

# 数値計算備忘録

motchy

2022 年 8 月 23 日 ~ 2024 年 9 月 22 日  
ver 0.11.1

# 目次

第 I 部	線形代数	2
第 I.1 章	Gauss-Seidel 法	3
I.1.1	定義	3
I.1.2	係数行列が狭義優対角ならば厳密解に収束すること	3
第 I.2 章	Cholesky 分解	5
I.2.1	rank-one update	5
第 I.3 章	LDL 分解	7
I.3.1	rank-one update	7

第 I 部

線形代数

## 第 I.1 章

# Gauss-Seidel 法

### I.1.1 定義

以下に述べる定義は Wikipedia の英語記事 [Gauss Seidel method](#) からの引用である。

$n \in \mathbb{N}$ ,  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ,  $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$  とする。 $A$  は正定値対称、または狭義優対角であるとする。Gauss-Seidel 法とは、線型方程式  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$  の解を求める反復法である。 $\mathbf{x}_1 \in \mathbb{C}^n$  を任意の初期解とし、次の漸化式で解候補を更新してゆく。

$$L_* \mathbf{x}_{k+1} = -U \mathbf{x}_k \quad (k = 1, 2, \dots)$$

ここに  $L_*$  は  $A$  の対角成分およびその下側の要素からなる下三角行列であり、 $U$  は  $A$  の対角成分の上側の要素からなる上三角行列である。

### I.1.2 係数行列が狭義優対角ならば厳密解に収束すること

*Proof.*  $A$  の次数を  $n$  とする。 $\hat{\mathbf{x}}$  を厳密解とすると  $L_* \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{b} - U \hat{\mathbf{x}}$  である。これを解の更新式から減じると次式を得る。

$$L_*(\mathbf{x}_{k+1} - \hat{\mathbf{x}}) = -U(\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}) \quad (1)$$

$\mathbf{v}_k := \mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}$  とおくと、式 (1) より次式が成り立つ。

$$L_* \mathbf{v}_{k+1} = -U \mathbf{v}_k \quad (2)$$

$M_k := \max_{i=1, \dots, n} |v_{k,i}|$  ( $v_{k,i}$  は  $\mathbf{v}_k$  の第  $i$  要素) とする。次の 2 つが同時に成り立つことが、 $\mathbf{v}_k$  が  $\mathbf{0}_n$  に収束するための十分条件である。

1. ある  $k \in \mathbb{N}$  に対して  $M_k = 0$  ならば  $M_l = 0$  ( $l = k+1, k+2, \dots$ )
2. 適当な  $0 < \alpha < 1$  が存在して  $M_k > 0 \Rightarrow M_{k+1} < \alpha M_k$

$L_*$  が正則であることと式 (2) より直ちに 1. が成り立つ。次に 2. を数学的帰納法で示す。 $\tilde{\alpha}$  を次式で定義する。

$$\tilde{\alpha} := \min_{i=1, 2, \dots, n} \frac{1}{|a_{i,i}|} \sum_{j=1, \dots, n \wedge j \neq i} |a_{i,j}|$$

$A$  は優対角だから  $0 < \tilde{\alpha} < 1$  である。

$$\begin{aligned} a_{1,1}v_{k+1,1} &= - \sum_{j=2}^n a_{1,j}v_{k,j} \\ |a_{1,1}||v_{k+1,1}| &= \left| \sum_{j=2}^n a_{1,j}v_{k,j} \right| \leq \sum_{j=2}^n |a_{1,j}||v_{k,j}| \leq M_k \sum_{j=2}^n |a_{1,j}| \\ |v_{k+1,1}| &\leq \frac{M_k}{|a_{1,1}|} \sum_{j=2}^n |a_{1,j}| \leq \tilde{\alpha} M_k \end{aligned}$$

$|v_{k+1,j}| \leq \tilde{\alpha} M_k$  ( $j = 1, 2, \dots, l$ ) ( $l \in \{1, 2, \dots, n-1\}$ ) ならば  $|v_{k+1,l+1}| \leq \tilde{\alpha} M_k$  であることを示す。式 (2) の  $l+1$  行目を展開すると次式を得る。

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{l+1} a_{l+1,j}v_{k+1,j} &= - \sum_{j=l+2}^n a_{l+1,j}v_{k,j} \\ a_{l+1,l+1}v_{k+1,l+1} &= - \sum_{j=1}^l a_{l+1,j}v_{k+1,j} - \sum_{j=l+2}^n a_{l+1,j}v_{k,j} \\ |a_{l+1,l+1}||v_{k+1,l+1}| &= \left| - \sum_{j=1}^l a_{l+1,j}v_{k+1,j} - \sum_{j=l+2}^n a_{l+1,j}v_{k,j} \right| \leq \sum_{j=1}^l |a_{l+1,j}||v_{k+1,j}| + \sum_{j=l+2}^n |a_{l+1,j}||v_{k,j}| \\ &\leq M_k \sum_{j=1, \dots, n \wedge j \neq l+1} |a_{l+1,j}| \\ |v_{k+1,l+1}| &\leq \frac{M_k}{|a_{l+1,l+1}|} \sum_{j=1, \dots, n \wedge j \neq l+1} |a_{l+1,j}| \leq \tilde{\alpha} M_k \end{aligned}$$

以上より帰納的に  $|v_{k+1,j}| \leq \tilde{\alpha} M_k$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) が成り立つ。すなわち  $M_{k+1} \leq \tilde{\alpha} M_k$  が成り立つ。  
 $\tilde{\alpha} < \alpha < 1$  となるように  $\alpha$  を定めることで 2. が示される。  $\square$

## 第 1.2 章

# Cholesky 分解

### 1.2.1 rank-one update

主張

$n \in \mathbb{N}$ ,  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ,  $A \succeq O$ ,  $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$  とし、 $A$  は Hermite 行列であるとする。 $A + \mathbf{x}\mathbf{x}^*$  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、 $A + \mathbf{x}\mathbf{x}^*$  の Cholesky 分解を  $O(n^2)$  で得ることができる。 $\mathbf{x}\mathbf{x}^*$  の階数が 1 以下である (特に 0 となるのは  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$  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。

$A + \mathbf{x}\mathbf{x}^*$  の Cholesky 分解を  $FF^*$  とする。 $L$  の第  $i$  列ベクトルを  $\mathbf{l}_i = [0, \dots, 0, l_{i,i}, \dots, l_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n \times n}$  とし、同様に  $F$  の第  $i$  列ベクトルを  $\mathbf{f}_i = [0, \dots, 0, f_{i,i}, \dots, f_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n \times n}$  とすると次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i^* &= \mathbf{x}\mathbf{x}^* + \sum_{i=1}^n \mathbf{l}_i \mathbf{l}_i^* \\ \mathbf{f}_1 \mathbf{f}_1^* + \sum_{i=2}^n \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i^* &= \mathbf{x}\mathbf{x}^* + \mathbf{l}_1 \mathbf{l}_1^* + \sum_{i=2}^n \mathbf{l}_i \mathbf{l}_i^* \end{aligned} \quad (1)$$

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

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

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

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

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

次式を得る。

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

上式の  $\tilde{l}_1 \tilde{l}_1^* + \tilde{x} \tilde{x}^*$  は  $\mathbf{x} \mathbf{x}^* + l_1 l_1^*$  の右下  $(n-1) \times (n-1)$  行列である。以上より次式が成り立つ。

$$\mathbf{f}_1 \mathbf{f}_1^* = \mathbf{x} \mathbf{x}^* + l_1 l_1^* - \mathbf{y} \mathbf{y}^*$$

これを式 (1) に適用して次式を得る。

$$\sum_{i=2}^n \mathbf{f}_i \mathbf{f}_i^* = \mathbf{y} \mathbf{y}^* + \sum_{i=2}^n l_i l_i^*$$

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。  $\square$

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 1.3 章

# LDL 分解

### 1.3.1 rank-one update

主張

$n \in \mathbb{N}$ ,  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ,  $A \succeq O$ ,  $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$  とし、 $A$  は Hermite 行列であるとする。 $A + \mathbf{x}\mathbf{x}^*$  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、 $A + \mathbf{x}\mathbf{x}^*$  の LDL 分解を  $O(n^2)$  で得ることができる。 $\mathbf{x}\mathbf{x}^*$  の階数が 1 以下である (特に 0 となるのは  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$  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。 $A + \mathbf{x}\mathbf{x}^*$  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  $\mathbf{l}_i = [0, \dots, 0, 1, l_{i+1,i}, \dots, l_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n \times n}$  とし、同様に  $F$  の第  $i$  列ベクトルを  $\mathbf{f}_i = [0, \dots, 0, 1, f_{i+1,i}, \dots, f_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n \times n}$  とすると次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \mathbf{f}_i g_i \mathbf{f}_i^* &= \mathbf{x}\mathbf{x}^* + \sum_{i=1}^n \mathbf{l}_i d_i \mathbf{l}_i^* \\ \mathbf{f}_1 g_1 \mathbf{f}_1^* + \sum_{i=2}^n \mathbf{f}_i g_i \mathbf{f}_i^* &= \mathbf{x}\mathbf{x}^* + \mathbf{l}_1 d_1 \mathbf{l}_1^* + \sum_{i=2}^n \mathbf{l}_i d_i \mathbf{l}_i^* \end{aligned} \quad (1)$$

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

$$g_1 = d_1 + |\mathbf{x}_1|^2 =: g, \quad f_{k,1} = \frac{1}{g} (d_1 l_{k,1} + \overline{\mathbf{x}_1} x_k) \quad (k = 2, 3, \dots, n) \quad (2)$$

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

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

ここに  $\mathbf{e}_1$  は第 1 要素が 1 で他は 0 であるベクトルである。 $\mathbf{f}_1 g_1 \mathbf{f}_1^*$  の右下  $(n-1) \times (n-1)$  行列を評価する



と次式を得る。

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

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

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

これを式 (1) に適用して次式を得る。

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

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。  $\square$

このアルゴリズムの Julia 1.8.0 による実装例を `LDL-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。