# 数値解析
# 第七回　固有値
# ハウスホルダー法

舟木　剛

平成24年11月21日２限



# シラバス

- 授業の目的
  - 工学分野でよく用いられる数値計算の算法ならびにそれらの数値的な特性について理解させる.
- 授業計画
  - 数値計算と誤差（1回）
    - 数値計算の必要性ならびに誤差の種類について説明するとともに，行列式とその性質，行及び列の交換などの基本演算，逆行列の定義と求め方について説明する.
  - 代数方程式（2回）
    - 2分法，Newton-Raphson 法，Bailey 法について解説する．また，多変数に対するNewton-Raphson 法と収束に関する留意点について述べる.
  - 連立方程式（3回）
    - Gauss の消去法，Gauss-Jordan の掃き出し法，LU 分解法の手順ならびに計算複雑度について解説する．また，Jacobi 法，Gauss-Seidel 法，SOR 法などの反復法について手順並びに収束条件について解説する.
  - 行列の固有値（3回）
    - 固有値の性質，べき乗法，Householder 法，QR 法について述べる．QR 法の収束定理について解説する.
  - 補間法（2回）
    - 線形補間，Lagrange 補間，Newton 補間，スプライン補間について述べる．多項式補間については算出方法をスプライン補間については3次のスプライン関数の導出方法を説明する．また，自然なスプライン関数とその特徴について解説する.
  - 関数近似（1回）
    - 最小2乗法による関数の近似について解説する.
  - 数値積分（1回）
    - 台形公式，シンプソンの公式による数値積分について解説する.
  - 常微分方程式（1回）
    - 単区分法であるEuler 法，修正Euler 法，Runge-Kutta 法ならびに複区分法であるAdams-Moulton の予測子・修正子法について解説する．また，数値不安定性についても解説する.
- 教科書 佐藤・中村共著「よくわかる数値計算」日刊工業新聞社

# ハウスホルダー法

- 実対称行列$A$の固有値と固有ベクトルを求める
  - 三重対角行列に相似変換し，固有値と固有ベクトルを求める
- 手順
  - 相似変換
  - ハウスホルダー変換
  - 三重対角行列の固有値・固有ベクトルの求解



# 共役転置行列の性質

- $(\cdot)^*$は共役転置を表す
  - $(kA)^* = \bar{k}A^*$
  - $(A+B)^* = A^* + B^*$
  - $(A^*)^* = A$
  - $(AB)^* = B^*A^*$
- 直交行列$A$の性質
  - $A^{\mathrm{T}}A = AA^{\mathrm{T}} = \mathrm{I}, A^{\mathrm{T}} = A^{-1}$
  - 行列式の値$\det(I) = \det\left(A^{\mathrm{T}}A\right) = \det\left(A^{\mathrm{T}}\right)\det(A) = \det(A)^2 = 1$

# 実対称行列の固有値

- 実対称行列$A = A^*$
  - 固有値$\lambda$, 固有ベクトル$X$
  - $AX = \lambda X$の左から固有ベクトル$X$の共役転置$X^*$をかける
    - $X^*AX = \lambda X^*X$
  - 共役転置の性質$AX = X^*A^* = \lambda X = \bar{\lambda}X^*$
    - 右から固有ベクトル$X$の共役転置$X^*$をかける
      - $X^*A^*X = \bar{\lambda}X^*X \rightarrow A = A^*$より$X^*AX = \bar{\lambda}X^*X$
      - $X^*AX = \lambda X^*X = \bar{\lambda}X^*X$
        - » $X^*X \neq 0$より$\lambda = \bar{\lambda}$となるので$\mathrm{Im}(\lambda) = 0$
        - » 実対称行列の固有値$\lambda$は実数



# 行列の相似変換

- 正則行列$P$による行列$A$の相似変換
  - $B = P^{-1}AP$
- 相似変換した行列$B$の固有値は不変
  - $\det(B - \lambda I) = \det(P^{-1}AP - \lambda P^{-1}P)$
    $= \det(P^{-1}AP - \lambda P^{-1}IP)$
    $= \det(P^{-1}\{A - \lambda I\}P)$
    $= \det(P^{-1})\det(A - \lambda I)\det(P)$
    $= \dfrac{1}{\det(P)}\det(A - \lambda I)\det(P) = \det(A - \lambda I)$

# 行列の相似変換

- $P$で相似変換した行列$A$の固有値$\lambda$の固有ベクトル$X$
  - 元の行列$A$の固有ベクトル$X$ $\quad AX = \lambda X$
  - 変換した行列$B$の固有ベクトル$X'$ $\quad BX' = \lambda X'$
    - $BX' = P^{-1}APX' = \lambda X'$
    - 左から変換行列$P$をかける
      - $PP^{-1}APX' = APX' = \lambda PX'$
      - $A(PX') = \lambda(PX')$
      - 変換した行列と元の行列の固有ベクトルの関係
        - » $X = PX'$



# 三重対角行列

- $n \times n$（実対称）三重対角行列とは
  - $$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & 0 \\ b_1 & a_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n \end{bmatrix}$$
    - $a_{ii} = a_i$（対角成分）
    - $a_{i,i+1} = a_{i+1,i} = b_i \quad (i = 1,2,\cdots,n-1)$
    - $a_{i,j} = 0 \qquad (i = 1,\cdots,n\,, j = 1,\cdots,i-2, i+2,\cdots,n)$
  - 実対称行列のハウスホルダー変換により求める

# ハウスホルダー(相似)変換による実対称行列の三重対角化

- 逐次的処理で三重対角化を行う
  - $A_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$
  - $A_2 = {B_2}^{-1} A_1 B_2 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & & \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & & \\ 0 & a_{42} & a_{43} & a_{43} & 0 & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \\ 0 & a_{n2} & \cdots & & & a_{nn} \end{bmatrix}$
  - $A_{n-2} = {B_{n-2}}^{-1} A_{n-3} B_{n-2} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & & \cdots & & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & & & & \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & & & & \\ \vdots & 0 & a_{44} & a_{44} & \ddots & & & \vdots \\ & & & a_{54} & \ddots & \ddots & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & a_{n-2,n-1} & 0 \\ & & & & & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & & \cdots & & & 0 & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix}$



# ハウスホルダー(相似)変換による実対称行列の三重対角化

- 直交行列となるような相似変換行列$B_i$とする
  - ${B_i}^{-1} = {B_i}^T$
- $n$次列ベクトル$U$を考える$U = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}$
  - ただし，$U^T U = {u_1}^2 + {u_2}^2 + \cdots + {u_n}^2 = 1$とする
  - $UU^T$は対称行列となる$UU^T = \begin{bmatrix} {u_1}^2 & u_1 u_2 & \cdots & u_1 u_n \\ u_2 u_1 & {u_2}^2 & & u_2 u_n \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ u_n u_1 & u_n u_2 & \cdots & {u_n}^2 \end{bmatrix}$

# ハウスホルダー（相似）変換による実対称行列の三重対角化

- 相似変換行列$B$を$n$次列ベクトル$U$を用いて表すことを考える
  - $B = I - 2UU^T$
    - $UU^T$は対称なので$B = B^T$となる
    - $B$は直交行列なので$B^{-1} = B^T$となる
    - 結局$B = B^{-1} = B^T$となる
  - 相似変換は次式となる
    - $A' = B^{-1}AB = BAB$



# ハウスホルダー（相似）変換行列

- 次式を満たす相似変換行列$B$を求める
  - $AB = \begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21}' & a_{22}' & a_{23}' & \cdots & a'_{2n} \\ a_{31}' & a_{32}' & a_{33}' & \cdots & a'_{3n} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ a_{n1}' & a_{n2}' & a_{n3}' & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix}$
    - $B^{-1}AB$はあとで
    - $B = I - 2UU^T, U = \begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}$となる$U$を求める
      - ただし，$U^TU = {u_2}^2 + \cdots + {u_n}^2 = 1$とする

# ハウスホルダー（相似）変換行列

- $AB = A(I - 2UU^T) = A - 2AUU^T$
  - $P = AU = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix}$とする
  - $AB = A - 2PU^T = A - 2\begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix}[0, u_2, \cdots, u_n]$

この行はP1のみ使用

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} - 2p_1u_2 & a_{13} - 2p_1u_3 & \cdots & a_{1n} - 2p_1u_n \\ a_{21} & a_{22} - 2p_2u_2 & a_{23} - 2p_2u_3 & \cdots & a_{2n} - 2p_2u_n \\ a_{31} & a_{32} - 2p_3u_2 & a_{33} - 2p_3u_3 & \cdots & a_{3n} - 2p_3u_n \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} - 2p_nu_2 & a_{33} - 2p_nu_3 & \cdots & a_{nn} - 2p_nu_n \end{bmatrix}$$

- ここで$a_{1i} - 2p_1u_i = 0 \ (i = 3,4,\cdots,n)$

$a_{1i} = 2p_1u_i$



# ハウスホルダー（相似）変換行列

$p_1$を求める

- $(AB)(AB)^T = (AB)(B^TA^T) = (AB)(B^{-1}A^T) = AA^T$ について考える
  - $(AB)(AB)^T =$

$$\begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21}' & a_{22}' & a_{23}' & \cdots & a'_{2n} \\ a_{31}' & a_{32}' & a_{33}' & \cdots & a'_{3n} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ a_{n1}' & a_{n2}' & a_{n3}' & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{21} & a'_{31} & \cdots & a'_{n1} \\ a'_{12} & a_{22}' & a_{32}' & \cdots & a'_{n2} \\ 0 & a_{23}' & a_{33}' & \cdots & a'_{n3} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{2n}' & a_{3n}' & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix}$$

  - 1行1列目要素$a'_{11}{}^2 + a'_{12}{}^2 = a_{11}{}^2 + (a_{12} - 2p_1u_2)^2$
- $AA^T$
  - 1行1列目要素$a_{11}{}^2 + a_{12}{}^2 + \cdots + a_{1n}{}^2$

# ハウスホルダー（相似）変換行列

- $(AB)(AB)^T = AA^T$
  - 1行1列目要素の比較
    - ${a_{11}}^2 + (a_{12} - 2p_1u_2)^2 = {a_{11}}^2 + {a_{12}}^2 + \cdots + {a_{1n}}^2$
    - $(a_{12} - 2p_1u_2)^2 = {a_{12}}^2 + \cdots + {a_{1n}}^2$
- $a_{1i} - 2p_1u_i = 0 \ \ (i = 3,4,\cdots,n)$より
  - $a_{1i} = 2p_1u_i$を${a_{12}}^2 + \cdots + {a_{1n}}^2$に適用
    - ${a_{12}}^2 + \cdots + {a_{1n}}^2 = {a_{12}}^2 + \sum_{i=3}^{n} {a_{1\mathrm{i}}}^2$

      $$= {a_{12}}^2 + \sum_{i=3}^{n}(2p_1u_i)^2 = {a_{12}}^2 + 4{p_1}^2\sum_{i=3}^{n}{u_i}^2$$



# ハウスホルダー（相似）変換行列

- ここで${u_2}^2 + \cdots + {u_n}^2 = \sum_{i=2}^{n}{u_i}^2 = 1$より
  - $\sum_{i=3}^{n}{u_i}^2 = 1 - {u_2}^2$を用いて
    - ${a_{12}}^2 + \cdots + {a_{1n}}^2 = {a_{12}}^2 + 4{p_1}^2(1 - {u_2}^2)$
- $(a_{12} - 2p_1u_2)^2 = {a_{12}}^2 + \cdots + {a_{1n}}^2$より
  - ${a_{12}}^2 - 4a_{12}p_1u_2 + 4{p_1}^2{u_2}^2 =$ ${a_{12}}^2 + 4{p_1}^2(1 - {u_2}^2)$
  - $-4a_{12}p_1u_2 + 4{p_1}^2{u_2}^2 = 4{p_1}^2(1 - {u_2}^2)$
  - $p_1 \neq 0$より$-a_{12}u_2 + p_1{u_2}^2 = p_1(1 - {u_2}^2)$
    - $-a_{12}u_2 = p_1\left(1 - 2{u_2}^2\right)$
    - $p_1 = \frac{a_{12}u_2}{2{u_2}^2 - 1}$

# ハウスホルダー（相似）変換行列

$u_1$を求める

- $(a_{12}-2p_1u_2)^2 = \sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2$をもちいて
  - $\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2 = (a_{12}-2p_1u_2)^2 = \left(a_{12} - 2\frac{a_{12}u_2}{2{u_2}^2-1}u_2\right)^2 = {a_{12}}^2\left(\frac{2{u_2}^2-1-2{u_2}^2}{2{u_2}^2-1}\right)^2 = \left(\frac{a_{12}}{2{u_2}^2-1}\right)^2$
  - $\left(2{u_2}^2-1\right)^2 = \frac{{a_{12}}^2}{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}$
  - $2{u_2}^2-1 = \pm\frac{a_{12}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}}$
  - ${u_2}^2 = \frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{12}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}}\right\}$
  - $u_2 = \pm\sqrt{\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{12}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}}\right\}}$　→これを$p_1 = \frac{a_{12}u_2}{2{u_2}^2-1}$に代入



# ハウスホルダー（相似）変換行列

- $p_1 = \frac{a_{12}u_2}{2{u_2}^2-1} = \frac{\pm a_{12}\sqrt{\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{12}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}}\right\}}}{2\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{12}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}}\right\}-1} = \frac{\pm a_{12}\sqrt{\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{12}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}}\right\}}}{\pm\frac{a_{12}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}}} =$

$$\pm\sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}\sqrt{\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{12}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}}\right\}}$$

$$= \pm\sqrt{\frac{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2 \pm a_{12}\sqrt{\sum_{i=2}^{n} a_{1\mathrm{i}}{}^2}\,1}{2}}$$

$u_i$を求める

- $a_{1i} - 2p_1u_i = 0 \ \ (i = 3,4,\cdots,n)$より
  - $u_i = \frac{a_{1i}}{2p_1} = \frac{a_{1i}}{2\frac{a_{12}u_2}{2{u_2}^2-1}} = \frac{a_{1i}\left(2{u_2}^2-1\right)}{2a_{12}u_2} = \frac{a_{1i}\left(2{u_2}^2-1\right)}{2a_{12}u_2}\ (i = 3,4,\cdots,n)$

# 三重対角行列化

$AB$の結果を用いて$B^{-1}AB$を求める

- $A' = B^{-1}AB = BAB$
  $= (I - 2UU^T)A(I - 2UU^T)$
  $= (A - 2UU^TA)(I - 2UU^T)$
  $= A - 2UU^TA - 2AUU^T + 4UU^TAUU^T$
  - $P = AU, A = A^T$より$U^TA = U^TA^T = (AU)^T = P^T$
  - $A' = A - 2UP^T - 2PU^T + 4UU^TAUU^T$
  - $U = \begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}$より$UU^T = \begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}[0, u_2, \cdots, u_n] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & {u_2}^2 & & u_2u_n \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & u_nu_2 & \cdots & {u_n}^2 \end{bmatrix}$
    - $UU^TAUU^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22}'' & & a_{2n}'' \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}'' & \cdots & a_{nn}'' \end{bmatrix}$



# 三重対角行列化

- $PU^T = \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix}[0, u_2, \cdots, u_n]$

$$= \begin{bmatrix} 0 & p_1u_2 & p_1u_3 & \cdots & p_1u_n \\ 0 & p_2u_2 & p_2u_3 & \cdots & p_2u_n \\ 0 & p_3u_2 & p_3u_3 & \cdots & p_3u_n \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & p_nu_2 & p_nu_3 & \cdots & p_nu_n \end{bmatrix}$$

  - ここで$a_{1i} - 2p_1u_i = 0 \ (i = 3,4, \cdots, n)$

# 三重対角行列化

- $UP^T = \begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} [p_1, p_2, \cdots, p_n]$
$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ p_1u_2 & p_2u_2 & p_3u_2 & \cdots & p_nu_2 \\ p_1u_3 & p_2u_3 & p_3u_3 & \cdots & p_nu_3 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ p_1u_n & p_2u_n & p_3u_n & \cdots & p_nu_n \end{bmatrix}$$
  - $A$は対称行列なので，$a_{i1} = a_{1i}$
    - » $a_{i1} - 2p_1u_i = a_{1i} - 2p_1u_i = 0 \ \ (i = 3,4, \cdots, n)$



# 三重対角行列化

- $A' = B^{-1}AB = A - 2UU^TA - 2AUU^T + 4UU^TAUU^T$
$$= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12}' & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22}' & a_{23}' & \cdots & a_{2n}' \\ 0 & a_{32}' & a_{33}' & \cdots & a_{3n}' \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}' & a_{n3}' & \cdots & a_{nn}' \end{bmatrix}$$
  - $a_{1i}' = a_{1i} - 2p_1u_i = 0 \ \ (i = 3, \cdots, n)$ 1行目の3列目以降が0
  - $a_{i1}' = a_{i1} - 2p_1u_i = 0 \ \ (i = 3, \cdots, n)$ 1列目の3行目以降が0
  - 繰り返しにより三重対角化できる