大循環ゼミ　用語説明

SVD (Singular Value Decomposition：特異値分解）解析

2008年1月8日（火）

生命環境科学研究科1年　加藤 真悟

はじめに

- 多くの観測点において得られた物理量（気圧、気温など）の時系列群から、
  - その場において最も卓越
  - かつ、意味のあるモード（空間パターン）

  を抽出することは、現象の背後にあるプロセスを理解する上で重要である

- ある1つの場（気圧場など）において卓越するモードを取り出す手法としては、EOF解析がよく使われる

EOF解析

- ある1つの場における時間変動の中で、最も卓越する空間パターンを取り出す
  - 北半球冬季の海面更正気圧
  - 太平洋のSST
- 分散共分散行列の固有値問題
  - 最も大きな固有値に対応する固有ベクトルが、最も卓越する空間パターン
- 固有値の総和＝各地点の分散の総和

SVD解析

- 異なる2つの物理量の場（例：500 hPa 高度とSST）において、最も相関関係が高い時空間構造を、それぞれの場において見いだす解析手法
- 相互関係のみに着目している点で優れている
  - したがって、必ずしも第1モードがそれぞれの場の変動において最も卓越しているとは限らない

共分散行列の作成

- 2つの物理量 A と B のアノマリデータを以下のように用意する(一般に格子点数は異なるが、時間方向のデータ数は同じ)

Z500

$$\underset{N\times T}{\boldsymbol{A}} = \begin{pmatrix} a_1(1) & a_1(2) & \cdots & a_1(T) \\ a_2(1) & a_2(2) & \cdots & a_2(T) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_N(1) & a_N(2) & \cdots & a_N(T) \end{pmatrix}$$

地点番号　時刻

各成分はアノマリデータ

T850

$$\underset{M\times T}{\boldsymbol{B}} = \begin{pmatrix} b_1(1) & b_1(2) & \cdots & b_1(T) \\ b_2(1) & b_2(2) & \cdots & b_2(T) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_M(1) & b_M(2) & \cdots & b_M(T) \end{pmatrix}$$

- 共分散行列 C を作成

物理場Aにおける地点1のデータと物理場B
における地点2のデータの共分散

$$
\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^\top
$$

$$
= \begin{pmatrix}
\sum_{t=1}^{T} a_1(t)b_1(t) & \sum_{t=1}^{T} a_1(t)b_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} a_1(t)b_M(t) \\
\sum_{t=1}^{T} a_2(t)b_1(t) & \sum_{t=1}^{T} a_2(t)b_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} a_2(t)b_M(t) \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\sum_{t=1}^{T} a_N(t)b_1(t) & \sum_{t=1}^{T} a_N(t)b_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} a_N(t)b_M(t)
\end{pmatrix}
$$

N×Mの長方行列

※同じ場の共分散は入らない

特異値分解

- 任意の行列 A は、以下のように特異値分解できる

$$A = U\Sigma V^\top$$

- ここで、

N×N

$$U = (u_1, u_2, \cdots, u_N)$$ 左特異ベクトルからなる行列

$$V = (v_1, v_2, \cdots, v_M)$$ 右特異ベクトルからなる行列

M×M

正規直交行列

行列 A のランク

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_r & O \\ O & O \end{pmatrix}, \quad \Sigma_r = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & 0 \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \sigma_r \end{pmatrix}$$

N×M

- そこで、共分散行列 C を特異値分解する

$$C = AB^\top = U\Sigma V^\top$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_1(1) & \boxed{a_1(2)} & \cdots & a_1(T) \\ a_2(1) & a_2(2) & \cdots & a_2(T) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_N(1) & a_N(2) & \cdots & a_N(T) \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} b_1(1) & b_1(2) & \cdots & b_1(T) \\ b_2(1) & b_2(2) & \cdots & b_2(T) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_M(1) & b_M(2) & \cdots & b_M(T) \end{pmatrix}$$

- 一方、時刻 t における、物理場 A と B のアノマリデータをそれぞれ a_t, b_t とすると、以下のような線形結合で書き表される。

$$\boldsymbol{a_t} = p_1(t)\boldsymbol{u_1} + p_2(t)\boldsymbol{u_2} + \cdots + p_N(t)\boldsymbol{u_N}$$

$$\boldsymbol{b_t} = q_1(t)\boldsymbol{v_1} + q_2(t)\boldsymbol{v_2} + \cdots + q_M(t)\boldsymbol{v_M}$$

- 展開係数（スコア） pi, qi は、特異ベクトルの直交性より、両辺の内積をとってやれば求まる。

$$\boldsymbol{u_i} \cdot \boldsymbol{a_t} = p_i(t)$$

$$\boldsymbol{v_i} \cdot \boldsymbol{b_t} = q_i(t)$$

- 行列 P, Q を

$$
\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} p_1(1) & p_1(2) & \cdots & p_1(T) \\ p_2(1) & p_2(2) & \cdots & p_2(T) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_N(1) & p_N(2) & \cdots & p_N(T) \end{pmatrix}, \boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} q_1(1) & q_1(2) & \cdots & q_1(T) \\ q_2(1) & q_2(2) & \cdots & q_2(T) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_M(1) & q_M(2) & \cdots & q_M(T) \end{pmatrix}
$$

モード　時刻

としてやれば、以下のようにまとめて記述できる。

$$
\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{P}, \quad \boldsymbol{B} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{Q}
$$

- また、展開係数も行列として、

$$
\boldsymbol{P} = \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{V}^\top \boldsymbol{B}
$$

と求まる。

特異値 σ

- EOF で求まる固有値 λ は、各モードのスコアの分散を表していた。では、SVD で求まる特異値 σ は何を表すのだろうか？

- PQ$^{\mathrm{T}}$を計算

$$
\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}^{\top} = \begin{pmatrix} p_1(1) & p_1(2) & \cdots & p_1(T) \\ p_2(1) & p_2(2) & \cdots & p_2(T) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_N(1) & p_N(2) & \cdots & p_N(T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1(1) & q_2(1) & \cdots & q_M(1) \\ q_1(2) & q_2(2) & \cdots & q_M(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_1(T) & q_2(T) & \cdots & q_M(T) \end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix} \sum_{t=1}^{T} p_1(t)q_1(t) & \sum_{t=1}^{T} p_1(t)q_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} p_1(t)q_M(t) \\ \sum_{t=1}^{T} p_2(t)q_1(t) & \sum_{t=1}^{T} p_2(t)q_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} p_2(t)q_M(t) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{t=1}^{T} p_N(t)q_1(t) & \sum_{t=1}^{T} p_N(t)q_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} p_N(t)q_M(t) \end{pmatrix}
$$

N×M の長方行列

- 一方、

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}^\top &= (\boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{A})(\boldsymbol{B}^\top \boldsymbol{V}) \\
&= \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{C} \boldsymbol{V} \\
&= \boldsymbol{U}^\top (\boldsymbol{U} \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{V}^\top) \boldsymbol{V} \\
&= \boldsymbol{\Sigma} \\
&= \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_r & O \\ O & O \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

- よって、

$$
\begin{pmatrix}
\sum_{t=1}^{T} p_1(t) q_1(t) & \sum_{t=1}^{T} p_1(t) q_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} p_1(t) q_M(t) \\
\sum_{t=1}^{T} p_2(t) q_1(t) & \sum_{t=1}^{T} p_2(t) q_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} p_2(t) q_M(t) \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\sum_{t=1}^{T} p_N(t) q_1(t) & \sum_{t=1}^{T} p_N(t) q_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} p_N(t) q_M(t)
\end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_r & O \\ O & O \end{pmatrix}
$$

- σは、同じモードについての物理量 A と B のスコアの共分散
- 異なるモードについての物理量 A と B のスコアは直交

SCF (Squared Covariance Fraction):二乗共分散寄与率

- EOFでは、あるモードが全体の変動のどれくらいを説明しているかを表すのに「寄与率」を用いた
- これに対し、SVDでは「SCF」というものを考える
- CC^Tを計算

$$
\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\top} = \begin{pmatrix} \sum_{t=1}^{T} a_1(t)b_1(t) & \sum_{t=1}^{T} a_1(t)b_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} a_1(t)b_M(t) \\ \sum_{t=1}^{T} a_2(t)b_1(t) & \sum_{t=1}^{T} a_2(t)b_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} a_2(t)b_M(t) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{t=1}^{T} a_N(t)b_1(t) & \sum_{t=1}^{T} a_N(t)b_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} a_N(t)b_M(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sum_{t=1}^{T} a_1(t)b_1(t) & \sum_{t=1}^{T} a_2(t)b_1(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} a_N(t)b_1(t) \\ \sum_{t=1}^{T} a_1(t)b_2(t) & \sum_{t=1}^{T} a_2(t)b_2(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} a_N(t)b_2(t) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{t=1}^{T} a_1(t)b_M(t) & \sum_{t=1}^{T} a_2(t)b_M(t) & \cdots & \sum_{t=1}^{T} a_N(t)b_M(t) \end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1M} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{N1} & C_{N2} & \cdots & C_{NM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{11} & C_{21} & \cdots & C_{N1} \\ C_{12} & C_{22} & \cdots & C_{N2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{1M} & C_{2M} & \cdots & C_{NM} \end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix} \sum_{m=1}^{M} (C_{1m})^2 & & & * \\ & \sum_{m=1}^{M} (C_{2m})^2 & & \\ & & \ddots & \\ * & & & \sum_{m=1}^{M} (C_{Nm})^2 \end{pmatrix}
$$

対角成分の和は、2つの場の共分散の二乗和

- 一方、

$$Tr(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^\top) = Tr(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^\top\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^\top)$$

ここで、$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{P}$、$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{Q}$ より、

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^\top\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^\top &= (\boldsymbol{U}\boldsymbol{P})(\boldsymbol{Q}^\top\boldsymbol{V}^\top)(\boldsymbol{V}\boldsymbol{Q})(\boldsymbol{P}^\top\boldsymbol{U}^\top)\\ &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}^\top\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}^\top\boldsymbol{U}^\top \qquad (\because \boldsymbol{V}^\top\boldsymbol{V} = \boldsymbol{E})\\ &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}^\top\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}^\top\boldsymbol{U}^{-1} \qquad (\because \boldsymbol{U}^\top = \boldsymbol{U}^{-1})\end{aligned}$$

したがって、

$$\boldsymbol{U}^{-1}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^\top\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^\top)\boldsymbol{U} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}^\top\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}^\top$$

と、行列 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^\top\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^\top$ を相似変換できる。

相似変換では、トレースの値が保存されるので、

$$Tr(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^\top\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^\top) = Tr(\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}^\top\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}^\top)$$

また、

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}^\top &= (\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A})(\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{B})^\top\\ &= \boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^\top\boldsymbol{V}\\ &= \boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^\top\boldsymbol{V} \qquad (\because \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^\top = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^\top)\\ &= \boldsymbol{\Sigma} \qquad (\because \boldsymbol{V}^\top = \boldsymbol{V}^{-1})\end{aligned}$$

よって、

$$Tr(\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}^\top\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}^\top) = Tr(\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^\top) \qquad (\because \boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}^\top = (\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}^\top)^\top)$$

以上より、

$$\begin{aligned}\underline{Tr(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^\top)} &= Tr(\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^\top)\\ &= \underline{\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^2}\end{aligned}$$

- 共分散の二乗和＝特異値の二乗和

- 第 i モードの SCF = $\dfrac{\sigma_i^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_N^2}$

第 i モードのスコアの共分散の大きさ

第1モード（SVD-1）について

- EOFでは、スコア時系列の分散が最も大きい成分が第1モード（EOF-1）であった
- これに対し、SVDでは、2つのスコア時系列 p (t) と q (t) の共分散の大きさが最も大きい成分が、第1モード（SVD-1）である
  - σ^2が最も大きい成分
  - 物理場 A と B の変動の関連を最もよく説明

具体例

物理場A : 500 hPa 高度 (DJF)

物理場B : SST (MAM)

地点 : 北太平洋

期間 : 1946年～1993年

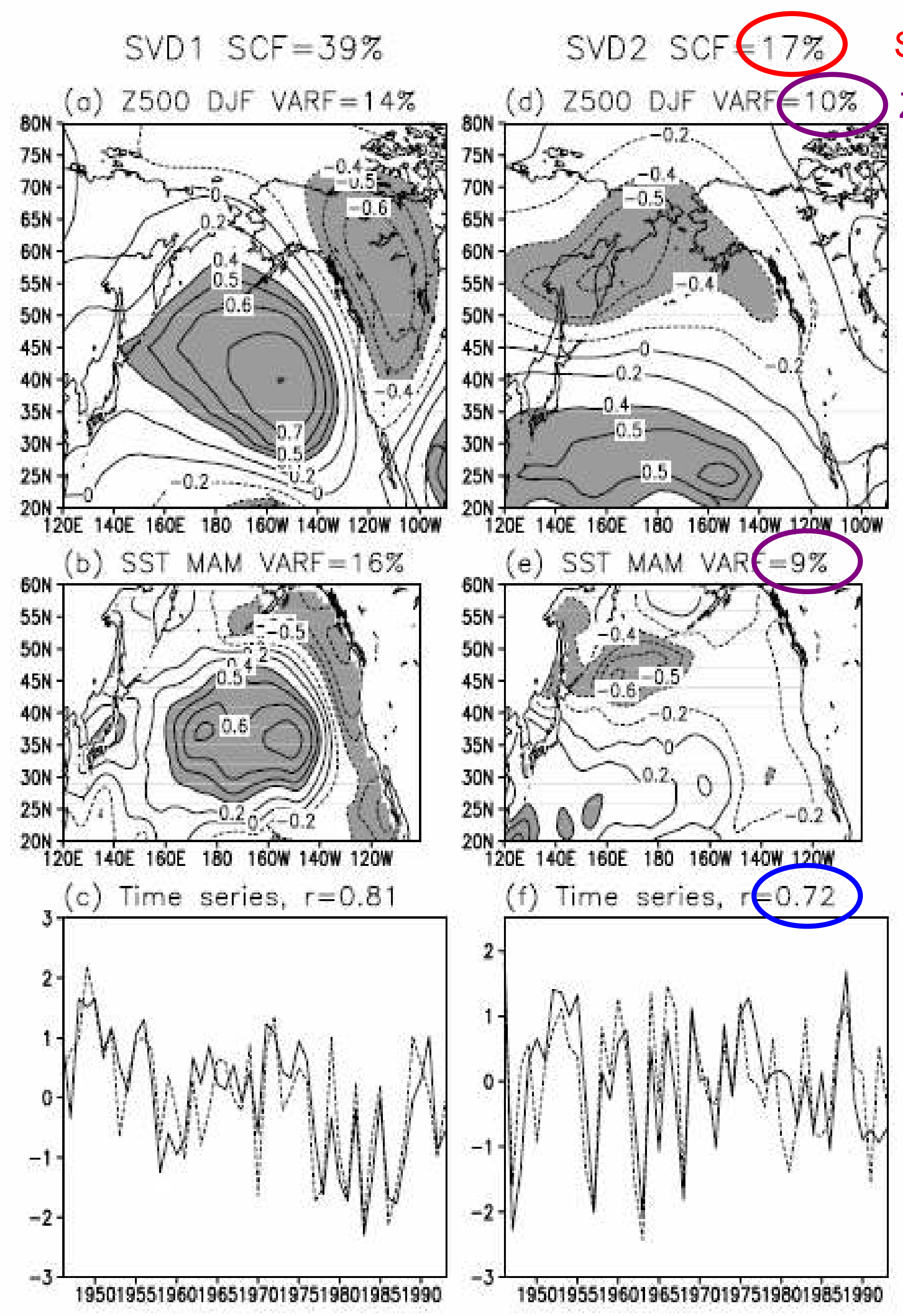
にSVD解析を適用

(http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/~minobe/data_anal/chap6.pdf より)

500 hPa 高度

SST

スコア時系列



SCF（二乗共分散寄与率）

Z500 の全分散における割合

異質相関マップ

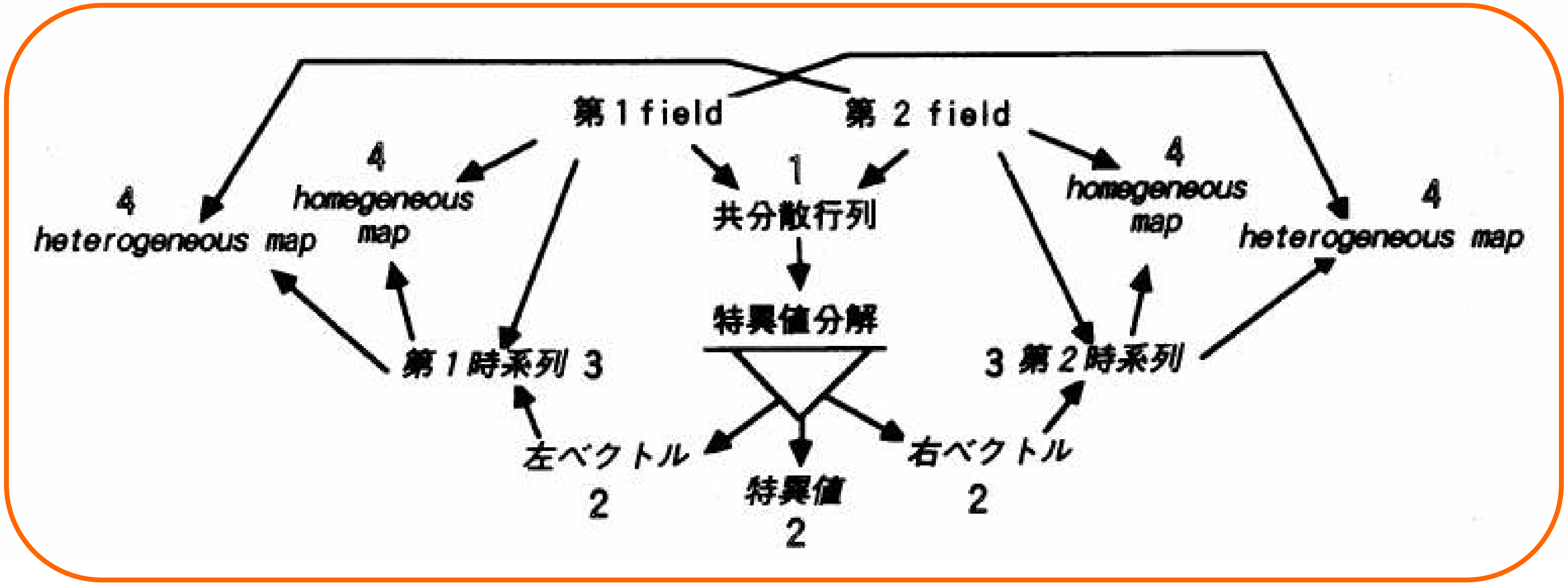
SST の全分散における割合

2つのスコアの相関係数

まとめ

- SVD解析によって、ある2つの場において最も相関関係が高い時空間構造を、それぞれの場において見いだすことができる
- 特異値σは、各モードにおける2つの物理場のスコアの共分散を表している
- SVD-1 は、2つのスコア時系列 p (t) と q (t) の共分散の大きさが最も大きい成分のこと
- あるモードが全体の変動のどれだけの割合を説明しているかを表すものとして、SCFが用いられる

まとめ～SVD解析の手順～



（『天気』より）

※番号は、求める手順を表す

参考文献

- http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/~minobe/data_anal/chap6.pdf
- 谷本陽一, 1996：SVD解析, 天気, **43**, 243-245
- 松山洋・谷本陽一, 2005：実践! 気候データ解析, 古今書院