数値計算備忘録

motchy

2022 年 8 月 23 日 ～ 2024 年 9 月 22 日
ver 0.11.2

目次

第１部

線形代数

第 1.1 章

Gauss-Seidel 法

1.1.1　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。

$n \in \mathbb{N},\ A \in \mathbb{C}^{n\times n},\ \boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^n$ 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 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を求める反復法である。$\boldsymbol{x}_1 \in \mathbb{C}^n$ 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。

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

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。

1.1.2　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。$\mathring{\boldsymbol{x}}$ を厳密解とすると $L_*\mathring{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b} - U\mathring{\boldsymbol{x}}$ である。これを解の更新式から減じると次式を得る。

$$L_*(\boldsymbol{x}_{k+1} - \mathring{\boldsymbol{x}}) = -U(\boldsymbol{x}_k - \mathring{\boldsymbol{x}}) \tag{1}$$

$\boldsymbol{v}_k \coloneqq \boldsymbol{x}_k - \mathring{\boldsymbol{x}}$ とおくと、式 (1) より次式が成り立つ。

$$L_*\boldsymbol{v}_{k+1} = -U\boldsymbol{v}_k \tag{2}$$

$M_k \coloneqq \max_{i=1,\dots,n} |v_{k,i}|$ ($v_{k,i}$ は $\boldsymbol{v}_k$ の第 i 要素) とする。次の 2 つが同時に成り立つことが、$\boldsymbol{v}_k$ が $\boldsymbol{0}_n$ 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。

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

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

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

$|v_{k+1,j}| \leq \tilde{\alpha} M_k$ $(j = 1, 2, \ldots, l)$ $(l \in \{1, 2, \ldots, n-1\})$ 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。

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

以上より帰納的に $|v_{k+1,j}| \leq \tilde{\alpha} M_k$ $(j = 1, 2, \ldots, n)$ 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 α を定めることで 2. が示される。 □

第 1.2 章

Cholesky 分解

1.2.1 rank-one update

主張

$n \in \mathbb{N},\ A \in \mathbb{C}^{n\times n},\ A \succeq O,\ \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ 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 $\boldsymbol{l}_i = [0, \ldots, 0, l_{i,i}, \ldots, l_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とし、同様に F の第 i 列ベクトルを $\boldsymbol{f}_i = [0, \ldots, 0, f_{i,i}, \ldots, f_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とすると次式が成り立つ。

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

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

$\boldsymbol{f}_i\boldsymbol{f}_i^*,\ \boldsymbol{l}_i\boldsymbol{l}_i^*\ (i = 2, 3, \ldots, n)$ 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。

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

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

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

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 1.3 章

LDL 分解

1.3.1 rank-one update

主張

$n \in \mathbb{N},\ A \in \mathbb{C}^{n\times n},\ A \succeq O,\ \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ 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 $\boldsymbol{l}_i = [0, \dots, 0, 1, l_{i+1,i}, \dots, l_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とし、同様に F の第 i 列ベクトルを $\boldsymbol{f}_i = [0, \dots, 0, 1, f_{i+1,i}, \dots, f_{n,i}]^\top \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とすると次式が成り立つ。

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

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

$\boldsymbol{f}_i g_i \boldsymbol{f}_i^*,\ \boldsymbol{l}_i d_i \boldsymbol{l}_i^*\ (i = 2, 3, \dots, n)$ 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。

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

以上より、$\tilde{\boldsymbol{l}_1} := [0, l_{2,1}, l_{3,1}, \dots, l_{n,1}]^\top,\ \tilde{\boldsymbol{x}} := [0, x_2, x_3, \dots, x_n]^\top$ 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。

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

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。 $\square$

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。