Cholesky 分解あれこれ

~ Contents ~

§ 1　Cholesky 分解

◎ LU 分解

定理 1

N 次正則行列 A は $A = LU$ の形に一意に分解できる．
但し，$L : N$ 次正方行列 , $U : N$ 次上三角行列．

◎ LDU 分解

定理 2

N 次正則行列 A は $A = LDU$ の形に一意に分解できる．但し，L, U 及び D はそれぞれ N 次正方行列，N 次上三角行列及び N 次対角行列である．また，U の対角要素は 1 とする．

定理 2 $\rightarrow$

$$A = LDU. \tag{1.1}$$

但し， A : N **次正則行列，** L : N **次下三角行列** ,

U : N **次上三角行列** , $D = \mathrm{diag}[\, d_1, d_2, \cdots, d_N \,]$.

$D^* = \mathrm{diag}[\, d^*_1, d^*_2, \cdots, d^*_N \,]$ **の定義.**

$$\forall\, \hat{L} = \mathrm{diag}[\, \hat{l}_1, \hat{l}_2, \cdots, \hat{l}_N], \hat{U} = \mathrm{diag}[\, \hat{u}_1, \hat{u}_2, \cdots, \hat{u}_N]$$

$$\text{s.t. } \det(\hat{L}) \neq 0, \det(\hat{U}) \neq 0 :$$

$$d^*_k \equiv d_k / (\hat{l}_k \hat{u}_k) \qquad (\text{ for } k = 1, 2, \cdots, N). \tag{1.2}$$

(1.1), (1.2) $\rightarrow$

$$A = L^* D^* U^*. \tag{1.3}$$

但し， $L^* = L\hat{L},\ U^* = \hat{U}U.$

$\hat{L}, \hat{U}, D^*$ の3つの行列の中でどれか2つを与えてやれば, 分解が一意に決まる.

特に, $\hat{L} = \hat{U} = E$ とすれば定理2を得る.

定理3

N 次対称正定値行列 A が $A = LDU$ と分解されたとき, $\hat{L} = \hat{U}$ とすれば, $L^* = U^{*T}$ となる.

A : 対称正定値行列, 定理3→

$$A = L^*D^*L^{*T} = U^{*T}D^*U^*. \tag{1.4}$$

以下では, L^*, U^*, D^* を改めて L, U, D と表し, A が対称正定値行列の場合のみを考える.

◎平方根 Cholesky 分解

分解条件

$$l_{kk} = u_{kk}\,,\ d_k = 1 \quad (\text{ for } k = 1, 2, \cdots, N\ ) \tag{1.5}$$

(1.5)→

$A = LL^T = U^T U.$

◎改訂 Cholesky 分解

分解条件

$$l_{kk} = u_{kk} = 1 \quad (\text{ for } k = 1, 2, \cdots, N\ ) \tag{1.6}$$

(1.6)→

$A = LDL^T = U^T DU\ .$

◎ Meijerink の Cholesky 分解

分解条件

$$l_{kk} = u_{kk} = d_k^{-1} \quad (\text{ for } k = 1, 2, \cdots, N\ ) \tag{1.7}$$

(1.7)→

A $= LDL^T = U^T DU$.

Meijerink の Cholesky **分解をもとに不完全** Cholesky **分解を行う.**

Algorithm 1.1　Meijerink の Cholesky 分解

$A = (a_{ij})$: N **次対称正定値行列,**

$L = (l_{ij})$: N **次下三角行列,**

$D = \mathrm{diag}[\, d_1, d_2, \cdots, d_N \,]\,.$

do $i = 1, 2, \cdots, N$

　do $j = i, i+1, \cdots, N$

　　$$l_{ji} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} d_k l_{jk}\,,$$

　$d_i = l_{ii}^{-1}\,,$

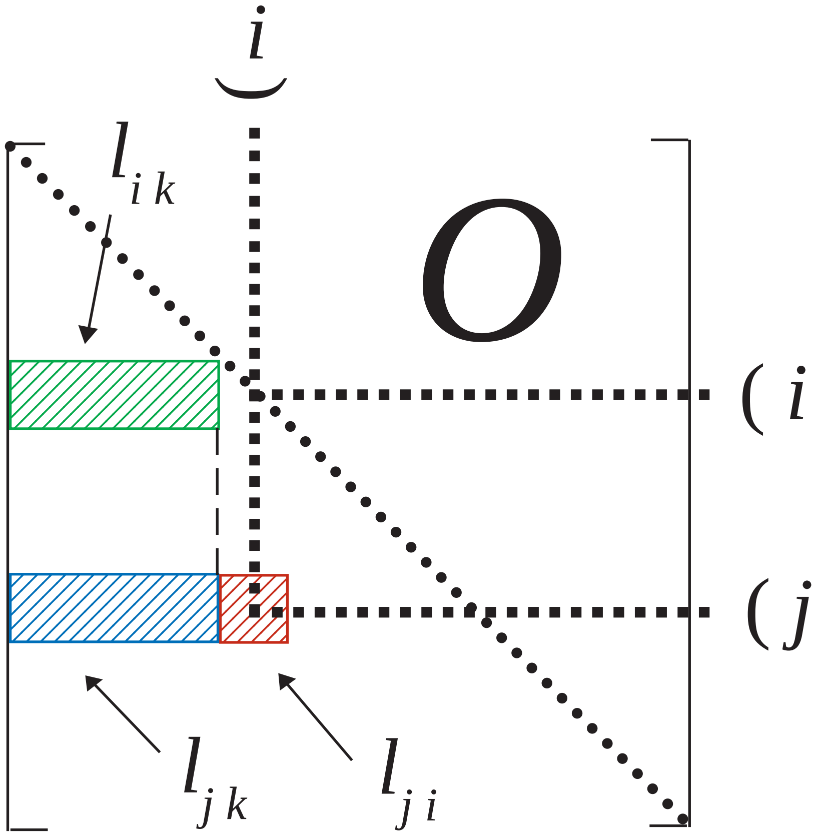

Fig. 1.1.　**行列** L.

§ 2　不完全 Cholesky 分解

共役勾配法(CG 法)に対する前処理法として考え出された.

不完全 Cholesky 分解

1)　$a_{ij} = 0$ ならば $l_{ji} = 0$,

2)　$|l_{ii}| < \varepsilon$ ならば $l_{ii} = \varepsilon$.

但し，ε : 正定数 .

$l_{ii} = 0$ の場合も許されているので行列が対称であれば適用可能.

Algorithm 2.1　不完全 Cholesky 分解

$A = (a_{ij})$: N 次対称行列，$L = (l_{ij})$: N 次下三角行列，

$D = \mathrm{diag}[\, d_1, d_2, \cdots, d_N \,]$.

do $i = 1, 2, \cdots, N$

do $j = i, i+1, \cdots, N$

if($a_{ij} \neq 0$) then

$$l_{ji} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} d_k l_{jk} ,$$

else

$$l_{ji} = 0 ,$$

if($|l_{ii}| < \varepsilon$)　$l_{ii} = \varepsilon$,

$d_i = l_{ii}^{-1}$,

◎ fill in

$a_{ij} = 0$ である行列 A を改訂 Cholesky 分解したとき，$l_{ji} \neq 0$ となることを " fill in が起きる " という．

不完全 Cholesky 分解では $a_{ij} = 0$ ならば $l_{ji} = 0$. → fill in は起きない．

◎ ICCG 法

$$Ax = \boldsymbol{b}, \tag{2.1}$$

但し，$\boldsymbol{b}$: N 次元既知ベクトル，$\boldsymbol{x}$: N 次元解ベクトル．

A を不完全 Cholesky 分解 →

$$A \simeq LDL^T, \tag{2.2}$$

但し，L : 下三角行列，$D = \mathrm{diag}[\, d_1, d_2, \cdots, d_N \,]$.

(2.2) $\Leftrightarrow$

$$(LD^{1/2})^{-1} A (LD^{1/2})^{-T} \simeq E , \tag{2.3}$$

但し， $D^{1/2} = \mathrm{diag}[\, d_1^{\,1/2}, d_2^{\,1/2}, \cdots, d_N^{\,1/2} \,].$

(2.1) $\Leftrightarrow$

$$B\boldsymbol{z} = \boldsymbol{c}, \tag{2.4}$$

但し， $B = (LD^{1/2})^{-1} A (LD^{1/2})^{-T}$, $\boldsymbol{z} = (LD^{1/2})^{-T} \boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{c} = (LD^{1/2})^{-1} \boldsymbol{b}$.

(2.4)に対しCG法を適用すれば，少ない反復回数で解を得ることができる．

Appendix

○定理１の証明

正則行列 A に対し部分軸選択の前進消去を行えば，前進消去終了後に得られる上三角行列の対角要素は必ず非零な値になる．故に，A を一意に分解できる．

○定理２の証明

定理１より A を $A = LU$ と一意に分解できる．$L = (l_{ij}), U = (u_{ij})$とする．ここで，対角行列 $D = \mathrm{diag}[d_1, d_2, \cdots, d_N]$と上三角行列 $\tilde{U} = (\tilde{u}_{ij})$を以下のように定義する．

$$d_k \equiv u_{kk} \qquad (\text{for } k = 1, 2, \cdots, N),$$

$$\tilde{u}_{ij} \equiv u_{ij} / d_i \qquad (\text{for } j = 1, 2, \cdots, N \,; i = 1, 2, \cdots, j).$$

定義より明らかなように，D は一意に定まり，$U = D\tilde{U}$となる．

故に，A を $A = LD\tilde{U}$ と一意に分解できる．$\tilde{U}$ を改めて U とすれば

$A = LDU$ となる．

○定理 3 の証明

正定値行列の対角要素は必ず正になる．何故ならば，任意のベクトル $\boldsymbol{x}$ に対し，正定値行列 A の 2 次形式：$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x})$ は必ず正になるが，特に $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}_i$ とすれば，

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{e}_i, A\boldsymbol{e}_i) = a_{ii} > 0 \qquad (\text{for } i = 1, 2, \cdots, N).$$

また，対称正定値行列Aに対して，$| a_{rr} | \leq | a_{rs} |$, $| a_{ss} | \leq | a_{rs} |$ $(r \neq s)$ とすると矛盾を生ずる．何故ならば，$\boldsymbol{e}_{\alpha\beta} = \alpha \boldsymbol{e}_r + \beta \boldsymbol{e}_s$ に対して A の 2 次形式を考えると，

$$(\boldsymbol{e}_{\alpha\beta}, A\boldsymbol{e}_{\alpha\beta}) = a_{rr}\alpha^2 + 2a_{rs}\alpha\beta + a_{ss}\beta^2 > 0 \ ,$$

となる．$a_{rr} > 0$, $a_{ss} > 0$ であるから，判別式は $a_{rs}^{\ 2} - a_{rr}a_{ss} < 0$ となり条件に反する．

上記の結果とガウスの消去法では行列の対称性と正値性は保存されることを考慮すれば, 対称正定値行列に対しては部分軸選択無しのGaussの消去法が適用可能であることがわかる．即ち, AをLU分解したときLが下三角行列になる．

定理2より，対称正定値行列Aは,

$A = LDU,$

と一意に分解される．Aは対称行列であるからA^Tは,

$A^T = A = LDU = U^T DL^T ,$

となる．分解の一意性より,

$L = U^T.$

ここで, $\hat{L} = \hat{U}$ であるから,

$L^* = U^{*T} .$

Algorithm A.1　平方根 Cholesky 分解

$A = (a_{ij})$: N 次対称正定値行列,
$L = (l_{ij})$: N 次下三角行列.

do $i = 1, 2, \cdots, N$

$$l_{ii} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2\right)^{\frac{1}{2}},$$

do $j = i+1, i+2 \cdots, N$

$$l_{ji} = \frac{1}{l_{ii}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} l_{jk}\right),$$

Algorithm A.2　改訂 Cholesky 分解

$A = (a_{ij})$: N 次対称正定値行列,

$L = (l_{ij})$: N 次下三角行列,

$D = \mathrm{diag}[\, d_1, d_2, \cdots, d_N \,]$.

do $i = 1, 2, \cdots, N$

$$l_{ii} = 1\ ,\ \ d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} d_k l_{ik}^2\ ,$$

do $j = i+1, i+2, \cdots, N$

$$l_{ji} = \frac{1}{d_i}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} d_k l_{jk} \right)\ ,$$

○CG法とICCG法のアルゴリズムの相違点

CG 法	ICCG 法
$\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{r}_0$	$\boldsymbol{p}_0 = (\tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^T)^{-1}\boldsymbol{r}_0$
$\alpha_k = \dfrac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}$	$\alpha_k = \dfrac{\left(\boldsymbol{r}_k, \left(\tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^T\right)^{-1}\boldsymbol{r}_k\right)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}$
$\beta_k = \dfrac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{r}_{k+1})}{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k)}$	$\beta_k = \dfrac{\left(\boldsymbol{r}_{k+1}, \left(\tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^T\right)^{-1}\boldsymbol{r}_{k+1}\right)}{\left(\boldsymbol{r}_k, \left(\tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^T\right)^{-1}\boldsymbol{r}_k\right)}$
$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_\kappa \boldsymbol{p}_k$	$\boldsymbol{p}_{k+1} = (\tilde{L}\tilde{D}\tilde{L}^T)^{-1}\boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_\kappa \boldsymbol{p}_k$