計算数理工学論文集 Vol. 8 (2008 年 11 月)，論文 No. 08-081128 JASCOME

# 誤差のあるコーシーデータをもつラプラス方程式を念頭においたランク低減法

## Rank Reduction Technique for the Laplace Equation in Mind with Noisy Cauchy Data

大西和榮 [1)]，大浦洋子 [2)], 繁田岳美 [3)]，代田健二 [4)]

Kazuei Onishi, Yoko Ohura, Takemi Shigeta, Kenji Shirota

1) 茨城大学理学部 (〒310–8512 茨城県水戸市文京 2–1–1, E-mail: onishi@mx.ibaraki.ac.jp)
2) 九州情報大学経営情報学部 (〒818–0117 福岡県太宰府市宰府 6–3–1, E-mail: ohura@kiis.ac.jp)
3) 国立台湾大学土木工程学系 (10617 台北市羅斯福路 4 段 1 號, E-mail: shigeta@ntu.edu.tw)
4) 茨城大学理学部 (〒310–8512 茨城県水戸市文京 2–1–1, E-mail: shirota@mx.ibaraki.ac.jp)

We are particularly interested in numerical treatment of erroneous data for ill-posed problems of partial differential equations. Our method consists of the multiple-precision arithmetic system “exflib” developed by Dr. Fujiwara of Kyoto University for numerical computation and the high order finite difference method developed by Iijima for approximation of differential equations. In this paper, this combined method is applied to numerical solution of the Cauchy problem of the Laplace equation. A rank reduction technique is considered for regularization to the problem with noisy data. Two cases are considered: The upper bound of noise size is known in one case, only the variance of the noise can be estimated in another case.

***Key Words***: Ill-posed problem, Multiple-precision arithmetic, Singular value decomposition, Rank reduction technique

### 1. はじめに

本稿では，非適切問題の典型例として知られているラプラス方程式の初期値問題を取り上げ，その数値解法における正則化法としてランク低減法を提案する．

これまでの研究 [1)−7)] により，ラプラス方程式の初期値問題は，正確な初期データが入手可能であり，かつ領域近傍に特異点がないならば，次の 2 つの手法の組合せにより数値的に解けることが明らかになっている:

- 超高精度離散化法の適用
- 任意多倍長計算機能の利用

最近，特異点を迂回して解の調和接続を数値的に実現することに繁田・楊 [8)] は成功した．本報では，領域の近傍に特異点は存在しないが，正確な初期データが入手できない場合の差分法による数値的な調和接続を，次の簡単な例を通して考える: 単位円盤 $\Omega = \left\{(x_1, x_2) \mid \sqrt{x_1^2 + x_2^2} < 1\right\}$ において，ラプラス方程式を解く．境界の一部

$$\Gamma = \{(\cos\vartheta, \sin\vartheta) \mid 0 \leq \vartheta \leq \pi/2\}$$

に，調和関数 $u(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2^2$ でモデル化した初期データ $\bar{u}$ と $\bar{q} = \partial u/\partial n$ を与える．ただし $\boldsymbol{n}$ は，$\Gamma$ 上の外向き単位法線ベクトルである．もし初期データにランダムな誤差が混入されているならば，初期値問題の解の存在性は数学的に保証されない．

本稿では，飯島による多点差分法と藤原による任意多倍長計算 [9)] の組合せにより，上記の初期値問題を解くことを考える．さらに，離散化により得られた連立一次方程式 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ に対して，正則化法の 1 つとして知られているランク低減法を適用することにより，誤差が混入した場合の対処を試みる．

### 2. ランク低減法による正則化の提案

ランクが $r$ の $m \times n$ 係数行列 $A$ の特異値を $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$ とし，それに対応する左，右特異ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{u}_j$ と $\boldsymbol{v}_j$ $(j = 1, 2, \cdots, r)$ とする．このとき $A$ のムーア・ペンローズ一般逆行列は $A^\dagger = \displaystyle\sum_{j=1}^{r} \frac{1}{\sigma_j} \boldsymbol{v}_j \boldsymbol{u}_j^T$ で与えられる．ここで，これら特異値に関して

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_q > \sigma_{q+1} \geq \cdots \geq \sigma_r$$

2008.9.16 受付，2008.10.22 受理

となる番号 $q$ $(q = 1, 2, \cdots, r-1)$ が取れたとする．このとき行列 $A_q = \sum_{j=1}^{q} \sigma_j \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{v}_j^T$ は，ランクが $q$ 以下のすべての $m \times n$ 行列の中で，$A$ の最良近似であることが知られている．さらに，この $A_q$ に対応するムーア・ペンローズ一般逆行列は，$A_q^\dagger = \sum_{j=1}^{q} \frac{1}{\sigma_j} \boldsymbol{v}_j \boldsymbol{u}_j^T$ で与えられる．

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の右辺 $\boldsymbol{b}$ に，大きさ $\delta$ を超えない誤差，すなわち $\|\Delta\boldsymbol{b}\|_{\mathbb{R}^m} \leqq \delta$ を満たす $\Delta\boldsymbol{b}$ が紛れ込んだとしよう．ただし，$\|\cdot\|_{\mathbb{R}^m}$ は $\mathbb{R}^m$ におけるユークリッドノルムとする．$\boldsymbol{b}^\delta = \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}$ とおく．$\boldsymbol{x}^\dagger = A^\dagger \boldsymbol{b}$ を $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ のムーア・ペンローズ解，$\boldsymbol{x}_q^{\delta\dagger} = A_q^\dagger \boldsymbol{b}^\delta$ を $A_q \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^\delta$ のムーア・ペンローズ解とする．このとき，

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{x}_q^{\delta\dagger} - \boldsymbol{x}^\dagger &= A_q^\dagger(\boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}) - A^\dagger \boldsymbol{b} \\
&= A_q^\dagger \Delta\boldsymbol{b} - (A^\dagger - A_q^\dagger)\boldsymbol{b} \\
&= \sum_{j=1}^{q} \frac{(\boldsymbol{u}_j, \Delta\boldsymbol{b})}{\sigma_j} \boldsymbol{v}_j - \sum_{j=q+1}^{r} \frac{(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b})}{\sigma_j} \boldsymbol{v}_j
\end{aligned}
$$

より

$$
\begin{aligned}
&\|\boldsymbol{x}_q^{\delta\dagger} - \boldsymbol{x}^\dagger\|_{\mathbb{R}^n}^2 \\
&\quad = \sum_{j=1}^{q} \frac{|(\boldsymbol{u}_j, \Delta\boldsymbol{b})|^2}{\sigma_j^2} + \sum_{j=q+1}^{r} \frac{|(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b})|^2}{\sigma_j^2} \\
&\quad \leq \frac{1}{\sigma_q^2} \sum_{j=1}^{q} |(\boldsymbol{u}_j, \Delta\boldsymbol{b})|^2 + \sum_{j=q+1}^{r} \frac{|(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b})|^2}{\sigma_j^2} \\
&\quad \leq \frac{\|\Delta\boldsymbol{b}\|_{\mathbb{R}^m}^2}{\sigma_q^2} + \sum_{j=q+1}^{r} \frac{|(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b})|^2}{\sigma_j^2}.
\end{aligned}
$$

ここにおける正則化の目的は，各々の $\boldsymbol{b}^\delta$ に応じて $\|\boldsymbol{x}_q^{\delta\dagger} - \boldsymbol{x}^\dagger\|_{\mathbb{R}^n}^2$ を最小にするランク $q$ を求めることにある．しかしながら，誤差の上界のみが与えられている状況下では，そのような評価は困難である．次善の評価としては，この不等式の最右辺より，

$$
F^\delta(q) := \frac{\delta^2}{\sigma_q^2} + \sum_{j=q+1}^{r} \frac{|(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b}^\delta)|^2}{\sigma_j^2}
$$

を最小とするランク $q$ を選ぶことが，現実に入手可能な量のみを用いる誤差への対処として考えられる．

$$
q_{\mathrm{opt}}^\delta = \arg\min_q F^\delta(q)
$$

と定めよう．このようにして定められるランク $q_{\mathrm{opt}}^\delta$ が，望ましいランクを与えることが，後述する図５の計算結果によって示されている．

### 3．母平均の最小分散不偏推定量

ランク低減法において，ノイズベクトル $\Delta\boldsymbol{b}$ の大きさ $\|\Delta\boldsymbol{b}\|$ は $\delta$ を超えないと仮定した $(\|\Delta\boldsymbol{b}\| \leq \delta)$．しかし，このような仮定は実際的でないであろう．ノイズは確率的であり，一様分布のような特殊な分布を想定しない限り，$\|\Delta\boldsymbol{b}\| \leq \delta$ とは仮定できないのではないだろうか．実際には，ノイズのバラツキの大きさ $\sigma^2$ が推定できるにすぎないのではないだろうか．

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ において，右辺 $\boldsymbol{b}$ が，ある分布に従う確率変数である場合を考えよう．母集団の分布に関する平均操作を記号 $E[\,\cdot\,]$ で表す．このとき，$\boldsymbol{b}$ の母平均を $E[\boldsymbol{b}] = \boldsymbol{\beta}$ とし，$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$ によってランダムな誤差（ノイズ）$\boldsymbol{\epsilon}$ を定めると，誤差の母平均は $E[\boldsymbol{\epsilon}] = \boldsymbol{0}$ となる．この誤差 $\boldsymbol{\epsilon}$ の分散共分散行列は

$$
\mathrm{Cov}[\boldsymbol{\epsilon}] = E[\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon}^T] = \sigma^2 E_m
$$

で与えられると仮定する．$E_m$ は $m$ 次の単位行列である．すなわち，ノイズの第 $j$ 成分 $\epsilon_j$ $(j = 1, 2, \cdots, m)$ について，一様等分散かつ互いに相関なしと仮定する．さらに，$m \times n$ の係数行列 $A$ の各成分 $a_{ij}$ は確定値であると仮定する．このようなモデルにおいては，解 $\boldsymbol{x}$ もまた確率変数となる．解の母平均を $E[\boldsymbol{x}] = \boldsymbol{\xi}$ で表す．観測値 $\boldsymbol{b}$ が得られたとき，母平均 $\boldsymbol{\xi}$ と誤差分散 $\sigma^2$ を推定する方法を考えよう．

$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の母平均をとると，$A\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\beta}$ となる．この $\boldsymbol{\xi}$ の１つとして，ムーア・ペンローズの一般逆行列 $A^\dagger$ を用いた $\boldsymbol{\xi} = A^\dagger \boldsymbol{\beta}$ を採ることができる．従って，母数 $\boldsymbol{\xi}$ の推定量 $\widehat{\boldsymbol{\xi}}$ として，

$$
\widehat{\boldsymbol{\xi}} = A^\dagger \boldsymbol{b}
$$

が考えられる．この推定量について，

$$
E[\widehat{\boldsymbol{\xi}}] = A^\dagger E[\boldsymbol{b}] = A^\dagger \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\xi}
$$

が成り立つので，$\widehat{\boldsymbol{\xi}}$ は母平均 $\boldsymbol{\xi}$ の不偏推定量であることが判る．

この $\widehat{\boldsymbol{\xi}}$ を用いて $\widehat{\boldsymbol{b}} = A\widehat{\boldsymbol{\xi}}$ と定める．すなわち $\widehat{\boldsymbol{b}} = AA^\dagger \boldsymbol{b}$．$m > n$ とする．このとき，残差平方和 $S_e$ は

$$
S_e = \|\boldsymbol{b} - \widehat{\boldsymbol{b}}\|^2 = \sum_{j=1}^{m} (b_j - \widehat{b}_j)^2
$$

となり，$\widehat{\boldsymbol{b}}$ を得るのに $n$ 個の推定値 $\widehat{\xi}_1, \widehat{\xi}_2, \cdots, \widehat{\xi}_n$ を用いたので，$S_e$ の自由度は $m$ から $n$ 個減って $f = m - n$ となる．従って，誤差分散 $\sigma^2$ の不偏推定量 $\widehat{\sigma^2}$ は

$$
\widehat{\sigma^2} = \frac{S_e}{m-n}
$$

で与えられる．

ところで，残差平方和 $S_e$ を計算するには，次のようにするとよい．まず，

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{b} - \widehat{\boldsymbol{b}} &= \boldsymbol{b} - AA^\dagger \boldsymbol{b} \\
&= (E_m - AA^\dagger)\boldsymbol{b} = (E_m - \sum_{j=1}^{r} \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{u}_j^T)\boldsymbol{b}
\end{aligned}
$$

であることに注意する．$\sum_{j=1}^{r} \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{u}_j^T$ は部分空間 $\langle \boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r \rangle$ の上への正射影行列だから，$E_m - \sum_{j=1}^{r} \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{u}_j^T$ は直交補空間 $\langle \boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r \rangle^\perp$ への正射影行列である．よって，$\boldsymbol{b} - \widehat{\boldsymbol{b}}$ はこの直交補空間への $\boldsymbol{b}$ の正射影に他ならない．$S_e$ を計算す

ると

$$\begin{aligned}S_e &= \|\boldsymbol{b}-\widehat{\boldsymbol{b}}\|^2 = (\boldsymbol{b}-\widehat{\boldsymbol{b}})^T(\boldsymbol{b}-\widehat{\boldsymbol{b}})\\ &= \boldsymbol{b}^T(E_m - \sum_{j=1}^r \boldsymbol{u}_j\boldsymbol{u}_j^T)(E_m - \sum_{k=1}^r \boldsymbol{u}_k\boldsymbol{u}_k^T)\boldsymbol{b}\\ &= \boldsymbol{b}^T(E_m - \sum_{j=1}^r \boldsymbol{u}_j\boldsymbol{u}_j^T)\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{b} - \sum_{j=1}^r \boldsymbol{b}^T\boldsymbol{u}_j\boldsymbol{u}_j^T\boldsymbol{b}\\ &= \|\boldsymbol{b}\|^2 - \sum_{j=1}^r (\boldsymbol{u}_j,\boldsymbol{b})^2\end{aligned}$$

次に，推定量 $\widehat{\boldsymbol{\xi}}$ の分散共分散行列 $\mathrm{Cov}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}]$ を求めよう．$\widehat{\boldsymbol{\xi}}-\boldsymbol{\xi} = A^\dagger(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{\beta}) = A^\dagger\boldsymbol{\epsilon}$ より，

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}] &= E[(\widehat{\boldsymbol{\xi}}-\boldsymbol{\xi})(\widehat{\boldsymbol{\xi}}-\boldsymbol{\xi})^T] = A^\dagger E[\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon}^T](A^\dagger)^T\\ &= A^\dagger\sigma^2 E_m(A^\dagger)^T = \sigma^2 A^\dagger(A^\dagger)^T\end{aligned}$$

ところが，$A^\dagger = \displaystyle\sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{u}_j^T$ であったから，

$$\begin{aligned}A^\dagger(A^\dagger)^T &= \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{u}_j^T \sum_{k=1}^r \frac{1}{\sigma_k}\boldsymbol{u}_k\boldsymbol{v}_k^T\\ &= \sum_{j,k=1}^r \frac{1}{\sigma_j\sigma_k}\boldsymbol{v}_j\delta_{jk}\boldsymbol{v}_k^T = \sum_{j=1}^r \frac{1}{\sigma_j^2}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^T\end{aligned}$$

よって，

$$\mathrm{Cov}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}] = \sigma^2\sum_{j=1}^r \frac{1}{\lambda_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^T$$

この結果を用いると，不偏推定量 $\widehat{\boldsymbol{\xi}}$ の平均偏差平方和は

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}] &= E[\,\|\widehat{\boldsymbol{\xi}}-\boldsymbol{\xi}\|^2]\\ &= \sum_{j=1}^n E[\,(\widehat{\xi}_j-\xi_j)^2] = \sum_{j=1}^n \mathrm{Var}[\widehat{\xi}_j]\\ &= \mathrm{tr}\,\mathrm{Cov}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}] = \sigma^2\,\mathrm{tr}\sum_{j=1}^r \frac{1}{\lambda_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^T\\ &= \sigma^2\,\mathrm{tr}\sum_{j=1}^r \frac{1}{\lambda_j}\begin{pmatrix} v_{1j}^2 & v_{1j}v_{2j} & \cdots\\ v_{2j}v_{1j} & v_{2j}^2 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\\ &= \sigma^2\sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^r \frac{v_{ij}^2}{\lambda_j} = \sigma^2\sum_{j=1}^r\frac{1}{\lambda_j}\sum_{i=1}^n v_{ij}^2\\ &= \sigma^2\sum_{j=1}^r \frac{\|\boldsymbol{v}_j\|^2}{\lambda_j} = \sigma^2\sum_{j=1}^r\frac{1}{\lambda_j}\end{aligned}$$

となる．ここに，記号 tr は行列のトレース を表し，$\boldsymbol{v}_j = (v_{1j}, v_{2j}, \cdots, v_{nj})^T$ とする．

もし $\boldsymbol{b}$ が $m$ 変量正規分布 $N(\boldsymbol{\beta},\ \sigma^2 E_m)$ に従うならば，

$$\widehat{\boldsymbol{\xi}} \in N(A^\dagger\boldsymbol{\beta},\ \sigma^2\sum_{j=1}^r\frac{1}{\lambda_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^T)$$

さて，母平均 $\boldsymbol{\xi}$ に対する他の任意の線形推定量 $\boldsymbol{z} = M\boldsymbol{b}$ を考えよう．$M = (m_{ij})_{n\times m} = (\boldsymbol{m}_1, \boldsymbol{m}_2, \cdots, \boldsymbol{m}_m)$ とする．この $\boldsymbol{z}$ が $\boldsymbol{\xi}$ の不偏推定量であるためには，

$$\boldsymbol{\xi} = E[\boldsymbol{z}] = ME[\boldsymbol{b}] = M\boldsymbol{\beta} = MA\boldsymbol{\xi}$$

よって，$\boldsymbol{\xi} = MA\boldsymbol{\xi}$ が成り立たねばならない．この両辺に左から $A$ を掛けると $A\boldsymbol{\xi} = AMA\boldsymbol{\xi}$ となる．この等式が任意の母平均 $\boldsymbol{\xi}$ について成り立つためには $A = AMA$ が行列 $A$ に対して成り立つことが必要である．これより，$M$ は $A$ の一般逆行列であることが分かる．

この不偏推定量の平均偏差平方和を調べよう．$\boldsymbol{z} = M\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{\xi} = M\boldsymbol{\beta}$ より $\boldsymbol{z}-\boldsymbol{\xi} = M(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{\beta}) = M\boldsymbol{\epsilon}$ となる．よって，

$$\begin{aligned}&\mathrm{Var}[\boldsymbol{z}]\\ &= E[\,\|\boldsymbol{z}-\boldsymbol{\xi}\|^2] = E\left[\sum_{i=1}^n\left(\sum_{j=1}^m m_{ij}\epsilon_j\right)^2\right]\\ &= \sum_{i=1}^n E\left[\sum_{j=1}^m m_{ij}\epsilon_j\sum_{k=1}^m m_{ik}\epsilon_k\right] = \sum_{i=1}^n\sum_{j,k=1}^m m_{ij}m_{ik}E\left[\epsilon_j\epsilon_k\right]\\ &= \sum_{i=1}^n\sum_{j,k=1}^m m_{ij}m_{ik}\sigma^2\delta_{jk} = \sigma^2\sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^m m_{ij}^2\\ &= \sigma^2\sum_{j=1}^m\begin{pmatrix} m_{1j} & m_{2j} & \cdots & m_{nj}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_{1j}\\ m_{2j}\\ \vdots\\ m_{nj}\end{pmatrix}\\ &= \sigma^2\sum_{j=1}^m \boldsymbol{m}_j^T\boldsymbol{m}_j = \sigma^2\ \mathrm{tr}\,M^TM\end{aligned}$$

一方，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の一般逆行列 $M$ による解 $\boldsymbol{x} = M\boldsymbol{b}$ のなかでノルム $\|\boldsymbol{x}\|$ （ここに，$\|\boldsymbol{x}\|^2 = \boldsymbol{b}^TM^TM\boldsymbol{b}$）を最小にするのは，ムーア・ペンローズ一般逆行列 $A^\dagger$ によって与えられるので，推定量 $\widehat{\boldsymbol{\xi}}$ は $\boldsymbol{\xi}$ の最小分散不偏推定量となっている．

右辺の $m$–列ベクトル $\boldsymbol{b}$ が観測されたとき，この観測結果 $\boldsymbol{b}$ に連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ が数理モデルとして適合するかどうか，換言すると，モデルとして妥当かどうかを調べよう．$\boldsymbol{b} \in N(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2E_m)$ と仮定し，$\sigma^2$ は既知とする．$\boldsymbol{x}$ の母平均 $\boldsymbol{\xi}$ の最小分散不偏推定量 $\widehat{\boldsymbol{\xi}} = A^\dagger\boldsymbol{b}$ をとったとき，$\boldsymbol{b}$ と $\widehat{\boldsymbol{b}} = A\widehat{\boldsymbol{\xi}}$ との食違いの量

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^m\left(\frac{b_i-\widehat{b}_i}{\sigma}\right)^2 = \frac{1}{\sigma^2}\|\boldsymbol{b}-\widehat{\boldsymbol{b}}\|^2$$

はカイ二乗分布に従う．$\widehat{\boldsymbol{b}}$ を得るのに，$\boldsymbol{b}$ から得られる $n$ 個の推定値 $\widehat{\xi}_1, \widehat{\xi}_2, \cdots, \widehat{\xi}_n$ を用いているので，この統計量の自由度は $f = m - n$ となる．

帰無仮説 $H_0$:　$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ は $\boldsymbol{b}$ に適合する

を

対立仮説 $H_1$:　$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ は $\boldsymbol{b}$ に適合しない

に対して，有意水準 $\alpha\,(= 100\times\alpha\,\%)$ で検定する場合には，与えられた観測データ $\boldsymbol{b}$ から $\chi^2$ の値 $\chi_O^2$ を計算する．自由度 $f$ のカイ二乗分布の上側 $\alpha$ 点 $\chi_f^2(\alpha)$ に対して，$\chi_O^2 > \chi_f^2(\alpha)$ ならば，帰無仮説 $H_0$ を捨てる．

ここに，$\chi_O^2$ は

$$\chi_O^2 = \frac{1}{\sigma^2}\left\{\|\boldsymbol{b}\|^2 - \sum_{j=1}^r(\boldsymbol{u}_j,\boldsymbol{b})^2\right\}$$

で与えられる．実際には，$\sigma^2$ は未知だから，その推定量 $\widehat{\sigma^2}$ で置き換えた

$$\chi_O^2 \approx \frac{1}{\widehat{\sigma^2}}\left\{\|\boldsymbol{b}\|^2 - \sum_{j=1}^{r}(\boldsymbol{u}_j,\boldsymbol{b})^2\right\}$$

を自由度 $f=m-(n+1)$ で用いる．

## 4. 推定量の正則化

前項の如く，連立一次方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ において，係数行列 $A$ の各成分は確定値をとり，右辺 $\boldsymbol{b}$ は構造 $\boldsymbol{b}=\boldsymbol{\beta}+\boldsymbol{\epsilon}$ をもつと仮定する．ここに，$E[\boldsymbol{b}]=\boldsymbol{\beta}$，ノイズ $\boldsymbol{\epsilon}$ について $E[\boldsymbol{\epsilon}]=\boldsymbol{0}$，$\mathrm{Cov}[\boldsymbol{\epsilon}]=\sigma^2E_m$ とする．このとき，解 $\boldsymbol{x}$ の母平均 $E[\boldsymbol{x}]=\boldsymbol{\xi}$ の推定量として $\widehat{\boldsymbol{\xi}}=A^{\dagger}\boldsymbol{b}$ を考えると，この $\widehat{\boldsymbol{\xi}}$ は $\boldsymbol{\xi}$ の最小分散不偏推定量であった．すなわち，

$E[\widehat{\boldsymbol{\xi}}]=\boldsymbol{\xi}$,　　分散共分散行列

$$\mathrm{Cov}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}]=\sigma^2\sum_{j=1}^{r}\frac{1}{\lambda_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^T$$

かつ，平均偏差平方和

$$\mathrm{Var}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}]=E[\ \|\widehat{\boldsymbol{\xi}}-\boldsymbol{\xi}\|^2]=\sigma^2\sum_{j=1}^{r}\frac{1}{\lambda_j}.$$

ところで，

$$\widehat{\boldsymbol{\xi}}=A^{\dagger}\boldsymbol{b}=\sum_{j=1}^{r}\frac{(\boldsymbol{u}_j,\boldsymbol{b})}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j$$

であるから，極めて小さな特異値 $\sigma_j$ $(0<\sigma_j\ll 1)$ に対して，推定量 $\widehat{\boldsymbol{\xi}}$ は不安定となり，$\lambda_j=\sigma_j^2$ より $\mathrm{Var}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}]$ は極めて大きな値をとることとなる．この理由により，推定量の分散を小さくしつつ，推定量を安定化する正則化法を導入しなければならない．

そのための 1 つの方法として，以下に述べるランク低減法を提案する．すなわち，

$$A_q^{\dagger}=\sum_{j=1}^{q}\frac{1}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{u}_j^T,\quad \widehat{\boldsymbol{\xi}}_q=A_q^{\dagger}\boldsymbol{b}$$

としよう．番号 $q$ は正則化のパラメータと考えることができる．このとき，$\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q$ は $\boldsymbol{\xi}$ の不偏な推定量とはならないことに注意する．実際，

$$\begin{aligned}E[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q]&=A_q^{\dagger}E[\boldsymbol{b}]=A_q^{\dagger}\boldsymbol{\beta}\\&=\left(A^{\dagger}-\sum_{j=q+1}^{r}\frac{1}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{u}_j^T\right)\boldsymbol{\beta}\\&=A^{\dagger}\boldsymbol{\beta}-\sum_{j=q+1}^{r}\frac{1}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{u}_j^T\boldsymbol{\beta}\\&=\boldsymbol{\xi}-\sum_{j=q+1}^{r}\frac{(\boldsymbol{u}_j,\boldsymbol{\beta})}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j\neq\boldsymbol{\xi}\end{aligned}$$

となってしまうからである．従って，偏りの大きさは

$$\begin{aligned}&\|E[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q]-\boldsymbol{\xi}\|^2\\&=\left(-\sum_{j=q+1}^{r}\frac{(\boldsymbol{u}_j,\boldsymbol{\beta})}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j\right)^T\left(-\sum_{k=q+1}^{r}\frac{(\boldsymbol{u}_k,\boldsymbol{\beta})}{\sigma_k}\boldsymbol{v}_k\right)\\&=\sum_{j,k=q+1}^{r}\frac{(\boldsymbol{u}_j,\boldsymbol{\beta})(\boldsymbol{u}_k,\boldsymbol{\beta})}{\sigma_j\sigma_k}\delta_{jk}\\&=\sum_{j=q+1}^{r}\frac{(\boldsymbol{u}_j,\boldsymbol{\beta})^2}{\sigma_j^2}=\sum_{j=q+1}^{r}\frac{(\boldsymbol{u}_j,\boldsymbol{\beta})^2}{\lambda_j}\end{aligned}$$

で与えられる．

次に，$\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q$ の分散共分散行列 $\mathrm{Cov}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q]$ を求めてみよう．

$$\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q-E[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q]=A_q^{\dagger}\boldsymbol{b}-A_q^{\dagger}\boldsymbol{\beta}=A_q^{\dagger}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{\beta})=A_q^{\dagger}\boldsymbol{\epsilon}$$

より，

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q]&=E[(\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q-E[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q])(\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q-E[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q])^T]\\&=A_q^{\dagger}E[\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon}^T](A_q^{\dagger})^T\\&=A_q^{\dagger}\sigma^2E_m(A_q^{\dagger})^T=\sigma^2A_q^{\dagger}(A_q^{\dagger})^T.\end{aligned}$$

ところが

$$\begin{aligned}A_q^{\dagger}(A_q^{\dagger})^T&=\sum_{j=1}^{q}\frac{1}{\sigma_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{u}_j^T\sum_{k=1}^{q}\frac{1}{\sigma_k}\boldsymbol{u}_k\boldsymbol{v}_k^T\\&=\sum_{j,k=1}^{q}\frac{1}{\sigma_j\sigma_k}\boldsymbol{v}_j\delta_{jk}\boldsymbol{v}_k^T=\sum_{j=1}^{q}\frac{1}{\sigma_j^2}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^T\end{aligned}$$

であるから，

$$\mathrm{Cov}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q]=\sigma^2\sum_{j=1}^{q}\frac{1}{\lambda_j}\boldsymbol{v}_j\boldsymbol{v}_j^T.$$

この結果を用いると，正則化された推定量 $\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q$ の平均偏差平方和は

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q]&=E[\,\|\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q-E[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q]\,\|^2]\\&=\mathrm{tr}\,\mathrm{Cov}[\widehat{\boldsymbol{\xi}}_q]=\sigma^2\sum_{j=1}^{q}\frac{1}{\lambda_j}\sum_{i=1}^{n}v_{ij}^2\\&=\sigma^2\sum_{j=1}^{q}\frac{\|\boldsymbol{v}_j\|^2}{\lambda_j}=\sigma^2\sum_{j=1}^{q}\frac{1}{\lambda_j}\end{aligned}$$

となる．ただし，$\boldsymbol{v}=(v_{1j},v_{2j},\cdots,v_{nj})^T$ とした．

以上から，番号 $q$ を小さくとると，推定の偏りは大きくなるが，バラツキは減ることがわかる．最適な $q$ としては，偏り $\displaystyle\sum_{j=q+1}^{r}\frac{(\boldsymbol{u}_j,\boldsymbol{b})^2}{\lambda_j}$ とバラツキ $\displaystyle\sigma^2\sum_{j=1}^{q}\frac{1}{\lambda_j}$ の双方が小さいことが望ましい．このような事情から，バラツキの $\sigma^2$ をその推定量 $\widehat{\sigma}^2$ で置き換え，横軸にバラツキの推定量，縦軸に偏りをとった点が原点に最も近づく $q$ を準最適な $\widehat{q}_{\mathrm{opt}}$ と定めることにする．

## 5. 計算例

ノイズベクトルとして $\Delta\boldsymbol{b}=\varepsilon\boldsymbol{b}$ とする．ここで $\varepsilon$ は，$[-0.01,+0.01]$ 区間での一様乱数である．よって，$\|\Delta\boldsymbol{b}\|_{\mathbb{R}^m}\leq\delta=0.01\|\boldsymbol{b}\|_{\mathbb{R}^m}$ となる．また，計算は倍精度と十進 100 桁で行った．

図 1 に多点差分法における差分点 941 個の配置を示す．図 2 に $q$ の値に対する $F^{\delta}(q)$ の変化を示す．計算桁数の違いによらず $q=337$ で最小値をとった．図 3 と図 4 に，単位円周全体に沿っての境界値 $u$ の計算結果を，正解と並べて示す．ランク低減法の効果は顕著であるが，計算桁数の違いによる影響は少ないことが見て取れる．なお，ノイズがない場合 $(\Delta \boldsymbol{b}=\boldsymbol{0})$，ランク低減なしの数値解は正解に一致することを確認した．

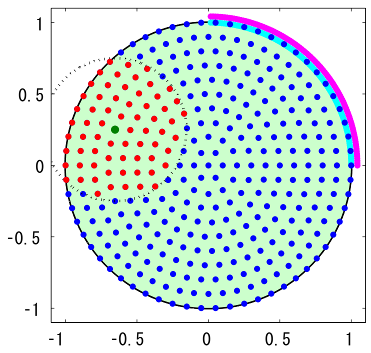


Fig. 1　求積点配置 (941 点)

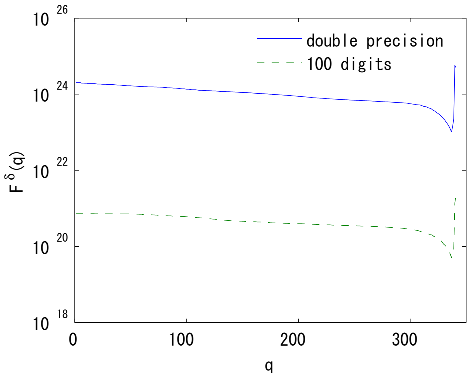


Fig. 2　関数 $F^{\delta}(q)$

この例題における準最適な $q_{\rm opt}^{\delta}$ は 337 であったが，337 の前後の $q$ に対する解 $\boldsymbol{x}_q^{\delta\dagger}$ の挙動を図 5 に示す．$q=320$ のときの $\boldsymbol{x}_q^{\delta\dagger}$ は，ほぼ $\boldsymbol{0}$ に近い．$q=335$ でようやく初期データが復元され，$q=336, 338$ のときには準最適な値 337 に凡そ一致する $\boldsymbol{x}_q^{\delta\dagger}$ を得るが，$q=339$ ではランクがわずか $2=339-337$ しか違わないにもかかわらず解は激しく振動することが観測される．図 6 は，準最適ランク 337 の前後における特異成分 $|(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b})|^2/\sigma_j^2$ と $|(\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{b}^{\delta})|^2/\sigma_j^2$ の分布を各 $j$ について調べたものである．$j \leqq 338$ において両者の分布はほぼ一致しており，$j \geqq 339$ において両者の違いは顕著である．したがって，本報で提案した準最適ランク基準は妥当であると考えられる．

最後に，本報の 4 節に述べた推定量の正則化における基準 $\widehat{q}_{\rm opt}$ に関する計算例は，今後の研究で示す予定である．

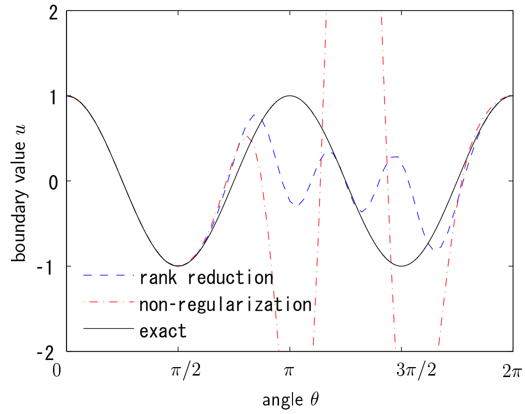


Fig. 3　計算結果 (倍精度)

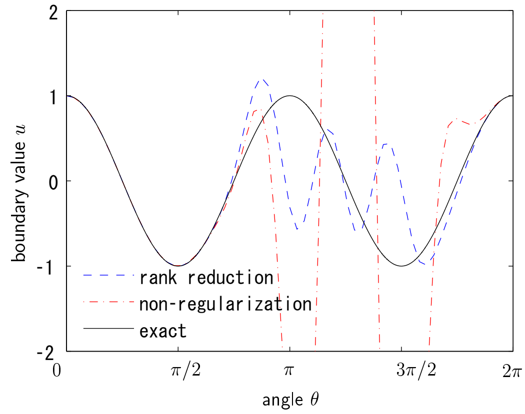


Fig. 4　計算結果 (十進 100 桁)


**謝辞**

本研究は，文部科学省科学研究費補助金基盤研究 (C) 「差分法に基づく超高精度数値解法の構築と非適切な偏微分方程式逆問題への応用」(課題番号: 18540108) の補助を受けました．ここに謝意を表します．


## 参考文献


(1) H. Imai, T. Takeuchi and M. Kushida: On numerical simulation of partial differential equations in infinite precision. *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, Gakkōtosho, Tokyo, **9** (2) (1999), 1007–1016.

(2) H. Fujiwara and Y. Iso, Numerical challenge to ill-posed problems by fast multiple-precision system. *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, **50** (2001), 419–424.

(3) T. Takeuchi and H. Imai: Direct numerical simulations of Cauchy problems for the Laplace operators. *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, Gakkōtosho, Tokyo, **13** (2) (2003), 587–609.

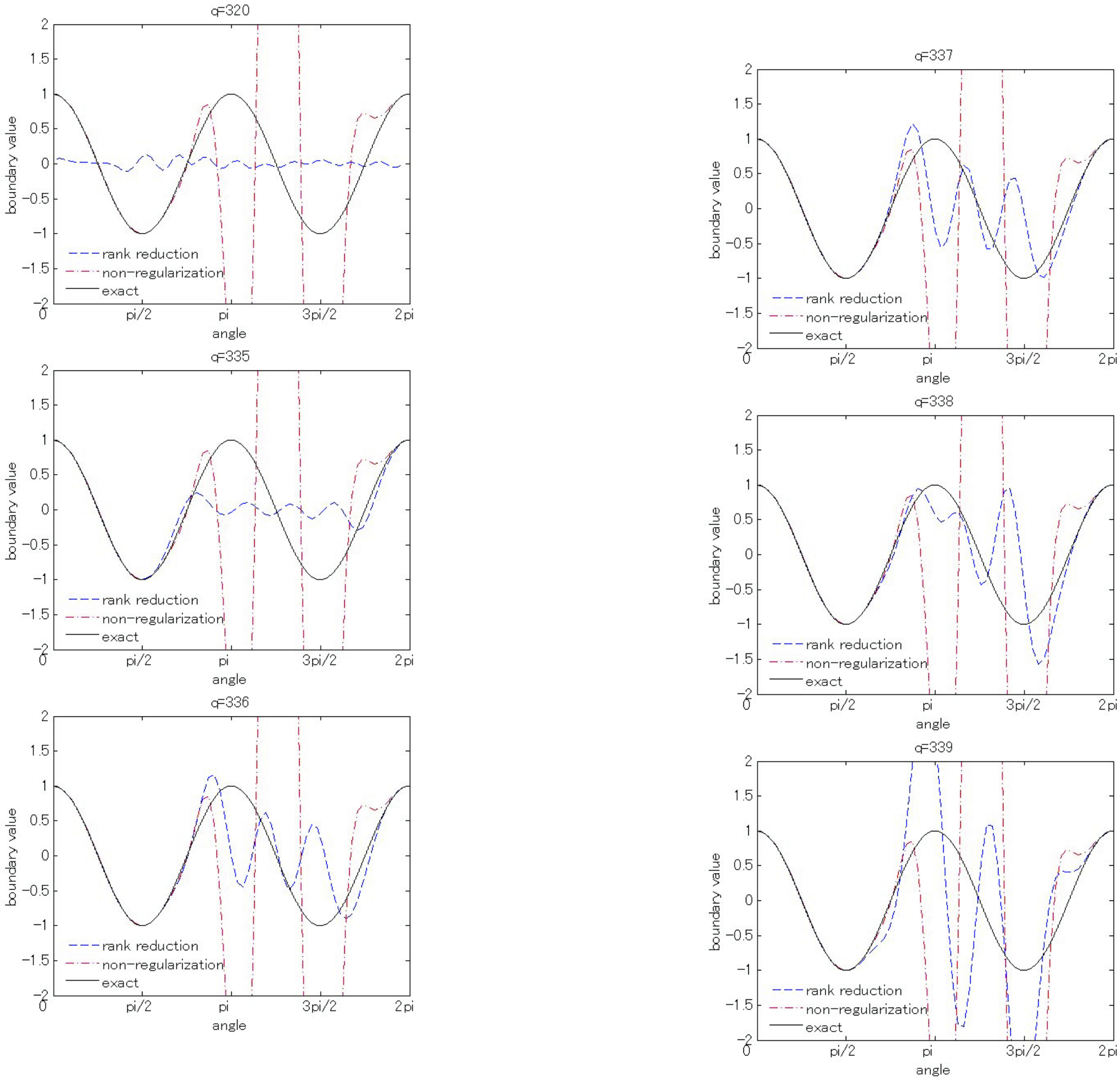


Fig. 5　ランクによる解の変化

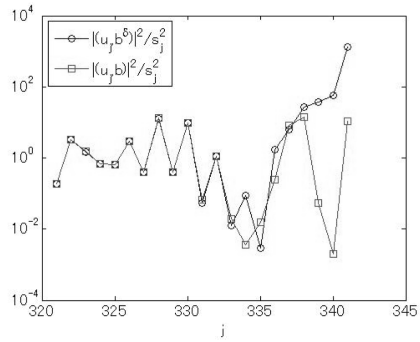


Fig. 6　解の特異成分分布

(4) K. Iijima: Application of high order finite difference approximation as exponential interpolation, *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, **53** (2004), 239–247.

(5) K. Iijima, M. Nakada, K. Saito and K. Onishi: Usefulness of multiple-precision arithmetic for numerical solution of inverse problems. *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, **54** (2005), 307–317.

(6) K. Iijima and K. Onishi: Lattice-free finite difference method for numerical solution of inverse heat conduction problom. *Inverse Problems in Science and Engineering Journal*, **15** (2) (2007), 93–106.

(7) 竹内敏己, 今井仁司: ラプラス作用素の Cauchy 問題の解の接続に関するいくつかの数値計算. 第 57 回理論応用力学講演会 講演論文集, (2008), 515–516.

(8) 繁田岳美, 楊 徳良: 解に特異点を有する Laplace 方程式の Cauchy 問題に対する代用電荷法を用いた解の調和接続. 第 57 回理論応用力学講演会 講演論文集, (2008), 519–520.

(9) `http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib/index.html`