数値解析
第八回　固有値
QR法

舟木　剛

平成24年11月28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

三重対角行列の固有値

- $b_i \neq 0\ (i = 1, \cdots, n-1)$
  - 小行列式展開
  - $|A - \lambda I| = \begin{vmatrix} a_1 - \lambda & b_1 & & 0 \\ b_1 & a_2 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{vmatrix}$

$$= (a_1 - \lambda) \begin{vmatrix} a_2 - \lambda & b_2 & & 0 \\ b_2 & a_3 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{vmatrix} - b_1 \begin{vmatrix} b_1 & 0 & & 0 \\ b_2 & a_3 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{vmatrix}$$

- $\begin{vmatrix} b_1 & 0 & & 0 \\ b_2 & a_3 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{vmatrix} = b_1 \begin{vmatrix} a_3 - \lambda & b_3 & & 0 \\ b_3 & a_4 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{vmatrix} - b_2 \begin{vmatrix} 0 & 0 & & 0 \\ b_{23} & a_4 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{vmatrix}$

$$= b_1 \begin{vmatrix} a_3 - \lambda & b_3 & & 0 \\ b_3 & a_4 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{vmatrix}$$

三重対角行列の固有値

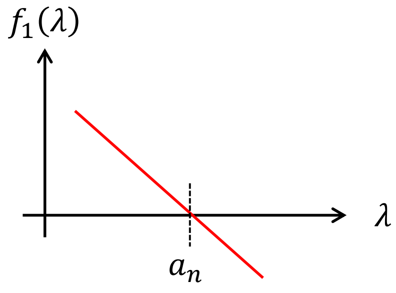
- $|A - \lambda I| = \begin{vmatrix} a_1 - \lambda & b_1 & & 0 \\ b_1 & a_2 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{vmatrix}$

$$= (a_1 - \lambda) \begin{vmatrix} a_2 - \lambda & b_2 & & 0 \\ b_2 & a_3 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{vmatrix} - {b_1}^2 \begin{vmatrix} a_3 - \lambda & b_3 & & 0 \\ b_3 & a_4 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{vmatrix}$$

  - $f_0(\lambda) = 1, f_1(\lambda) = |a_n - \lambda| = a_n - \lambda$として漸化式を定める
  - $f_2(\lambda) = (a_{n-1} - \lambda) f_1(\lambda) - {b_{n-1}}^2 f_0(\lambda)$
  - $f_3(\lambda) = (a_{n-2} - \lambda) f_2(\lambda) - {b_{n-2}}^2 f_1(\lambda)$
  - $f_4(\lambda) = (a_{n-3} - \lambda) f_3(\lambda) - {b_{n-3}}^2 f_2(\lambda)$
  - $\vdots$
  - $f_n(\lambda) = (a_1 - \lambda) f_{n-1}(\lambda) - {b_1}^2 f_{n-2}(\lambda) = |A - \lambda I|$
    - $f_n(\lambda) = |A - \lambda I| = 0$の解が行列$A$の固有値となる

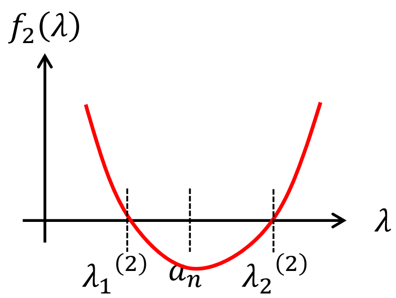
三重対角行列の固有値

- 三重対角行列Aの固有値の性質
  - $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \cdots \neq \lambda_\mathrm{n}$（相異なる実解）となる
- 漸化式の性質
  - $f_1(\lambda) = a_n - \lambda = 0$の解
    - $\lambda = a_n$
      - $\lambda < a_n$に対して$f_1(\lambda) > 0$
      - $a_n < \lambda$に対して$f_1(\lambda) < 0$



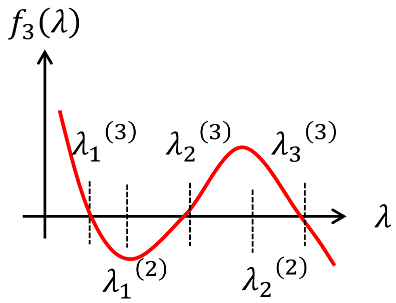
三重対角行列の固有値

- $f_2(\lambda) = (a_{n-1} - \lambda) f_1(\lambda) - {b_{n-1}}^2 f_0(\lambda)$
  - $\lambda \to -\infty$に対して$\lim_{\lambda \to -\infty} f_2(\lambda) > 0$
    - $a_{n-1} - \lambda > 0, f_1(\lambda) > 0, f_0(\lambda) = 1$
  - $\lambda = a_n$に対して$f_2(\lambda) < 0$
    - $a_{n-1} - \lambda = ?, f_1(\lambda) = 0, f_0(\lambda) = 1$
  - $\lambda \to +\infty$に対して$\lim_{\lambda \to +\infty} f_2(\lambda) > 0$
    - $a_{n-1} - \lambda < 0, f_1(\lambda) < 0, f_0(\lambda) = 1$
  - $f_2(\lambda) = 0$の解は2個（2次式）
    - 解の存在範囲
      - ${\lambda_1}^{(2)} < a_n$
      - ${\lambda_2}^{(2)} > a_n$



三重対角行列の固有値

- $f_3(\lambda) = (a_{n-2} - \lambda) f_2(\lambda) - {b_{n-2}}^2 f_1(\lambda)$
  - $\lambda \to -\infty$に対して$\lim_{\lambda\to\infty} f_3(\lambda) = (+\infty)^2 - {b_{n-2}}^2(+\infty) = \infty\left(\infty - {b_{n-2}}^2\right) \to +\infty$
    - $a_{n-2} - \lambda \to +\infty, f_2(\lambda) \to +\infty, f_1(\lambda) \to +\infty$
  - $\lambda = {\lambda_1}^{(2)} < a_{n-1}$に対して$f_3(\lambda) < 0$
    - $a_{n-2} - \lambda = ?, f_2(\lambda) = 0, f_1(\lambda) > 0$
  - $\lambda = {\lambda_2}^{(2)} > a_{n-1}$に対して$f_3(\lambda) > 0$
    - $a_{n-2} - \lambda = ?, f_2(\lambda) = 0, f_1(\lambda) < 0$
  - $\lambda \to +\infty$に対して
    $\lim_{\lambda\to\infty} f_3(\lambda) = (-\infty)(+\infty) - {b_{n-2}}^2(-\infty) = -\infty\left(\infty - {b_{n-2}}^2\right) \to -\infty$
    - $a_{n-2} - \lambda \to -\infty, f_2(\lambda) \to +\infty, f_1(\lambda) \to -\infty$
  - $f_3(\lambda) = 0$の解${\lambda_k}^{(3)} k = 1,2,3$は3個（3次式）
    - 解の存在範囲
      - ${\lambda_1}^{(3)} < {\lambda_1}^{(2)}$
      - ${\lambda_1}^{(2)} < {\lambda_2}^{(3)} < {\lambda_2}^{(2)}$
      - ${\lambda_3}^{(2)} < {\lambda_3}^{(3)}$



スツルムの定理

- 実係数のn次多項式
  $$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_0$$
  - 区間$[a, b]$にある$f(x) = 0$に対する実根の数
  - 漸化式の関数列$\{f_0(x), f_1(x), \cdots, f_n(x)\}$を考える
  - $x = \lambda$として，$\{f_0(\lambda), f_1(\lambda), \cdots, f_n(\lambda)\}$における正負の符号変化の数を$w(a)$と表す
    - 区間$[a, b]$における相異なる零点の個数
      $w(a) - w(b)$

行列のノルム

- 行列A(n×n)の∞ノルム
  - $\|A\|_\infty = \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$
- 行列A(n×n)のスペクトル半径
  - $\rho(A) = \max_{i=1,\cdots,n} (|\lambda_i|)$
    - 行列A(n×n)の固有値$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_\mathrm{n}$
- ノルムとスペクトル半径の関係
  - $\|A\| \geq \rho(A) = \max_{i=1,\cdots,n} (|\lambda_i|)$
    - $\|A\|$を$\|A\|_\infty$とすると，$-\|A\|_\infty \leq \lambda_i \leq \|A\|_\infty \ (i = 1, \cdots, n)$

三重対角行列の固有値

- 求解の手順
  1. 行列のノルムを求める
     - $\alpha = \|A\|_\infty = \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$
     - 区間$[-\alpha, \alpha]$に全ての解が存在
  2. 区間$[-\alpha, \alpha]$を適当なk個の小区間に分割
     - $[-\alpha, \beta_1], [\beta_1, \beta_2], \cdots, [\beta_{k-1}, \alpha]$
  3. 各端点での漸化式の数列$\{f_0(\beta_i), f_1(\beta_i), \cdots, f_n(\beta_i)\}$を求める
     - 数列の符号変化の数$w(\beta_i)$より，各小区間における$f_n(\lambda) = 0$の解の個数を，$w(\beta_i) - w(\beta_{i+1})$を用いて求める
  4. 小区間の解の個数が1個であれば，2分法で解を求めることができる（実数なので）

三重対角行列の固有ベクトル

- 行列Aと固有値λ，固有ベクトルXの関係
  - $AX = \lambda X$
  - $$\begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & 0 \\ b_1 & a_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$
    $$\rightarrow \begin{bmatrix} a_1 - \lambda & b_1 & & 0 \\ b_1 & a_2 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = 0$$
    - 固有ベクトルの大きさは任意なので$x_1 = 1$とおく
      - $(a_1 - \lambda)x_1 + b_1 x_2 = 0$ $\rightarrow x_2 = \frac{1}{b_1}(\lambda - a_1)x_1$
      - $b_1 x_1 + (a_2 - \lambda)x_2 + b_2 x_3 = 0$ $\rightarrow x_3 = \frac{1}{b_2}\{(\lambda - a_2)x_2 - b_1 x_1\}$
      - $b_2 x_2 + (a_3 - \lambda)x_3 + b_3 x_4 = 0$ $\rightarrow x_4 = \frac{1}{b_3}\{(\lambda - a_3)x_3 - b_2 x_2\}$
      - $b_{i-2}x_{i-2} + (a_{i-1} - \lambda)x_{i-1} + b_{i-2}x_i = 0$ $(i = 3, \cdots, n)$ $\rightarrow x_i = \frac{1}{b_{i-1}}\{(\lambda - a_{i-1})x_{i-1} - b_{i-2}x_{i-2}\}$

三重対角行列の固有値 $b_i = 0$となる項がある場合

- 三重対角行列Aに$b_i = 0$となる項がある場合
  - $$\left[\begin{array}{cccc|cccc} a_1 & b_1 & 0 & & & \cdots & & 0 \\ b_1 & a_2 & \ddots & & & & & \\ 0 & \ddots & \ddots & b_{i-1} & & & & \\ & & b_{i-1} & a_i & 0 & & & \vdots \\ \hline & & & 0 & a_{i+1} & \ddots & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & b_{n-1} & 0 \\ & & & & & b_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & & \cdots & & & 0 & b_{n-1} & a_n \end{array}\right]$$
  - 行列式$|A - \lambda I| =$ $$\left|\begin{array}{cccc|cccc} a_1 - \lambda & b_1 & 0 & & & \cdots & & 0 \\ b_1 & a_2 - \lambda & \ddots & & & & & \\ 0 & \ddots & \ddots & b_{i-1} & & & & \\ & & b_{i-1} & a_i - \lambda & 0 & & & \vdots \\ \hline & & & 0 & a_{i+1} - \lambda & \ddots & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & b_{n-1} & 0 \\ & & & & & b_{n-1} & a_{n-1} - \lambda & b_{n-1} \\ 0 & & \cdots & & & 0 & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{array}\right|$$

三重対角行列の固有値 $b_i = 0$となる項がある場合

- 行列式の性質

$$A = \begin{vmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{vmatrix} = |A_1||A_2|$$

$$\begin{vmatrix}
a_1-\lambda & b_1 & 0 & & & \cdots & & 0 \\
b_1 & a_2-\lambda & \ddots & & & & & \\
0 & \ddots & \ddots & b_{i-1} & & & & \\
& & b_{i-1} & a_i-\lambda & 0 & & & \vdots \\
& & & 0 & a_{i+1}-\lambda & \ddots & 0 & \\
\vdots & & & & \ddots & \ddots & b_{n-1} & 0 \\
& & & & & b_{n-1} & a_{n-1}-\lambda & b_{n-1} \\
0 & & \cdots & & & 0 & b_{n-1} & a_n-\lambda
\end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix}
a_1-\lambda & b_1 & & 0 \\
b_1 & a_2-\lambda & \ddots & \\
& \ddots & \ddots & b_{i-1} \\
0 & & b_{i-1} & a_i-\lambda
\end{vmatrix}
\begin{vmatrix}
a_{i+1}-\lambda & b_{i+1} & & 0 \\
b_{i+1} & a_{i+2}-\lambda & \ddots & \\
& \ddots & \ddots & b_{n-1} \\
0 & & b_{n-1} & a_n-\lambda
\end{vmatrix}$$

三重対角行列の固有値 $b_i = 0$となる項がある場合

- $$\begin{bmatrix}
a_1 & b_1 & 0 & & & \cdots & & 0 \\
b_1 & a_2 & \ddots & & & & & \\
0 & \ddots & \ddots & b_{i-1} & & & & \\
& & b_{i-1} & a_i & 0 & & & \vdots \\
& & & 0 & a_{i+1} & \ddots & 0 & \\
\vdots & & & & \ddots & \ddots & b_{n-1} & 0 \\
& & & & & b_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\
0 & & \cdots & & & 0 & b_{n-1} & a_n
\end{bmatrix}$$

  の固有値は

  $$\begin{bmatrix}
a_1 & b_1 & & 0 \\
b_1 & a_2 & \ddots & \\
& \ddots & \ddots & b_{i-1} \\
0 & & b_{i-1} & a_i
\end{bmatrix} と \begin{bmatrix}
a_{i+1} & b_{i+1} & & 0 \\
b_{i+1} & a_{i+2} & \ddots & \\
& \ddots & \ddots & b_{n-1} \\
0 & & b_{n-1} & a_n
\end{bmatrix}$$

  の固有値となる

QR法

- N次正方行列Aの固有値・固有ベクトルを求める
- 手順
  - 行列Aを分解$\mathrm{A} = \mathrm{QR}$
    - Q:直交行列
    - R:上三角行列(対角要素が正または0)
  - 行列A'を$\mathrm{A}' = \mathrm{RQ}$により求める
    - $\mathrm{A} \rightarrow \mathrm{A}'$の変換を繰り返す
  - 上三角行列またはブロック三重対角行列に収束
  - 行列Aの固有値が対角要素として得られる

QR分解の前処理

- 正則行列Aのハウスホルダー変換によるヘッセンベルグ行列化（三重対角+右上三角行列）
  - ハウスホルダー変換は直交変換→固有値は不変
  - 相似変換行列Bを次式で表す
    - $B = I - 2UU^T$
      - » 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は対称なので$B = B^T$となる
      - Bは直交行列なので$B = B^{-1} = B^T$
    - 相似変換
      - $A' = B^{-1}AB = BAB$

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

$$
- BA = \begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a_{13}{}' & \cdots & a_{1n}{}' \\ a_{21}{}' & a_{22}{}' & a_{23}{}' & \cdots & a'_{2n} \\ 0 & a_{32}{}' & a_{33}{}' & \cdots & a'_{3n} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}{}' & a_{n3}{}' & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix}
$$

  - $B^{-1}AB$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，$U^T U = u_2{}^2 + \cdots + u_n{}^2 = 1$とする

ハウスホルダー（相似）変換行列

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

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

- ここで$a_{i1} - 2p_1u_i = 0 \ \ (i = 3,4,\cdots,n)$

ハウスホルダー（相似）変換行列

- $(BA)^T(BA) = (A^TB^T)(BA) = (A^TB^{-1})(BA) = A^TA$ について考える
  - $(BA)^T(BA) =$

$$\begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{12}{}' & a_{22}{}' & a_{32}{}' & \cdots & a'_{n2} \\ a_{13}{}' & a_{23}{}' & a_{33}{}' & \cdots & a'_{n3} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ a_{1n}{}' & a_{2n}{}' & a_{3n}{}' & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} & \cdots & a'_{1n} \\ a'_{21} & a_{22}{}' & a_{23}{}' & \cdots & a'_{2n} \\ 0 & a_{32}{}' & a_{33}{}' & \cdots & a'_{3n} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}{}' & a_{n3}{}' & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix}$$

    - 1行1列目要素$a'_{11}{}^2 + a'_{21}{}^2 = a_{11}{}^2 + (a_{21} - 2p_1u_2)^2$
  - A^TA
    - 1行1列目要素$a_{11}{}^2 + a_{21}{}^2 + \cdots + a_{n1}{}^2$

ハウスホルダー（相似）変換行列

- $(BA)^T(BA) = A^TA$
  - 1行1列目要素の比較してp_1を求める
    - $a_{11}{}^2 + (a_{21} - 2p_1u_2)^2 = a_{11}{}^2 + a_{21}{}^2 + \cdots + a_{n1}{}^2$
    - $(a_{21} - 2p_1u_2)^2 = a_{21}{}^2 + \cdots + a_{n1}{}^2$
- $a_{i1} - 2p_1u_i = 0 \ \ (i = 3,4,\cdots,n)$より
  - $a_{i1} = 2p_1u_i$を$a_{21}{}^2 + \cdots + a_{n1}{}^2$に適用
    - $a_{21}{}^2 + \cdots + a_{n1}{}^2 = a_{21}{}^2 + \sum_{i=3}^{n} a_{i1}{}^2$

$$= a_{21}{}^2 + \sum_{i=3}^{n} (2p_1u_i)^2 = a_{21}{}^2 + 4p_1{}^2 \sum_{i=3}^{n} u_i{}^2$$

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
    - $a_{21}{}^2+\cdots+a_{n1}{}^2=a_{21}{}^2+4p_1{}^2(1-u_2{}^2)$
- $(a_{21}-2p_1u_2)^2=a_{21}{}^2+\cdots+a_{n1}{}^2$より
  - $a_{21}{}^2-4a_{21}p_1u_2+4p_1{}^2u_2{}^2=$
    $a_{21}{}^2+4p_1{}^2(1-u_2{}^2)$
  - $-4a_{21}p_1u_2+4p_1{}^2u_2{}^2=4p_1{}^2(1-u_2{}^2)$
  - $p_1\neq 0$より$-a_{21}u_2+p_1u_2{}^2=p_1(1-u_2{}^2)$
    - $-a_{21}u_2=p_1\left(1-2u_2{}^2\right)$
    - $p_1=\frac{a_{21}u_2}{2u_2{}^2-1}$　p_1が求まったが，u_2が残っている

ハウスホルダー（相似）変換行列

- $(a_{21}-2p_1u_2)^2=\sum_{i=2}^{n}a_{i1}{}^2$をもちいて$u_2$を求める
  - $\sum_{i=2}^{n}a_{i1}{}^2=(a_{21}-2p_1u_2)^2=\left(a_{21}-2\frac{a_{21}u_2}{2u_2{}^2-1}u_2\right)^2=$
    $a_{21}{}^2\left(\frac{2u_2{}^2-1-2u_2{}^2}{2u_2{}^2-1}\right)^2=\left(\frac{a_{21}}{2u_2{}^2-1}\right)^2$
  - $\left(2u_2{}^2-1\right)^2=\frac{a_{21}{}^2}{\sum_{i=2}^{n}a_{i1}{}^2}$
  - $2u_2{}^2-1=\pm\frac{a_{21}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n}a_{i1}{}^2}}$
  - $u_2{}^2=\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{21}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n}a_{i1}{}^2}}\right\}$
  - $u_2=\pm\sqrt{\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{21}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n}a_{i1}{}^2}}\right\}}$　→これを$p_1=\frac{a_{21}u_2}{2u_2{}^2-1}$に代入

ハウスホルダー（相似）変換行列

- $p_1 = \frac{a_{21}u_2}{2{u_2}^2-1} = \frac{\pm a_{21}\sqrt{\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{21}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} {a_{\mathrm{i}1}}^2}}\right\}}}{2\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{21}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} {a_{\mathrm{i}1}}^2}}\right\}-1} = \frac{\pm a_{21}\sqrt{\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{21}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} {a_{\mathrm{i}1}}^2}}\right\}}}{\pm\frac{a_{21}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} {a_{\mathrm{i}1}}^2}}} =$
  $\pm\sqrt{\sum_{i=2}^{n} {a_{\mathrm{i}1}}^2}\sqrt{\frac{1}{2}\left\{1\pm\frac{a_{21}}{\sqrt{\sum_{i=2}^{n} {a_{\mathrm{i}1}}^2}}\right\}}$
  $= \pm\sqrt{\frac{\sum_{i=2}^{n} {a_{\mathrm{i}1}}^2 \pm a_{21}\sqrt{\sum_{i=2}^{n} {a_{\mathrm{i}1}}^2}\,1}{2}}$

  p_1が$a_{\mathrm{i}1}$のみで表された
- $a_{i1} - 2p_1u_i = 0 \ \ (i = 3,4,\cdots,n)$より$u_i$を求める
  - $u_i = \frac{a_{i1}}{2p_1} = \frac{a_{i1}}{2\frac{a_{21}u_2}{2{u_2}^2-1}} = \frac{a_{i1}(2{u_2}^2-1)}{2a_{21}u_2} = \frac{a_{i1}(2{u_2}^2-1)}{2a_{21}u_2}\,(i = 3,4,\cdots,n)$

ヘッセンベルグ行列化

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

ヘッセンベルグ行列化

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

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

ヘッセンベルグ行列化

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

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

  - ここで$a_{i1} - 2p_1u_i = 0 \ \ (i = 3,4,\cdots,n)$ 重要

ヘッセンベルグ行列化

- $A' = B^{-1}AB = A - 2UP^T - 2AUU^T + 4UU^TAUU^T$

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12}' & a_{13}' & \cdots & a_{1n}' \\ a_{21} & a_{22}' & a_{23}' & \cdots & a_{2n}' \\ 0 & a_{32}' & a_{33}' & \cdots & a_{3n}' \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}' & a_{n3}' & \cdots & a_{nn}' \end{bmatrix}$$

  - $a_{i1}' = a_{i1} - 2p_1u_i = 0 \ \ (i = 3, \cdots, n)$
  - 繰り返しによりヘッセンベルグ行列化できる

ハウスホルダー（相似）変換による正則行列のヘッセンベルグ行列化

- 逐次的処理でヘッセンベルグ行列化を行う
  - $A_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$
  - $A_2 = {B_2}^{-1}A_1B_2 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & & a_{2n} \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & & a_{3n} \\ 0 & a_{42} & a_{43} & a_{43} & & a_{4n} \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2} & a_{n3} & a_{n4} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$
  - $A_{n-2} = {B_{n-2}}^{-1}A_{n-3}B_{n-2} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & & \cdots & & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{15} & & & & \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & & & & \\ \vdots & 0 & a_{44} & a_{44} & \ddots & & & \vdots \\ & & & a_{54} & \ddots & \ddots & a_{n-3,n-1} & a_{n-3,n} \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & a_{n-2,n-1} & a_{n-2,n} \\ & & & & & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & & \cdots & & & 0 & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix}$

ヘッセンベルグ行列をQR分解する

- ヘッセンベルグ行列
- $H = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} & & h_{2n} \\ 0 & h_{32} & h_{33} & h_{34} & & h_{3n} \\ 0 & 0 & h_{43} & h_{44} & & h_{4n} \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$
  - 直交行列を用いて，Hの対角項より下の項を0に変換したものを右上三角行列Rとする
  - 変換に用いる直交行列がQとなる
    - どうやって変換するか
    - 固有値の話は後

ヘッセンベルグ行列をQR分解する

- 直交行列P_kを考える

$$P_k = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & & \text{k列} & \text{k+1列} & & \end{array} \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & & & \\ \vdots & \ddots & \cos\theta_k & -\sin\theta_k & & \\ & & \sin\theta_k & \cos\theta_k & 0 & \\ & & & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & & & & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \\ \\ \\ \text{k行} \\ \text{k+1行} \\ \\ \\ \end{array}$$

- ${P_k}^T = {P_k}^{-1}$

ヘッセンベルグ行列をQR分解する

$k = 1$

- $$P_1 = \begin{bmatrix} \cos\theta_1 & -\sin\theta_1 & 0 & & 0 \\ \sin\theta_1 & \cos\theta_1 & 0 & & \\ 0 & 0 & 1 & & \\ \vdots & & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & & & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
- $P_1 H =$

$$\begin{bmatrix} \cos\theta_1 & -\sin\theta_1 & 0 & & 0 \\ \sin\theta_1 & \cos\theta_1 & 0 & & \\ 0 & 0 & 1 & & \\ \vdots & & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & & & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2n} \\ 0 & h_{32} & \cdots & h_{3n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & h_{n-1,n} & h_{nn} \end{bmatrix}$$

ヘッセンベルグ行列をQR分解する

- $P_1 H =$

$$\begin{bmatrix} h_{11}\cos\theta_1 - h_{21}\sin\theta_1 & h_{12}\cos\theta_1 - h_{22}\sin\theta_1 & \cdots & h_{1n}\cos\theta_1 - h_{2n}\sin\theta_1 \\ \boxed{h_{11}\sin\theta_1 + h_{21}\cos\theta_1} & h_{12}\sin\theta_1 + h_{22}\cos\theta_1 & \cdots & h_{1n}\sin\theta_1 + h_{2n}\cos\theta_1 \\ 0 & h_{32} & \cdots & h_{3n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & h_{n-1,n} & h_{nn} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \mathrm{r}_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ \boxed{0} & h_{22}{}' & \cdots & h_{2n}{}' \\ 0 & h_{32} & \cdots & h_{3n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & h_{n-1,n} & h_{nn} \end{bmatrix}$$

3行目以降はもとのHと同じ
1,2行目のみを計算すれば良い

- 第2行1列目を0にする→$h_{11}\sin\theta_1 + h_{21}\cos\theta_1 = 0$
  - $\tan\theta_1 = \frac{\sin\theta_1}{\cos\theta_1} = \frac{-h_{21}}{h_{11}}$, $\cos\theta_1 = \frac{h_{11}}{\sqrt{{h_{11}}^2 + {h_{21}}^2}}$, $\sin\theta_1 = \frac{-h_{21}}{\sqrt{{h_{11}}^2 + {h_{21}}^2}}$
  - このとき$\mathrm{r}_{11} = \sqrt{{h_{11}}^2 + {h_{21}}^2} \geq 0$（非負）

ヘッセンベルグ行列をQR分解する

$k=2$

- $P_2=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & \cos\theta_2 & -\sin\theta_2 & 0 & & \\ 0 & \sin\theta_2 & \cos\theta_2 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & & \\ \vdots & & & & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 1 \end{bmatrix}$
- $P_2P_1H=$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & \cos\theta_2 & -\sin\theta_2 & 0 & & \\ 0 & \sin\theta_2 & \cos\theta_2 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & & \\ \vdots & & & & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathrm{r}_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & h_{22}{}' & \cdots & h_{2\mathrm{n}}{}' \\ 0 & h_{32} & \cdots & h_{3n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & h_{n-1,n} & h_{nn} \end{bmatrix}$$

ヘッセンベルグ行列をQR分解する

- $P_2P_1H=$

$$\begin{bmatrix} \mathrm{r}_{11} & \mathrm{r}_{12} & \mathrm{r}_{13} & \cdots & \mathrm{r}_{1\mathrm{n}} \\ & h_{22}{}'\cos\theta_2-h_{32}\sin\theta_2 & h_{23}{}'\cos\theta_2-h_{33}\sin\theta_2 & \cdots & h_{2n}{}'\cos\theta_2-h_{3n}\sin\theta_2 \\ & \boxed{h_{22}{}'\sin\theta_2+h_{32}\cos\theta_2} & h_{23}{}'\sin\theta_2+h_{33}\cos\theta_2 & \cdots & h_{2n}{}'\sin\theta_2+h_{3n}\cos\theta_2 \\ 0 & 0 & h_{43} & & h_{3n} \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & & & h_{n-1,n} & h_{nn} \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} \mathrm{r}_{11} & r_{12} & r_{13} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & \cdots & r_{2\mathrm{n}} \\ & \boxed{0} & h'_{33} & \cdots & h'_{3n} \\ & & h_{43} & & h_{4n} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & h_{n-1,n} & h_{nn} \end{bmatrix}$$

4行目以降はもとのHと同じ
2,3行目のみを計算すれば良い

- 第3行2列目を0にする→$h_{22}{}'\sin\theta_2+h_{32}\cos\theta_2=0$
  - $\tan\theta_2=\frac{\sin\theta_2}{\cos\theta_2}=\frac{-h_{32}}{h_{22}{}'}$,$\cos\theta_2=\frac{h_{22}{}'}{\sqrt{h_{22}{}'^2+h_{32}{}^2}}$, $\sin\theta_2=\frac{-h_{32}}{\sqrt{h_{22}{}'^2+h_{32}{}^2}}$
  - このとき$r_{22}=\sqrt{h_{22}{}'^2+h_{32}{}^2}\geq 0$(非負)

ヘッセンベルグ行列をQR分解する

- $n-1$回繰り返す
- $P_{\mathrm{n}-1}\cdots P_2 P_1 H = \begin{bmatrix} \mathrm{r}_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1,n-1} & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \cdots & r_{2,n-1} & r_{2\mathrm{n}} \\ 0 & 0 & \cdots & r_{3,n-1} & r_{3n} \\ & & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & r_{n-1,n-1} & r_{n-1,n} \\ 0 & & & 0 & h'_{nn} \end{bmatrix}$
  - 対角成分$r_{ii} \geq 0 (i = 1, \cdots, n-1)$
    - h'_{nn}以外は非負となる

ヘッセンベルグ行列をQR分解する

- $P_{\mathrm{n}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ & & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & & & 0 & \mathrm{sgn}(h'_{nn}) \end{bmatrix}$とする
  - $P_n{}^T = P_n{}^{-1}$なので直交行列
  - $R = P_{\mathrm{n}} P_{\mathrm{n}-1} \cdots P_1 H$
    - 上三角行列R
    - 対角成分が非負$r_{ii} \geq 0 (i = 1, \cdots, n)$

ヘッセンベルグ行列をQR分解する

- $R = P_{\mathrm{n}} P_{\mathrm{n-1}} \cdots P_1 H$
  - P_{k}は直交行列 → 逆行列$P_{\mathrm{k}}{}^{-1}$
  - $P_1{}^{-1} \cdots P_{\mathrm{n-1}}{}^{-1} P_{\mathrm{n}}{}^{-1} R =$
    $P_1{}^{-1} \cdots P_{\mathrm{n-1}}{}^{-1} P_{\mathrm{n}}{}^{-1} P_{\mathrm{n}} P_{\mathrm{n-1}} \cdots P_1 H$
  - よって$H = P_1{}^{-1} \cdots P_{\mathrm{n-1}}{}^{-1} P_{\mathrm{n}}{}^{-1} R$
    - P_{k}は直交行列 → $P_1{}^{-1} \cdots P_{\mathrm{n-1}}{}^{-1} P_{\mathrm{n}}{}^{-1}$も直交行列
    - $Q = P_1{}^{-1} \cdots P_{\mathrm{n-1}}{}^{-1} P_{\mathrm{n}}{}^{-1} = P_1{}^{T} \cdots P_{\mathrm{n-1}}{}^{T} P_{\mathrm{n}}{}^{T} = (P_{\mathrm{n}} P_{\mathrm{n-1}} \cdots P_1)^T$
    - $H = QR$と分解できる → QR分解の一意性は？

QR分解の一意性

- 正則行列AのQR分解$A = Q_1 R_1 = Q_2 R_2$を考える
  - 行列式$|A| = |Q_1||R_1| = |Q_2||R_2| \neq 0$
    - $|Q_1| \neq 0, |R_1| \neq 0, |Q_2| \neq 0, |R_2| \neq 0$→正則
      - $Q_1{}^{-1} Q_1 R_1 R_2{}^{-1} = R_1 R_2{}^{-1} = Q_1{}^{-1} Q_2 R_2 R_2{}^{-1} = Q_1{}^{-1} Q_2$
  - Q_1, Q_2は直交行列→$Q_1{}^{-1} Q_2$も直交行列
    - $R_1 R_2{}^{-1}$も直交行列$R_1 R_2{}^{-1} = \left(R_1 R_2{}^{-1}\right)^T = \left(R_1 R_2{}^{-1}\right)^{-1}$
  - 上三角行列の性質
    - 逆行列は上三角行列
    - 上三角行列との積は上三角行列
      - R_1, R_2は上三角行列→ $R_1 R_2{}^{-1}$は上三角行列
        - » $R_1 R_2{}^{-1}$の転置行列は下三角行列となるから
          $R_1 R_2{}^{-1} = \left(R_1 R_2{}^{-1}\right)^T$より対角成分のみを持つ対角行列

QR分解の一意性

- $R_1{R_2}^{-1}$は直交行列より
  - $\left(R_1{R_2}^{-1}\right)^T\left(R_1{R_2}^{-1}\right) = \left(R_1{R_2}^{-1}\right)^{-1}\left(R_1{R_2}^{-1}\right) = I$
  - 対角要素は非負なので$R_1{R_2}^{-1} = I$
    - $R_1 = R_2$
    - ${Q_1}^{-1}Q_2 = R_1{R_2}^{-1}$より${Q_1}^{-1}Q_2 = I$
      - $Q_1 = Q_2$
  - よって一意性が成り立つ

行列Aの固有値の求解

- 正則なn次正方行列Aが，異なる固有値$\lambda_i (i = 1, \cdots, n)$を持つ
  - 固有値の大きさ$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| > 0$
- 求め方
  - 初期値の設定$A_1 = A$
  - QR分解$A_k = Q_k R_k \quad \rightarrow \quad A_{k+1} = R_k Q_k$
    - 繰り返し$\lim_{k\to\infty} A_k$は右上三角行列に収束
      - 対角要素に絶対値の大きい順にAの固有値が並ぶ
  - このようにすると求まるのは何故？

行列Aの固有値

- 正則行列Aの固有値$\lambda_i (i = 1, \cdots, n)$を$n \times n$行列の対角線上に並べた行列$\Lambda$
  - $\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$　　対角行列
  - 固有値に対応する固有ベクトルを並べた行列X
  - $AX = X\Lambda$
  - 固有ベクトルは一次独立なのでXは正則
    - $AXX^{-1} = A = X\Lambda X^{-1}$
    - $A^k = (X\Lambda X^{-1})^k = (X\Lambda X^{-1})(X\Lambda X^{-1}) \cdots (X\Lambda X^{-1}) = X\Lambda^k X^{-1}$

行列Aの固有値

- 正則な固有ベクトル行列
  - X のQR分解
    - $X = QR$
      - Q直交行列
      - R対角要素が非負の右上三角行列
  - X^{-1}のLU分解
    - $X^{-1} = LU$
      - L対角要素が1の左下三角行列
      - U右上三角行列
- 行列Aの固有値との関係　　$(\Lambda^{-1})^k \Lambda^k = I$
  - $A^k = X\Lambda^k X^{-1} = (QR)\Lambda^k (LU) = (QR)\Lambda^k [L(\Lambda^{-1})^k \Lambda^k U] = (QR)[\Lambda^k L(\Lambda^{-1})^k][\Lambda^k U]$

行列Aの固有値

- $\left(b_{ij}{}^{(k)}\right) = \Lambda^k L(\Lambda^{-1})^k$について考える
  - $\Lambda^k, (\Lambda^{-1})^k$は対角行列，$L$は左下三角行列なので，これも左下三角行列になることを示す
    - $\Lambda^k = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}^k = \begin{bmatrix} \lambda_1{}^k & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n{}^k \end{bmatrix}$
    - $\Lambda^{-1} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \lambda_1{}^{-1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n{}^{-1} \end{bmatrix}$
    - $(\Lambda^{-1})^k = \begin{bmatrix} \lambda_1{}^{-k} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n{}^{-k} \end{bmatrix}$
    - $L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$

行列Aの固有値

- $\Lambda^k L(\Lambda^{-1})^k = \begin{bmatrix} \lambda_1{}^k & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n{}^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1{}^{-k} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n{}^{-k} \end{bmatrix} =$

$$\begin{bmatrix} \lambda_1{}^k & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n{}^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1{}^{-k} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21}\lambda_1{}^{-k} & \lambda_2{}^{-k} & 0 & & 0 \\ l_{31}\lambda_1{}^{-k} & l_{32}\lambda_2{}^{-k} & \lambda_3{}^{-k} & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ l_{n1}\lambda_1{}^{-k} & l_{n2}\lambda_2{}^{-k} & l_{n3}\lambda_3{}^{-k} & \cdots & \lambda_n{}^{-k} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \lambda_1{}^k\lambda_1{}^{-k} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \lambda_2{}^k l_{21}\lambda_1{}^{-k} & \lambda_2{}^k\lambda_2{}^{-k} & 0 & & 0 \\ \lambda_3{}^k l_{31}\lambda_1{}^{-k} & \lambda_3{}^k l_{32}\lambda_2{}^{-k} & \lambda_3{}^k\lambda_3{}^{-k} & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ \lambda_n{}^k l_{n1}\lambda_1{}^{-k} & \lambda_n{}^k l_{n2}\lambda_2{}^{-k} & \lambda_n{}^k l_{n3}\lambda_3{}^{-k} & \cdots & \lambda_n{}^k\lambda_n{}^{-k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21}\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k & 1 & 0 & & 0 \\ l_{31}\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^k & l_{32}\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_2}\right)^k & 1 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ l_{n1}\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k & l_{n2}\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_2}\right)^k & l_{n3}\left(\frac{\lambda_n}{\lambda_3}\right)^k & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

行列Aの固有値

- 左下三角行列
  - $b_{ij}{}^{(k)} = \begin{cases} 0 & (i < j) \\ 1 & (i = j) \\ l_{ij}\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^k & (i > j) \end{cases}$
    - 対角項Iとそれ以外L_kに分ける
      - $\Lambda^k L(\Lambda^{-1})^k = I + L_k$
      - L_kの成分についてi > jなので，$|\lambda_j| > |\lambda_i|$より$\lim_{k\to\infty} l_{ij}\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right)^k = 0$
        - » $\lim_{k\to\infty} L_k = 0$
      - $A^k = (QR)[\Lambda^k L(\Lambda^{-1})^k][\Lambda^k U] = (QR)(I + L_k)(\Lambda^k U) = Q(R + RL_k)R^{-1}R(\Lambda^k U) = Q(I + RL_k R^{-1})(R\Lambda^k U)$

行列Aの固有値

- $I + RL_k R^{-1}$をQR分解する
  - $I + RL_k R^{-1} = Q'R' = A'$
  - $k \to \infty$において$A' \to I$ならば$Q' \to I, R' \to I$を示す
    - $\lim_{k\to\infty} Q'R' = \lim_{k\to\infty} A' = \lim_{k\to\infty}(I + RL_k R^{-1}) = I$
    - $\lim_{k\to\infty} A'^T A' = II = I$
    - $A'^T A' = (Q'R')^T(Q'R') = (R'^T Q'^T)(Q'R') = R'^T Q'^{-1} Q'R' = R'^T R'$
      - Q'は直交行列
      - $\lim_{k\to\infty} R'^T R' = \lim_{k\to\infty} A'^T A' = I$

行列Aの固有値

- R'対角要素が非負の右上三角行列
  - $R' = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & & r_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{nn} \end{bmatrix}$
  - $R'^T R' = \begin{bmatrix} r_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ r_{12} & r_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ r_{1n} & r_{2n} & \cdots & r_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & & r_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{nn} \end{bmatrix} =$
$\begin{bmatrix} {r_{11}}^2 & r_{11}r_{12} & \cdots & r_{11}r_{1n} \\ r_{12}r_{11} & {r_{12}}^2 + {r_{22}}^2 & & r_{12}r_{2n} + r_{22}r_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ r_{1n}r_{11} & r_{1n}r_{12} + r_{2n}r_{22} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} {r_{in}}^2 \end{bmatrix}$
  - $k \to \infty$において$r_{ii} = 1 (i = 1, \cdots, n)$※非負, $r_{ij} = 0 (i \neq j)$
    - $R' = I$となる。$A' = Q'R' = I$より$Q' = I$となる。

行列Aの固有値

- $I + RL_kR^{-1} = Q'R' = A'$
- $A^k = Q(I + RL_kR^{-1})(R\Lambda^kU) = QQ'R'R\Lambda^kU$
  - Q, Q'は直交行列
  - R, R'は対角要素が正の右上三角行列
  - Λ^kは対角行列（正負）
  - Uは右上三角行列

$\left.\begin{array}{l} \Lambda^k \\ U \end{array}\right\}$ 対角要素を正とすることを考える

行列Aの固有値

- Λ^kに対して$D_1 = \begin{bmatrix} \mathrm{sgn}(\lambda_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathrm{sgn}(\lambda_2) & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathrm{sgn}(\lambda_n) \end{bmatrix}$
  - $D_1\Lambda^k$の対角項は非負となる
- Uに対して

  $D_2 = \begin{bmatrix} \mathrm{sgn}(u_{11}) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathrm{sgn}(u_{22}) & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathrm{sgn}(u_{nn}) \end{bmatrix}$
  - D_2Uの対角項は非負となる

行列Aの固有値

- $A^k = QQ'R'R\Lambda^k U = \{QQ'\}D_2{}^{-1}\left(D_1{}^{-1}\right)^k D_1{}^k D_2\{R'R\Lambda^k U\} = \left\{QQ'D_2{}^{-1}\left(D_1{}^{-1}\right)^k\right\}\{D_1{}^k D_2 R'R\Lambda^k U\}$
  - $QQ'D_2{}^{-1}\left(D_1{}^{-1}\right)^k$は直交行列
  - $D_1{}^k D_2 R'R\Lambda^k U$は対角要素が非負の右上三角行列

行列AのQR分解

- QR分解の繰り返し
  - $A_1 = A$として，$A_1 = Q_1 R_1$と分解
  - $A_2 = R_1 Q_1$として，$A_2 = Q_2 R_2$と分解
  - $A_k = R_{k-1} Q_{k-1}$として，$A_k = Q_k R_k$と分解
- 合成値を求める
  - ${A_1}^2 = (Q_1 R_1)(Q_1 R_1) = Q_1 (R_1 Q_1) R_1 = Q_1 A_2 R_1 = Q_1 Q_2 R_2 R_1$
  - ${A_1}^3 = {A_1}^2 A_1 = (Q_1 Q_2 R_2 R_1)(Q_1 R_1) = Q_1 Q_2 R_2 (R_1 Q_1) R_1 = Q_1 Q_2 R_2 (Q_2 R_2) R_1 = Q_1 Q_2 (R_2 Q_2) R_2 R_1 = Q_1 Q_2 A_3 R_2 R_1 = Q_1 Q_2 Q_3 R_3 R_2 R_1$

行列AのQR分解

- ${A_1}^k = {A_1}^{k-1} A_1 = (Q_1 \cdots Q_{k-1} R_{k-1} \cdots R_1)(Q_1 R_1) =$
  $Q_1 \cdots Q_{k-1} R_{k-1} \cdots R_2 (R_1 Q_1) R_1 =$
  $Q_1 \cdots Q_{k-1} R_{k-1} \cdots R_2 (Q_2 R_2) R_1 =$
  $Q_1 \cdots Q_{k-1} R_{k-1} \cdots R_3 (R_2 Q_2) R_2 R_1 =$
  $Q_1 \cdots Q_{k-1} R_{k-1} \cdots R_3 (Q_3 R_3) R_2 R_1 =$
  $Q_1 \cdots Q_{k-1} R_{k-1} \cdots R_{i+1} (R_i Q_i) R_{i-1} \cdots R_1 =$
  $Q_1 \cdots Q_{k-1} R_{k-1} \cdots R_{i+1} (Q_{i+1} R_i) R_{i-1} \cdots R_1 =$
  $Q_1 \cdots Q_{k-1} Q_k R_k R_{k-1} \cdots R_1$
  - $Q_1 \cdots Q_{k-1} Q_k$は直交行列
  - $R_k R_{k-1} \cdots R_1$は対角要素が非負の右上三角行列

行列AのQR分解

- QR分解の一意性より
  - $Q_1 \cdots Q_{k-1} Q_k = QQ' {D_2}^{-1} \left({D_1}^{-1}\right)^k$
  - $R_k R_{k-1} \cdots R_1 = {D_1}^k D_2 R' R \Lambda^k U$

行列AのQR分解

- A_kの別表現
  - $A_k = Q_k R_k = R_{k-1} Q_{k-1} = {Q_{k-1}}^{-1} Q_{k-1} (R_{k-1} Q_{k-1}) = {Q_{k-1}}^{-1} A_{k-1} Q_{k-1}$
  - Q_{k-1}は直交行列
    - ${Q_{k-1}}^T = {Q_{k-1}}^{-1}$
    - $A_k = {Q_{k-1}}^{-1} A_{k-1} Q_{k-1} = {Q_{k-1}}^T A_{k-1} Q_{k-1} = {Q_{k-1}}^T {Q_{k-2}}^T A_{k-2} Q_{k-2} Q_{k-1} = {Q_{k-1}}^T \cdots {Q_1}^T A_1 Q_1 \cdots Q_{k-1} = (Q_1 \cdots Q_{k-1})^T A_1 (Q_1 \cdots Q_{k-1})$

行列AのQR分解

- $A_{k+1} = (Q_1 \cdots Q_k)^T A_1 (Q_1 \cdots Q_k) = \left\{QQ'{D_2}^{-1}\left({D_1}^{-1}\right)^k\right\}^T A_1 \left\{QQ'{D_2}^{-1}\left({D_1}^{-1}\right)^k\right\}$
- $X = QR$より
  - $A = A_1 = X\Lambda X^{-1} = (QR)\Lambda(QR)^{-1} = QR\Lambda R^{-1}Q^{-1}$
- $A_{k+1} = \left\{QQ'{D_2}^{-1}\left({D_1}^{-1}\right)^k\right\}^T QR\Lambda R^{-1}Q^{-1} \left\{QQ'{D_2}^{-1}\left({D_1}^{-1}\right)^k\right\} = \left\{\left({D_1}^{-1}\right)^k\right\}^T \left\{{D_2}^{-1}\right\}^T Q'^T Q^T QR\Lambda R^{-1}Q^{-1}QQ'{D_2}^{-1}\left({D_1}^{-1}\right)^k = \left\{\left({D_1}^{-1}\right)^k\right\}^T \left\{{D_2}^{-1}\right\}^T Q'^T Q^{-1} QR\Lambda R^{-1}Q^{-1}QQ'{D_2}^{-1}\left({D_1}^{-1}\right)^k = \left\{\left({D_1}^{-1}\right)^k\right\}^T \left\{{D_2}^{-1}\right\}^T Q'^T R\Lambda R^{-1}Q'{D_2}^{-1}\left({D_1}^{-1}\right)^k$

行列AのQR分解

- 上三角行列の逆行列
  - 上三角行列 $U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & & u_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}, u_{ii} \neq 0$
  - 逆行列 $U' = \begin{bmatrix} u'_{11} & u'_{12} & \cdots & u'_{1n} \\ 0 & u'_{22} & & u'_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u'_{nn} \end{bmatrix}$
    - $u'_{ii} = \frac{1}{u_{ii}}$
    - $u'_{ij} = u_{ij} = 0 \quad (i > j)$
    - $u'_{ij} = \frac{1}{u_{ij}} \sum_{k=i+1}^{j} u_{ik} u'_{kj} \quad (i < j)$

行列AのQR分解

- 上三角行列Rと固有値対角行列Λの積$R\Lambda R^{-1}$

$$
= \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & & r_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{nn} \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} r'_{11} & r'_{12} & \cdots & r'_{1n} \\ 0 & r'_{22} & & r'_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r'_{nn} \end{bmatrix} =
$$

$$
\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & & r_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{nn} \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} \lambda_1 r'_{11} & \lambda_1 r'_{12} & \cdots & \lambda_1 r'_{1n} \\ 0 & \lambda_2 r'_{22} & & \lambda_2 r'_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n r'_{nn} \end{bmatrix} =
$$

$$
\begin{bmatrix} \lambda_1 r_{11} r'_{11} & \lambda_1 r_{11} r'_{12} + \lambda_2 r_{12} r'_{22} & \cdots & \lambda_1 r_{11} r'_{1n} + \lambda_2 r_{12} r'_{2n} + \cdots + \lambda_n r_{1n} r'_{nn} \\ 0 & \lambda_2 r_{22} r'_{22} & & \lambda_2 r_{22} r'_{2n} + \lambda_3 r_{23} r'_{3n} + \cdots + \lambda_n r_{2n} r'_{nn} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n r_{nn} r'_{nn} \end{bmatrix}
$$

  - 対角項について$\lambda_i r_{ii} r'_{ii} = \lambda_i r_{ii} \frac{1}{r_{ii}} = \lambda_i$→ 対角上に固有値が並ぶ

行列AのQR分解

- $A_{k+1} =$
$\left\{ \left(D_1{}^{-1} \right)^k \right\}^T \left\{ D_2{}^{-1} \right\}^T Q'^T R\Lambda R^{-1} Q' D_2{}^{-1} \left(D_1{}^{-1} \right)^k$
  - $R\Lambda R^{-1}$は対角上に固有値が並ぶ
  - D_1, D_2は成分が±1の対角行列
    - $\left\{ \left(D_1{}^{-1} \right)^k \right\}^T \left\{ D_2{}^{-1} \right\}^T \cdots D_2{}^{-1} \left(D_1{}^{-1} \right)^k$は単位行列化
  - $k \to \infty$において$Q' = I$となるので$Q'^T = I$
  - $\lim_{k \to \infty} A_{k+1} = R\Lambda R^{-1}$
    - 対角上に固有値が並ぶ。行列Aの固有値に収束する

固有ベクトルの求解

- 逆反転法
  - 行列Aの固有値λ_kの近似値λ'_k
  - 初期ベクトル$X^{(0)}$の設定
  - 反復計算
    - $X^{(k+1)} = (A - \lambda_k I)X^{(k)}$
    - $k \to \infty$において$X^{(k)}$は固有ベクトルXに収束