数値計算備忘録

motchy

2022 年 8 月 23 日 ～ 2022 年 8 月 25 日
ver 0.1.0-wip

目次

第 I 部

線形代数

第 1 章

Cholesky 分解

1.1 rank-one update

主張

$n \in \mathbb{N},\ A \in \mathbb{C}^{n \times n},\ A \succeq O,\ \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ とし、A は Hermite 行列であるとする。$A + \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^*$ に対して Cholesky 分解のアルゴリズムを適用すると $O(n^3)$ の計算量を要する。しかし、A の Cholesky 分解 LL^* が既に得られているとき、$A + \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^*$ の Cholesky 分解を $O(n^2)$ で得ることができる。$\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^*$ の階数が 1 以下である (特に 0 となるのは $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ の時かつその時に限る) ことから、この方法は “rank-one update” と呼ばれている。

導出. 方針としては、$n \times n$ 行列の rank-one update を $(n-1) \times (n-1)$ 行列の問題に帰着させ、以降同様に逐次的に行列の次数を縮小しながら解を構築する。このアルゴリズムの総計算量が $O(n^2)$ となるのは明らかであろう。

$A + \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^*$ の Cholesky 分解を FF^* とする。L の第 i 列ベクトルを $\boldsymbol{l}_i = [l_{1,i}, l_{2,i}, \dots, l_{n,i}]^\top$ とし、同様に F の第 i 列ベクトルを $\boldsymbol{f}_i = [f_{1,i}, f_{2,i}, \dots, f_{n,i}]^\top$ とすると次式が成り立つ。

$$\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{f}_i \boldsymbol{f}_i^* = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^* + \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{l}_i \boldsymbol{l}_i^*$$

$$\boldsymbol{f}_1 \boldsymbol{f}_1^* + \sum_{i=2}^{n} \boldsymbol{f}_i \boldsymbol{f}_i^* = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{l}_1 \boldsymbol{l}_1^* + \sum_{i=2}^{n} \boldsymbol{l}_i \boldsymbol{l}_i^* \tag{1}$$

$\boldsymbol{f}_i \boldsymbol{f}_i^*,\ \boldsymbol{l}_i \boldsymbol{l}_i^*\ (i = 2, 3, \dots, n)$ の第 1 行および第 1 列は 0 であるから、$\boldsymbol{f}_1 \boldsymbol{f}_1^*$ と $\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{l}_1 \boldsymbol{l}_1^*$ の第 1 行および第 1 列が一致する。これより次式が成り立つ。

$$f_{1,1} = \sqrt{l_{1,1}^2 + |x_1|^2} =: r,\ f_{k,1} = \frac{1}{r}\left(l_{k,1} l_{1,1} + x_k \overline{x_1}\right) \tag{2}$$

ただし L の対角成分が非負の実数であることを前提としている。以上より、$\tilde{\boldsymbol{l}_1} \coloneqq [0, l_{2,1}, l_{3,1}, \dots, l_{n,1}]^\top,\ \tilde{\boldsymbol{x}} \coloneqq [0, x_2, x_3, \dots, x_n]^\top$ とすると次式が成り立つ。

$$\boldsymbol{f}_1 = r\boldsymbol{e}_1 + \frac{l_{1,1}}{r}\tilde{\boldsymbol{l}_1} + \frac{\overline{x_1}}{r}\tilde{\boldsymbol{x}}$$

ここに $\boldsymbol{e}_1$ は第 1 要素が 1 で他は 0 であるベクトルである。$\boldsymbol{f}_1 \boldsymbol{f}_1^*$ の右下 $(n-1) \times (n-1)$ 行列を評価すると

次式を得る。

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{r^2}\left(l_{1,1}^2\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + l_{1,1}x_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{x}}^* + |x_1|^2\,\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^* + l_{1,1}\overline{x_1}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*\right) \\
&= \left(1 - \frac{|x_1|^2}{r^2}\right)\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + \frac{l_{1,1}x_1}{r^2}\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{x}}^* + \left(1 - \frac{l_{1,1}^2}{r^2}\right)\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^* + \frac{\overline{x_1}l_{1,1}}{r^2}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* \\
&= \tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + \tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^* - \frac{1}{r^2}\left(|x_1|^2\,\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + l_{1,1}^2\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^* - x_1 l_{1,1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{x}}^* - \overline{x_1}l_{1,1}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*\right) \\
&= \tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + \tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^* - \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^* \quad \text{where} \quad \boldsymbol{y} = \frac{1}{r}\left(l_{1,1}\tilde{\boldsymbol{x}} - x_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}\right)
\end{aligned}
$$

上式の $\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + \tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^*$ は $\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{l}_1\boldsymbol{l}_1^*$ の右下 $(n-1)\times(n-1)$ 行列である。以上より次式が成り立つ。

$$
\boldsymbol{f}_1\boldsymbol{f}_1^* = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{l}_1\boldsymbol{l}_1^* - \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^*
$$

これを式 (1) に適用して次式を得る。

$$
\sum_{i=2}^{n}\boldsymbol{f}_i\boldsymbol{f}_i^* = \boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^* + \sum_{i=2}^{n}\boldsymbol{l}_i\boldsymbol{l}_i^*
$$

これは $(n-1)\times(n-1)$ 行列の rank-one update である。このようにして行列の次数を逐次的に縮小し、最後はスカラーの計算に帰着する。次数 k の問題に対し式 (2) の計算量は $O(k)$ であるから、このアルゴリズムの総計算量は $n(n+1)/2$ に比例する。 □