# 数値計算備忘録

motchy

2022 年 8 月 23 日 ～ 2022 年 8 月 26 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 $\boldsymbol{l}_i = [0,\dots,0,l_{i,i},\dots,l_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とし、同様に $F$ の第 $i$ 列ベクトルを $\boldsymbol{f}_i = [0,\dots,0,f_{i,i},\dots,f_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 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。

$$f_{1,1} = \sqrt{l_{1,1}^2 + |x_1|^2} =: r,\ f_{k,1} = \frac{1}{r}\left(l_{1,1}l_{k,1} + \overline{x_1}x_k\right)\ (k=2,3,\dots,n) \tag{2}$$

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。

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{r^2}\left(l_{1,1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}+\overline{x_1}\tilde{\boldsymbol{x}}\right)=\frac{1}{r^2}\left(l_{1,1}^2\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*+l_{1,1}x_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{x}}^*+|x_1|^2\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^*+l_{1,1}\overline{x_1}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*\right)\\
&=\left(1-\frac{|x_1|^2}{r^2}\right)\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*+\frac{l_{1,1}x_1}{r^2}\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{x}}^*+\left(1-\frac{l_{1,1}^2}{r^2}\right)\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^*+\frac{\overline{x_1}l_{1,1}}{r^2}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*\\
&=\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*+\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^*-\frac{1}{r^2}\left(|x_1|^2\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*+l_{1,1}^2\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^*-x_1l_{1,1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{x}}^*-\overline{x_1}l_{1,1}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*\right)\\
&=\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*+\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^*-\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^*\quad\text{where}\quad\boldsymbol{y}=\frac{1}{r}\left(l_{1,1}\tilde{\boldsymbol{x}}-x_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}\right)
\end{aligned}
$$

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。 □

このアルゴリズムの Julia 1.8.0 による実装例を `Cholesky-decomposition_rank-one_update.ipynb` に記した。本文書の Git リポジトリ内でファイル検索すれば見つかる。

# 第 2 章

# LDL 分解

## 2.1 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 LDL 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 LDL 分解 $LDL^*$ が既に得られているとき、$A + \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^*$ の LDL 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.** 方針は Cholesky 分解の rank-one update と同様である。$A + \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^*$ の LDL 分解を $FGF^*$ とする。$D, G$ の第 $i$ 対角成分をそれぞれ $d_i, g_i$ とする。但し $d_i \geq 0$ を前提とする。$L$ の第 $i$ 列ベクトルを $\boldsymbol{l}_i = [0, \ldots, 0, 1, l_{i+1,i}, \ldots, l_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とし、同様に $F$ の第 $i$ 列ベクトルを $\boldsymbol{f}_i = [0, \ldots, 0, 1, f_{i+1,i}, \ldots, f_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とすると次式が成り立つ。

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

$$\boldsymbol{f}_1 g_1 \boldsymbol{f}_1^* + \sum_{i=2}^{n} \boldsymbol{f}_i g_i \boldsymbol{f}_i^* = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{l}_1 d_1 \boldsymbol{l}_1^* + \sum_{i=2}^{n} \boldsymbol{l}_i d_i \boldsymbol{l}_i^* \tag{1}$$

$\boldsymbol{f}_i g_i \boldsymbol{f}_i^*,\ \boldsymbol{l}_i d_i \boldsymbol{l}_i^*\ (i = 2, 3, \ldots, n)$ の第 1 行および第 1 列は 0 であるから、$\boldsymbol{f}_1 g_1 \boldsymbol{f}_1^*$ と $\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{l}_1 d_1 \boldsymbol{l}_1^*$ 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。

$$g_1 = d_1 + |x_1|^2 =: g,\ f_{k,1} = \frac{1}{g}\left(d_1 l_{k,1} + \overline{x_1} x_k\right)\ (k = 2, 3, \ldots, n) \tag{2}$$

以上より、$\tilde{\boldsymbol{l}_1} := [0, l_{2,1}, l_{3,1}, \ldots, l_{n,1}]^\top,\ \tilde{\boldsymbol{x}} := [0, x_2, x_3, \ldots, x_n]^\top$ とすると次式が成り立つ。

$$\boldsymbol{f}_1 = \boldsymbol{e}_1 + \frac{d_1}{g}\tilde{\boldsymbol{l}_1} + \frac{\overline{x_1}}{g}\tilde{\boldsymbol{x}}$$

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。$\boldsymbol{f}_1 g_1 \boldsymbol{f}_1^*$ の右下 $(n-1)\times(n-1)$ 行列を評価する

と次式を得る。

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{g}\left(d_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}+\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^*\right)\left(d_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}+\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^*\right)^* = \frac{d_1}{g}\tilde{\boldsymbol{l}_1}d_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + \frac{|x_1|^2}{g}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^* + \frac{d_1}{g}\left(x_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{x}}^* + \overline{x_1}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*\right) \\
&= \frac{g-|x_1|^2}{g}\tilde{\boldsymbol{l}_1}d_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + \frac{g-d_1}{g}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^* + \frac{d_1}{g}\left(x_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{x}}^* + \overline{x_1}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*\right) \\
&= \tilde{\boldsymbol{l}_1}d_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + \tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^* - \frac{d_1}{g}\left[|x_1|^2\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + \tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + x_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}\tilde{\boldsymbol{x}}^* + \overline{x_1}\tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{l}_1}^*\right] \\
&= \tilde{\boldsymbol{l}_1}d_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + \tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^* - \boldsymbol{y}\frac{d_1}{g}\boldsymbol{y}^* \quad \text{where} \quad \boldsymbol{y} = x_1\tilde{\boldsymbol{l}_1} + \tilde{\boldsymbol{x}}
\end{aligned}$$

上式の $\tilde{\boldsymbol{l}_1}d_1\tilde{\boldsymbol{l}_1}^* + \tilde{\boldsymbol{x}}\tilde{\boldsymbol{x}}^*$ は $\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{l}_1 d_1 \boldsymbol{l}_1^*$ の右下 $(n-1)\times(n-1)$ 行列である。以上より次式が成り立つ。

$$\boldsymbol{f}_1 g_1 \boldsymbol{f}_1^* = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{l}_1 d_1 \boldsymbol{l}_1^* - \boldsymbol{y}\frac{d_1}{g}\boldsymbol{y}^*$$

これを式 (1) に適用して次式を得る。

$$\sum_{i=2}^{n} \boldsymbol{f}_i g_i \boldsymbol{f}_i^* = \boldsymbol{y}\frac{d_1}{g}\boldsymbol{y}^* + \sum_{i=2}^{n} \boldsymbol{l}_i d_i \boldsymbol{l}_i^*$$

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。 □