第４５話　行列の分解法

今回は構造力学でよく用いる行列の分解法についてお話しする。行列を分解する目的は、数値計算上の効率化と、その行列の情報をより理解し易く、しかも有効に利用することである。前者は、連立方程式の解法や固有値問題で利用され、後者は、行列式の値や負の固有値の数を効率的に見つけ出すことに使用される。特に、分解後の行列は三角行列や対角行列、あるいは直交行列など、その特性が良く知られた行列となる。また、行列 $\mathbf{A}$ が正方行列であるか、$n \times m$ 次元の長方形行列か、さらに、正方行列が正則であるか、また、実対称行列かによっても分解方法が異なる。数値計算で良く用いられる分解法として、以下の手法がある。

１） ***LU*** 分解（***LU*** factorization, ***LU*** decomposition）

２）コレスキー分解(Cholesky factorization)

３） ***QR*** 分解（*QR* factorization, ***QR*** decomposition）

４）特異値分解(singular value decomposition)

１） *LU* 分解：行列 $\mathbf{A}$ が $n \times n$ の**実正方行列**で、ランクを $r(rank\mathbf{A} = r)$ とする。ここで、主座小行列式が $\det \mathbf{A}_k \neq 0 (k = 1, 2, \cdots, r)$ ならば、行列 $\mathbf{A}$ は次のように分解できる。

$$\mathbf{A} = \bar{\mathbf{L}}\bar{\mathbf{U}} \qquad \cdots\cdots\cdots(1)$$

ここで、$\bar{\mathbf{L}}$ は $n \times n$ の下三角行列、$\bar{\mathbf{U}}$ は同じく $n \times n$ の上三角行列である。このとき、$\bar{\mathbf{L}}$ または $\bar{\mathbf{U}}$ を正則にすることができる。さらに、行列 $\mathbf{A}$ が $r = n$ 、すなわち正則であれば、$\bar{\mathbf{L}}$ と $\bar{\mathbf{U}}$ は共に正則である。この行列 $\mathbf{A}$ は次のようにも分解できる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{LDU} \qquad \cdots\cdots\cdots(2)$$

ここで、行列 $\mathbf{L}, \mathbf{U}$ は、 $n \times n$ の下三角行列と上三角行列であり、共に対角項は全て 1 となる。また、行列 $\mathbf{D}$ は正則な対角行列となる。行列 $\mathbf{A}$ が正則であれば、$\mathbf{L}, \mathbf{U}, \mathbf{D}$ は一意に決定される。

行列 $\mathbf{A}$ が**正則な実対称行列**であるとすると、$\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ であることから

$$\mathbf{A} = \mathbf{LDU} = \mathbf{A}^T = \mathbf{U}^T\mathbf{DL}^T \qquad \cdots\cdots\cdots(3)$$

となり、 $\mathbf{U} = \mathbf{L}^T$ の関係が得られる。従って、上記の行列 $\mathbf{A}$ では、以下のような一意な分解が得られる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{LDL}^T \qquad \cdots\cdots\cdots(4)$$

式(4)において、下三角行列 $\mathbf{L}$ は対角項が全て 1 であることから、その行列式は $|\mathbf{L}| = 1; |\mathbf{L}^T| = 1$ であり、従って、行列 $\mathbf{A}$ の行列式は、

$$|\mathbf{A}| = |\mathbf{L}||\mathbf{D}||\mathbf{L}^T| = |\mathbf{D}| = \prod_{i=1}^{n} d_{ii} \qquad \cdots\cdots\cdots(5)$$

実対称行列 $\mathbf{A}$ の行列式は、$\mathbf{LDL}^T$ 分解することで、左式のように、容易に求められる。

実対称行列 $\mathbf{A}$ が、正則でない場合、少なくとも一つの d_{ii} はゼロとなり、行列 $\mathbf{A}$ の行列式はゼロとなる。

実対称行列 $\mathbf{A}$ において、負の固有値の数が r 個であると、負の値を採る d_{ii} が r 個存在する。

で与えられる。ここで、行列$\mathbf{A}$が正定行列であれば、対角行列$\mathbf{D}$の対角項の符号は全て正であり、また不定行列であれば、負符号の項数は負の固有値の数に等しい。重要な情報なので覚えておこう。

２）**コレスキー分解**：行列$\mathbf{A}$を正定行列であるとすると、行列$\mathbf{D}$の対角項は全て正でなければならない。そこで、行列$\mathbf{D}$から右欄外のように行列$\sqrt{\mathbf{D}}$を定義する。行列$\sqrt{\mathbf{D}}$は$\sqrt{\mathbf{D}}^2=\mathbf{D}$となる行列であり、**平方根行列**(square root matrix)と呼ばれる。次に、上の$\sqrt{\mathbf{D}}$を用いて、行列$\mathbf{C}$を$\mathbf{C}=\mathbf{L}\sqrt{\mathbf{D}}$のように定義する。行列$\mathbf{C}$は正の対角要素を持つ、下三角行列である。この行列$\mathbf{C}$を用いると、式(4)は、次のように変換される。

対角行列の平方根行列

$$\sqrt{\mathbf{D}}=\begin{bmatrix}\sqrt{d_{11}} & & & \\ & \sqrt{d_{22}} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{d_{nn}}\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}=\ \mathbf{L}\sqrt{\mathbf{D}}\sqrt{\mathbf{D}}\mathbf{L}^T;\quad \mathbf{C}^T=(\mathbf{L}\sqrt{\mathbf{D}})^T=\sqrt{\mathbf{D}}\mathbf{L}^T\rightarrow\mathbf{A}=\mathbf{C}\mathbf{C}^T \qquad \cdots\cdots\cdots(6)$$

この分解法はコレスキー分解と呼ばれる。

３）***QR*分解**：行列$\mathbf{A}$が$n\times m$の行列で、しかも、$n\ge m$であるとすると、$n\times m$の直交行列$\mathbf{Q}$と$m\times m$の上三角行列$\mathbf{R}$によって、次のように分解される。

$$\mathbf{A}=\mathbf{Q}\mathbf{R} \qquad \cdots\cdots\cdots(7)$$

ここでもし、行列$\mathbf{A}$が$n=m$でしかも正則であると、行列$\mathbf{Q},\mathbf{R}$は共に一意となる。以下で、行列$\mathbf{A}$がQR分解されることを証明する。

まず、行列$\mathbf{X}$を$\mathbf{X}=\mathbf{A}^T\mathbf{A}$と置く。行列$\mathbf{X}$は$m\times m$次元であり、ランクが$m$であるとすると、対称正定行列となる。そこで、行列$\mathbf{X}$を$\mathbf{X}=\mathbf{C}\mathbf{C}^T$としてコレスキー分解する。さらに、下三角行列$\mathbf{C}$の転置を上三角行列$\mathbf{R}$とすると、上式は、

$$\mathbf{R}=\mathbf{C}^T\quad\rightarrow\mathbf{X}=\mathbf{R}^T\mathbf{R} \qquad \cdots\cdots\cdots(8)$$

として表される。次に、上三角行列$\mathbf{R}$の逆行列$\mathbf{R}^{-1}$を用いると、

$$\mathbf{I}_m=\mathbf{R}\mathbf{R}^{-1} \qquad \cdots\cdots\cdots(9)$$

であり、ここで、$\mathbf{I}_m$は$m\times m$次の単位行列である。上式の両辺左より、$\mathbf{I}_m^T$を掛け、式(8)を用いると次式が得られる。無論、下式の左辺は$\mathbf{I}_m$に等しい。

$$\mathbf{I}_m^T\mathbf{I}_m=(\mathbf{R}\mathbf{R}^{-1})^T\mathbf{R}\mathbf{R}^{-1}=(\mathbf{R}^{-1})^T\mathbf{R}^T\mathbf{R}\mathbf{R}^{-1}=(\mathbf{R}^{-1})^T\mathbf{X}\mathbf{R}^{-1} \qquad \cdots(10)$$

さらに、$\mathbf{X}=\mathbf{A}^T\mathbf{A}$を代入すると、上式は、

$$\mathbf{I}_m=(\mathbf{R}^{-1})^T\mathbf{A}^T\mathbf{A}\mathbf{R}^{-1}=(\mathbf{A}\mathbf{R}^{-1})^T(\mathbf{A}\mathbf{R}^{-1}) \qquad \cdots\cdots\cdots(11)$$

となる。上式は、行列$\mathbf{A}\mathbf{R}^{-1}$とその転置行列との掛け算が単位行列になることを表しており、従って、行列$\mathbf{A}\mathbf{R}^{-1}$は直交行列であることを意味している。この行列$\mathbf{A}\mathbf{R}^{-1}$を$\mathbf{Q}$と置き、

$$\mathbf{A}\mathbf{R}^{-1}=\mathbf{Q} \qquad \cdots\cdots\cdots(12)$$

さらに、上式両辺の右側より行列$\mathbf{R}$を掛けると、

$$\mathbf{A}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{R}=\mathbf{Q}\mathbf{R}\rightarrow\quad\mathbf{A}=\mathbf{Q}\mathbf{R} \qquad \cdots\cdots\cdots(13)$$

となり、QR分解となる。特異値分解については後日お話しする。