

コレスキー分解, 安定条件と首座小行列

清家大嗣

平成 31 年 11 月 23 日

1 コレスキー分解, 安定条件と首座小行列

1.1 コレスキー分解

コレスキー分解は, 実対称行列 A (複素対称行列についても言えるが, 本稿では実対称行列に限定する) をある下三角行列 L とそのエルミート転置行列 L^* の積に分解する. つまり, 次式が成立する L を求める.

$$A = LL^* \quad (1)$$

対称行列に関する分解であることから, LU 分解とは異なる工夫が可能である. $A^{(1)} = A$ と定義する. また, $i-1$ 回目のステップのプロセスを経た行列を次式で定義する.

$$A^{(i)} = \begin{pmatrix} I_{i-1} & 0 & 0 \\ 0 & a_{i,i} & \mathbf{b}_i^* \\ 0 & \mathbf{b}_i & B^{(i)} \end{pmatrix} \quad (2)$$

ここで, 行列 L_i を (5) 式で定義し, $A^{(i+1)}$ を (6) 式で定義すると, $A^{(i)} = L_i A^{(i+1)} L_i^*$ が成立する.

$$L_i = \begin{pmatrix} I_{i-1} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{a_{i,i}} & 0 \\ 0 & \mathbf{b}_i & B^{(i)} \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$A^{(i+1)} = \begin{pmatrix} I_{i-1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & B^{(i)} - \frac{1}{a_{i,i}} \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^* \end{pmatrix} \quad (4)$$

つまり, 再帰的に $A = A^{(1)} = L_1 A^{(2)} L_1^* = L_1 \dots L_n A^{(n+1)} L_n^* \dots L_1^*$ となり, 行列 $L = L_1 \dots L_n$ を得ることができる. しかし, 半正定値行列でないと途中の平方根演算部 $a_{i,i}$ が負となってしまう計算が安定しないという問題がある. 半正定値行列である場合, 固有値が全て正であることから固有ベクトルを用いた直交行列により (3) 式を満たす実行列 L を求めることもできる ([1]).

1.2 安定条件と正定値について

通常のコレスキー分解は, (3) 式のように演算に複素数が出現する可能性がある. 従って, 複素数が出ない条件について考察するのは手法の安定条件という側面から有用と思われる. ずばり, 複素数が出ない条件とは行列 A が正定値行列であることと一致する. このことは, 数学的帰納法より (5) 式から確認できる. (5) 式の $\tilde{a}_{i,j}^k$ は k 番目の首座小行列に関する i 行, j 列の余因子を表している. (5) 式ではコレスキー分解の手続きを k 回実行したときの $k+1 \sim k+2$ 行, $k+1 \sim k+2$ 列の値に着目している.

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{-\bar{a}_{k+2,k+2}^{(k+2)}}{\bar{a}_{k+1,k+1}^{(k+1)}} & \frac{-\bar{a}_{k+2,k+1}^{(k+2)}}{\bar{a}_{k+1,k+1}^{(k+1)}} & * \\ \vdots & \frac{-\bar{a}_{k+1,k+2}^{(k+2)}}{\bar{a}_{k+1,k+1}^{(k+1)}} & \frac{\bar{a}_{k+1,k+1}^{(k+2)}}{\bar{a}_{k+1,k+1}^{(k+1)}} & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix} \quad (5)$$

つまり、これから $k+1$ 回目の手続きをした場合に、 $k+2$ 行、 $k+2$ 列の値がどうなるか、ということが問題となる。(2) から (4) 式に至る手続きを再現すると、(5) 式は (6) 式のように変換できる¹。

$$A^{(k+1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & * \\ \vdots & 0 & \frac{\bar{a}_{k+3,k+3}^{(k+3)}}{\bar{a}_{k+2,k+2}^{(k+2)}} & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{pmatrix} \quad (6)$$

このことは、(6) 式の $k+2$ 行、 $k+2$ 列の分子は $k+2$ 番目の首座小行列式であり、分母は $k+1$ 番目の首座小行列を表している。つまり、1 番目の首座行列式が正 (仮定) から帰納的に $2, 3, \dots, k$ 番目の首座小行列式も正となることが分かる²。

参考文献

- [1] 高校数学の美しい物語「半正定値行列の同値な4つの定義(性質)と証明」<https://mathtrain.jp/positivesemi> (2019-11-05 アクセス)

¹この演算は、各余因子の演算元となる行列式の元の行列成分について考えると理解できる。具体的には、 $k+1 \sim k+2$ 行、 $k+1 \sim k+2$ 列に関与しない成分が全て打ち消しあうことから分かる

²他の行列成分もここでの演算と同様なことをしているだけであるため、省略する。これは、余因子を用いた記法が有効でないための便宜的な理由であるが、本質的に同一の演算を繰り返していることから容易に計算を追うことができる