

クレジット:

UTokyo Online Education 数値解析 2017 松尾宇泰

ライセンス:

利用者は、本講義資料を、教育的な目的に限ってページ単位で利用することができます。特に記載のない限り、本講義資料はページ単位でクリエイティブ・コモンズ 表示-非営利-改変禁止 ライセンスの下に提供されています。

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

本講義資料内には、東京大学が第三者より許諾を得て利用している画像等や、各種ライセンスによって提供されている画像等が含まれています。個々の画像等を本講義資料から切り離して利用することはできません。個々の画像等の利用については、それぞれの権利者の定めるところに従ってください。



Hessenberg QR 法が各反復 $O(N^2)$ で計算可能であることを説明する.

1 Householder 変換

$x \in \mathbb{C}^N$ とする. Householder 鏡映変換:

$$H := I_N - \frac{2}{\|v\|_2^2} vv^*, \quad v = x - y$$

(ユニタリかつ $H^* = H$) により, x を長さが等しい任意の $y \in \mathbb{C}^N$ に写せる: $y = Hx$. 特に,

$$\tilde{H}_k := \begin{pmatrix} I_k & \\ & H_{N-k} \end{pmatrix}$$

により,

$$y = \begin{pmatrix} u_k \\ \text{sign}(x_{N-k,1}) \|x_{N-k}\|_2 e_{N-k} \end{pmatrix} = \tilde{H}_k \begin{pmatrix} u_k \\ x_{N-k} \end{pmatrix} = \tilde{H}_k x, \quad e_{N-k} = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{C}^{N-k}$$

に写せる (★). 実際には H_{N-k} を表すベクトル v_{N-k} だけ覚えれば良く, また \tilde{H}_k をある行列に左から (右から) かける操作は実際には, 部分行列に対して $v_{N-k} v_{N-k}^*$ を左から (右から) かける操作として実装できる. この計算量は, 行列 1 列 (1 行) あたり $(N - k)$ の定数倍程度.

2 Householder 変換による Hessenberg 化

$A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ とおく. 操作 (★) を用いて相似変換 $\tilde{H}_1^* A \tilde{H}_1$ を考えると, $(3, 1) \sim (N, 1)$ 成分は 0. 同様に第 2 列目以降も適切に \tilde{H}_k ($k = 2, \dots, N$) を選べば $\tilde{H}_N^* \dots \tilde{H}_1^* A \tilde{H}_1 \dots \tilde{H}_N$ は Hessenberg 形.

第 k 段の計算において, 左から \tilde{H}_k^* をかけるのは H_{N-k} を $(N - k + 1)$ 個の列にかけることに等しく, 計算量は $(N - k)(N - k + 1)$ の定数倍程度. よってトータル $O(N^3)$. 右からの演算部分も同様に計算でき $O(N^3)$.

3 Householder 変換による QR 分解

講義では Gram-Schmidt の直交化で説明したが, 実は Householder 変換でも QR 分解できる. 操作 (★) を, 今度は $k = 0, 1, \dots, N - 1$ で左からのみ行くと, 任意の $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ に対して

$$\tilde{H}_{N-1} \dots \tilde{H}_0 A = R \quad \Leftrightarrow \quad A = \tilde{H}_0^* \dots \tilde{H}_{N-1}^* R.$$

ただし R は上三角行列で, $Q = \tilde{H}_0^* \dots \tilde{H}_{N-1}^*$ はユニタリ行列.

行列 A が Hessenberg 形の場合は, 第 k 段で

$$\tilde{H}_{k-1} \text{ をかける} \quad \Leftrightarrow \quad \text{第 } k \text{ 列の第 } (k + 1) \text{ 成分を } 0 \text{ にする}$$

際, 操作 (★) の H_{N-k+1} で出てくるベクトル v_{N-k+1} には k によらず第 1, 第 2 成分しかない. この影響で, 第 1 節末尾で述べたかけ算の計算量は $O(1)$ に落ちて, 第 k 段の計算量は $(N - k)$ の定数倍程度. よってトータル計算量 $\sim \sum_k (N - k) = O(N^2)$.

4 Hessenberg QR 法の各ステップ計算量は $O(N^2)$

前項より QR 分解ステップは $O(N^2)$. 続く RQ ステップは, 前項の記号を用いて,

$$RQ = R \tilde{H}_0^* \dots \tilde{H}_{N-1}^*$$

であるが, 右から \tilde{H}_k^* をかける演算量も前項同様で $(N - k)$ の定数倍程度. よって RQ ステップの計算量も $O(N^2)$.