特異値分解, LU 分解, コレスキー分解について

清家大嗣

2024 年 1 月 7 日

1　特異値分解, LU 分解, コレスキー分解

1.1　特異値分解 (Singular Value Decomposition) [1, 2]

任意の $m \times n$ 実行列 A は (1) 式のように分解できる．ただし, Λ は対角成分以外全て 0 の $m \times n$ 行列であり, V, U は $m \times m$, $n \times n$ の直交行列である．本節では, そのことを証明する (一般に $m > n$ として構わない).

$$A = V \Lambda U^T \tag{1}$$

最初に, 行列 A から計算される $n \times n$ 実行列 $A^T A$ について考える．行列の転置に関する公式から, $A^T A$ は実対称行列となる．実対称行列の固有値は全て実数である．また, 固有値を λ, 固有ベクトルを $\boldsymbol{x}$ として, $\boldsymbol{x}^T A^T A \boldsymbol{x} = \lambda ||\boldsymbol{x}||^2 \geq 0$ より, λ は非負でもある．それを基に $0 \leq r \leq n$ 個の非ゼロの固有値・固有ベクトルを考える ($\xi_i, \boldsymbol{u}_i$ と定義する)．これら r 個の固有ベクトルに対して同時に r 個のベクトル $\boldsymbol{v}_i \equiv A\boldsymbol{u}_i/\sqrt{\xi_i}$ を定義する．

r 個の固有値が非ゼロの固有ベクトルに加え, $n - r$ 個の固有値が 0 である固有ベクトルを考える．これら n 個の正規直交ベクトルにより行列 $U = [\boldsymbol{u}_1, ..., \boldsymbol{u}_n]$ を生成することができる ($\boldsymbol{u}_j$ は, $j > r$ で固有値が 0 の固有ベクトルとなる)．これに加え, $m - r$ 個の正規直交ベクトルをグラムシュミットの直交化などにより追加した $m \times m$ 行列 V を $[\boldsymbol{v}_1, ..., \boldsymbol{v}_m]$ と定義する．ここで, $V^T A U$ を計算すると, 左上から r 個の対角成分のみ $\sqrt{\xi_i}$ となり[1], 他の成分が 0 となる対角行列 Λ が得られる．これらをうまく整理すれば, (1) 式が得られる．

1.2　LU 分解 (LU decomposition)

LU 分解とは, 正方行列 A を下三角行列 L と上三角行列 U に分解することである．下三角行列または上三角行列の対角成分を全て 1 とし[2], 残りの n^2 個の成分を未知変数とすれば, (2) 式の行列計算より得られる n^2 個の式を用いて全ての未知変数を計算できる．亜種として, 対角成分が全て 1 の下三角行列, 対角行列, 対角成分が全て 1 の上三角行列 (L, D, U) に分解する LDU 分解も存在する．

$$A = LU \tag{2}$$

[1] AU は, $m \times n$ 行列であり, j 列目 $(1 \leq j \leq r)$ の列ベクトルは $A\boldsymbol{u}_j = \xi_j \boldsymbol{u}_j$ となる．また, $r + 1 \leq j \leq n$ の場合 $A\boldsymbol{u}_j = \xi_j \boldsymbol{u}_j = 0 \cdot \boldsymbol{u}_j = 0$ となる．従って, $V^T A U$ の $r + 1$ 以上の列成分は全て 0 となり, r 以下の列であり, $r + 1$ 以上の行成分も 0 となる (行列 V は直交行列であり, ある $\boldsymbol{u}_j$ $(1 \leq j \leq r)$ と平行なベクトルは 1 つしか存在しない).

[2] 下三角行列の対角成分を 1 にする手法をドゥーリトル法, 上三角行列の対角成分を 1 とする手法をクラウト法と呼ぶ．

1.2.1 LDU 分解の一意性の証明 [3]

n 次の正方行列 A の LDU 分解が存在する場合, LDU 分解は一意となる. 仮に $L'D'U'$ という別の LDU 分解が存在する場合, $A = LDU = L'D'U'$ となり, $L'^{-1}LD = D'U'U^{-1}$ が成立する. $L'^{-1}L = U'U^{-1} = E_n$ (E_n は単位行列) となるため, $D = D'$ が成立する. また, 逆行列の一意性より $L = L', U = U'$ も成立する. 従って, LDU 分解が存在する場合, その分解は一意となる.

1.3 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.

$$A = LL^* \tag{3}$$

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.

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

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.

$$L_i = \begin{pmatrix} I_{i-1} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{a_{i,i}} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{b}_i & B^{(i)} \end{pmatrix} \tag{5}$$

$$A^{(i+1)} = \begin{pmatrix} I_{i-1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & B^{(i)} - \frac{1}{a_{i,i}}\boldsymbol{b}_i\boldsymbol{b}_i^* \end{pmatrix} \tag{6}$$

つまり, 再帰的に $A = A^{(1)} = L_1 A^{(2)} L_1^* = L_1 \ldots L_n A^{(n+1)} L_n^* \ldots L_1^*$ となり, 行列 $L = L_1 \ldots L_n$ 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 $a_{i,i}$ が負となってしまい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 ([4]).

参考文献

[1] ゼロから作る Deep Learning - NLP 編 - . オライリージャパン

[2] 理数アラカルト 「特異値分解の証明」 `https://risalc.info/src/svd.html` (2019-11-05 アクセス)

[3] Taro Asuke's Website 「2009 年度数学 II 演習（理 I 向け） 第 5 回」 `https://www.ms.u-tokyo.ac.jp/~asuke/kougi/ensyuu/09la/e05.pdf` (2019-11-05 アクセス)

[4] 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)