	$(2, 6)^T$	$(1.9997, 6.0001)^T$

Table 1 より，各 δ に対して得られた正則化解 $\boldsymbol{x}_1(\delta)$ は互いに微小な差異しかなく，いずれもおよそ $(2, 6)^T$ である．摂動パラメータ $\delta = 1 \cdot 10^{-3}, 4 \cdot 10^{-3}$ に対する通常解 $\boldsymbol{x}(\delta)$ はそれぞれ $(17, 1)^T, (8, 4)^T$ と正則化解からは大きくかけ離れている．一方，$\delta = 6 \cdot 10^{-3}$ に対する通常解は $(2, 6)^T$ であり，正則化解にほぼ一致している．実際，通常解が正則化解にほぼ一致するのは，(10) より $\delta = \delta_1 = 6 \cdot 10^{-3}$ のときであることがわかる．したがって，"正しい" 非斉次項は $\boldsymbol{b}(6 \cdot 10^{-3}) = (20, 20.006)^T$ と求められる．

3. n 元連立 1 次方程式

正則な n 次正方行列 A と n 次元ベクトル $\boldsymbol{b}$ が与えられたとき，連立 1 次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{16}$$

の解は

$$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b} \tag{17}$$

と一意に求まる．いま，$\mathrm{cond}(A)$ が大きい，すなわち (16) は悪条件な連立 1 次方程式であるとすると，誤差を含む n 次元ベクトル $\boldsymbol{b}^{\delta} = \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}$ （$\Delta\boldsymbol{b}$ は誤差ベクトル）に対して，連立 1 次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{\delta} \tag{18}$$

の解 $\boldsymbol{x}^{\delta} := A^{-1}\boldsymbol{b}^{\delta}$ は (17) と大きく異なる恐れがある．

2.1 節と同様にして，行列 A は

$$A = U\Sigma V^T = \sum_{j=1}^{n}\sigma_j\boldsymbol{u}_j\boldsymbol{v}_j^T \tag{19}$$

と特異値分解される．ここに，直交行列 U, V と対角行列 Σ は $U := (\boldsymbol{u}_1\ \boldsymbol{u}_2\ \cdots\ \boldsymbol{u}_n)$, $V := (\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2\ \cdots\ \boldsymbol{v}_n)$, $\Sigma := \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n)$ で与えられる．特異値 $\{\sigma_j\}_{j=1}^n$ は $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} \geq \cdots \geq \sigma_n > 0$ を満たし，$\{\sigma_j\}_{j=r+1}^n$ は十分小さいと仮定する．すると，(19) より，行列 A は打ち切り特異値分解された階数 r の行列

$$A_r := \sum_{j=1}^{r}\sigma_j\boldsymbol{u}_j\boldsymbol{v}_j^T \tag{20}$$

で近似できる．(20) の一般逆行列は

$$A_r^{\dagger} := \sum_{j=1}^{r}\frac{1}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{u}_j^T$$

と定められる．特に $r = n$ のとき，$A_n^{\dagger} = A^{-1}$ である．

以上より，(18) の正則化解は

$$\boldsymbol{x}_r^{\delta} := A_r^{\dagger}\boldsymbol{b}^{\delta} = \sum_{j=1}^{r}\frac{(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b}^{\delta})}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j \tag{21}$$

で与えられる．解 (17) は

$$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b} = \sum_{j=1}^{n}\frac{(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b})}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j \tag{22}$$

と表される．

いま，正則化解と通常解が一致するような非斉次項を求めることを考える．つまり，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^r$ の正則化解 $\boldsymbol{x}_r^r = A_r^{\dagger}\boldsymbol{b}^r$ と通

常解 $\boldsymbol{x}^r = A^{-1}\boldsymbol{b}^r$ が一致する $\boldsymbol{b}^r$ を “正しい” 非斉次項と定義し，$\boldsymbol{b}$ の復元非斉次項として求める．すると，$\|\boldsymbol{x}^r - \boldsymbol{x}_r^r\|_2 = 0$ であるので，

$$0 = \|\boldsymbol{x}^r - \boldsymbol{x}_r^r\|_2^2 = \left\| \sum_{j=r+1}^{n} \frac{(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b}^r)}{\sigma_j} \boldsymbol{v}_j \right\|_2^2 = \sum_{j=r+1}^{n} \frac{|(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b}^r)|^2}{\sigma_j^2}. \tag{23}$$

ここに，$\{\boldsymbol{v}_j\}_{j=1}^n$ が正規直交系であることを用いた．よって，$\boldsymbol{u}_j, \sigma_j$ は既知であることに注意して，$(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b}^r) = 0$ $(j = r+1, r+2, \ldots, n)$ より，$\boldsymbol{b}^r \perp \{\boldsymbol{u}_j\}_{j=r+1}^n$ を得る．これより，Gram-Schmidt の直交化法を用いて，正規直交基底 $\{\boldsymbol{u}_j\}_{j=r+1}^n$ に直交する $\boldsymbol{b}^r$ を $\boldsymbol{b}^\delta$ から構成すると，

$$\boldsymbol{b}^r := \boldsymbol{b}^\delta - \sum_{j=r+1}^{n} (\boldsymbol{b}^\delta, \boldsymbol{u}_j)\boldsymbol{u}_j \tag{24}$$

となる．

一方，

$$\boldsymbol{x}^r = \boldsymbol{x}_r^\delta \tag{25}$$

とすると，$A^{-1}\boldsymbol{b}^r = A_r^\dagger \boldsymbol{b}^\delta$ より

$$\begin{aligned}\boldsymbol{b}^r &= AA_r^\dagger \boldsymbol{b}^\delta = \left(\sum_{k=1}^{n} \sigma_k \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{v}_k^T\right)\left(\sum_{j=1}^{r} \frac{1}{\sigma_j} \boldsymbol{v}_j \boldsymbol{u}_j^T\right)\boldsymbol{b}^\delta \\ &= \sum_{j=1}^{r}\sum_{k=1}^{n} \frac{\sigma_k}{\sigma_j} (\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b}^\delta)(\boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_j)\boldsymbol{u}_k = \sum_{j=1}^{r} (\boldsymbol{b}^\delta, \boldsymbol{u}_j)\boldsymbol{u}_j. \end{aligned} \tag{26}$$

これより，$\boldsymbol{b}^r \perp \{\boldsymbol{u}_j\}_{j=r+1}^n$ を改めて確認できる．また，$\boldsymbol{b}^r$ は $\boldsymbol{b}^\delta$ の r 個のベクトル $\{\boldsymbol{u}_j\}_{j=1}^r$ で張られる線形部分空間への射影であり，$\boldsymbol{v}_j, \sigma_j$ には依存しないことがわかる．ここで，$\boldsymbol{b}^\delta \in \boldsymbol{R}^n$ は正規直交基底 $\{\boldsymbol{u}_j\}_{j=1}^n$ を用いて

$$\boldsymbol{b}^\delta = \sum_{j=1}^{n} (\boldsymbol{b}^\delta, \boldsymbol{u}_j)\boldsymbol{u}_j \tag{27}$$

と展開でき，(26) から (27) を引くと，改めて (24) を得る．

4. 数値実験

正方行列 A として Hilbert 行列 $A = (1/(i+j-1))_{1\le i,j\le n} \in \boldsymbol{R}^{n\times n}$ を考える．真の解を $\boldsymbol{x} = (1, 1, \ldots, 1)^T \in \boldsymbol{R}^n$ と仮定し，$\boldsymbol{b} := A\boldsymbol{x}$ として真の非斉次項を定める．微小な δ に対して，誤差ベクトル $\Delta\boldsymbol{b}$ の各成分を開区間 $(-\delta, \delta)$ の一様乱数で与え，誤差を含んだ非斉次項を $\boldsymbol{b}^\delta = \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}$ とする．このとき，解 $\boldsymbol{x}$ を未知と仮定し，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^\delta$ を基にして，$\boldsymbol{b}^\delta$ から $\boldsymbol{b}$ の復元非斉次項 $\boldsymbol{b}^r$ を求める．

いま，$n = 10, \delta = 10^{-7}$ とする．条件数が $\mathrm{cond}(A) = 1.6 \cdot 10^{13}$ と大きく，通常解 $\boldsymbol{x}^\delta = A^{-1}\boldsymbol{b}^\delta$ の真の解 $\boldsymbol{x}$ に対する誤差は $\|\boldsymbol{x}^\delta - \boldsymbol{x}\|_2 = 2.5 \cdot 10^4$ と大きい．数値計算によって $\|\boldsymbol{x}_6^\delta - \boldsymbol{x}\|_2 = \min_{1\le r\le 10} \|\boldsymbol{x}_r^\delta - \boldsymbol{x}\|_2$ が確かめられるので，(21) において最適な打ち切り項数は $r = 6$ と与えられる．このとき，$\|\boldsymbol{x}_6^\delta - \boldsymbol{x}\|_2 = 6.0 \cdot 10^{-3}$ である．

(26) により，$\boldsymbol{b}^\delta$ から $\boldsymbol{b}$ の復元非斉次項 $\boldsymbol{b}^6$ を求める．このとき，$\boldsymbol{b}^6$ は (25) を満たすことから，理論上は $\|\boldsymbol{x}^6 - \boldsymbol{x}_6^\delta\|_2 = 0$ となるはずだが，$\|\boldsymbol{x}^6 - \boldsymbol{x}_6^\delta\|_2 = \|A^{-1}\boldsymbol{b}^6 - A_6^\dagger \boldsymbol{b}^\delta\|_2 = 2.9 \cdot 10^{-4}$ である．条件数 $\mathrm{cond}(A)$ が大きいため，通常解 $\boldsymbol{x}^6 = A^{-1}\boldsymbol{b}^6$ を精度良く求められないことが要因である．本研究の目的は連立 1 次方程式の求解ではなく，非斉次項の復元であるので，ここでは問題にならない．

非斉次項の誤差は，$\|\boldsymbol{b}^\delta - \boldsymbol{b}\|_2 = \|\Delta\boldsymbol{b}\|_2 = 1.19 \cdot 10^{-7}$ に対して，$\|\boldsymbol{b}^6 - \boldsymbol{b}\|_2 = 1.17 \cdot 10^{-7}$ であり，$\|\boldsymbol{b}^6 - \boldsymbol{b}\|_2 = \min_{1\le r\le 10} \|\boldsymbol{b}^r - \boldsymbol{b}\|_2$ であることが数値的に確認できる．したがって，復元非斉次項 $\boldsymbol{b}^6$ は真の非斉次項 $\boldsymbol{b}$ の最良近似であり，誤差を含む非斉次項 $\boldsymbol{b}^\delta$ よりも精度が僅かながら改善されたといえる．

5. 結論

通常，連立 1 次方程式の非斉次項は誤差を含む観測データから成るため，誤差を含まない真の非斉次項は未知である．正則化解と通常解が，2 節ではほぼ一致，3 節では一致するような連立 1 次方程式の非斉次項を “正しい” と，それぞれ異なる定義を与え，“正しい” 非斉次項を復元することを考えた．しかし，このように定めた “正しい” 非斉次項が誤差を含まない真の観測データに等しいとは言えない．

実際，真の非斉次項 $\boldsymbol{b}$ に対して，真の解 $\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$ と正則化解 $\boldsymbol{x}_r = A_r^\dagger \boldsymbol{b}$ は $\boldsymbol{x} \ne \boldsymbol{x}_r$ と一致しないことから，本研究で提案した手法で復元された $\boldsymbol{b}^r$ は明らかに $\boldsymbol{b}$ と異なる．しかしながら，復元非斉次項 $\boldsymbol{b}^r$ に対して，$\|\boldsymbol{b}^r - \boldsymbol{b}\| < \|\boldsymbol{b}^\delta - \boldsymbol{b}\|$ であり，復元非斉次項 $\boldsymbol{b}^r$ は観測誤差を含む非斉次項 $\boldsymbol{b}^\delta$ よりも精度が若干ではあるが改善されていることが数値実験により確認された．ただし，非斉次項を良好に復元するためには，真の解を最良近似する正則化解，すなわち最適な打ち切り項数 r を求めることが不可欠である．

今後は，正則化法として Tikhonov 正則化法を用いることが考えられる．正則化パラメータは，打ち切り特異値分解の場合は打ち切り項数すなわち正の整数であるが，Tikhonov 正則化法の場合は正の実数である．したがって，Tikhonov 正則化法を用いることで，正則化解の微調整が可能となり，復元非斉次項の精度をさらに改善できることが期待される．

また，真の非斉次項が満たす条件を明確にし，その条件を満たす非斉次項を “正しい” と再定義する必要がある．いずれにせよ，本研究は観測データから誤差を含まない真のデータを復元することに繋がる可能性があるため，意味があることと考えられる．

参考文献

(1) Hansen, P. C.: Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve, *SIAM Review*, **34** (4), 1992, pp. 561–580.

(2) Shigeta, T. and Young, D. L.: Method of fundamental solutions with optimal regularization techniques for the Cauchy problem of the Laplace equation with singular points, *Journal of Computational Physics*, **228** (6), 2009, pp. 1903–1915.

(3) Shigeta, T.: Ill-conditioned simultaneous linear equations to which the regularized solution almost coincides with the exact one, 昭和薬科大学紀要, **52**, to appear.