数値解析（松尾）　補足資料 2019 年 11 月 11 日

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

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

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

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

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

により，

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{u}_k \\ \operatorname{sign}(\boldsymbol{x}_{N-k,1})\|\boldsymbol{x}_{N-k}\|_2 \boldsymbol{e}_{N-k} \end{pmatrix} = \tilde{H}_k \begin{pmatrix} \boldsymbol{u}_k \\ \boldsymbol{x}_{N-k} \end{pmatrix} = \tilde{H}_k \boldsymbol{x}, \qquad \boldsymbol{e}_{N-k} = (1, 0, \ldots, 0)^\top \in \mathbb{C}^{N-k}$$

に写せる（★）．実際には H_{N-k} を表すベクトル $\boldsymbol{v}_{N-k}$ 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 $\boldsymbol{v}_{N-k}\boldsymbol{v}_{N-k}{}^*$ 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，$(3,1)$〜$(N,1)$ 成分は 0．同様に第 2 列目以降も適切に $\tilde{H}_k$ $(k = 2, \ldots, N)$ を選べば $\tilde{H}_N^* \cdots \tilde{H}_1^* A \tilde{H}_1 \cdots \tilde{H}_N$ 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 $k = 0, 1, \ldots, N-1$ で左からのみ行うと，任意の $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ に対して

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

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

行列 A が Hessenberg 形の場合は，第 k 段で

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

際，操作（★）の H_{N-k+1} で出てくるベクトル $\boldsymbol{v}_{N-k+1}$ 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〜 $\sum_k (N-k) = O(N^2)$．

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，

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

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 $O(N^2)$．