数値解析
第六回　固有値
べき乗法

舟木　剛

平成26年11月5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

行列の固有値

- 用途
  - 制御工学などでシステムの振る舞いの安定性を判断
  - 数値解析での収束性評価（連立方程式の反復解法等）
  - 行列のままで処理　→　代数方程式への変形における誤差の抑制
- 解法
  - 解析解　→　難しい（無い事もある）
  - べき乗法（累乗法）　→　最大（支配的）固有値を求める
  - ヤコビ法，ハウスホルダー法　→　対称行列用
  - QR法　→　非対称行列も可
- 固有値・固有ベクトルからべき乗法による数値解の求解

固有値と固有ベクトル 固有値問題

- 正方行列A（$n \times n$）の固有値λ（スカラー）と固有ベクトルX（n次元）の関係
  - $AX = \lambda X$
    - λ:行列Aの固有値
    - X:行列Aの固有値λに属する固有ベクトル
  - $(A - \lambda I)X = 0$
    - $X \neq 0$となる解をもつ必要十分条件
  - $\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0$
  - 展開すると特性方程式になる
    - $\lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + \cdots + c_{n-1}\lambda + c_n = 0$
    - これを解いたものが固有値λ

固有ベクトル

- 行列Aの固有値λ_iに対する固有ベクトルX_iを求める
  - $\det(A-\lambda_i I)=0$
    - $(A-\lambda_i I)X_i=0$を満たす固有ベクトルX_iは一意に定まらない
  - 固有値が単根（実数）の場合
    - 値が0とならない要素x_iを一つ定める
    - あと$\left(x_j, j\neq i\right)$は芋づる式
  - 固有値がn重根の場合
    - 対応するn 個の固有ベクトルは一次独立なベクトル

固有値の例

- 行列$A = \begin{bmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & -2 \end{bmatrix} \rightarrow \ AX = \lambda X$
- 行列式$\begin{vmatrix} -2-\lambda & 0 & 1 \\ 0 & -\lambda & 0 \\ 4 & 0 & -2-\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^2(\lambda + 4) = 0$
  - 固有値$\lambda = -4,0$(重根)
  - 固有値$\lambda = -4$の固有ベクトル
    - $\begin{bmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & -2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = -4\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 4 & 0 \\ 4 & 0 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 0$
      - $2x_1 + x_3 = 0,\ 4x_2 = 0,\ 4x_1 + 2x_3 = 0$
        $\rightarrow x_2 = 0, x_3 = -2x_1$ ⇒ 一意に定まらない

固有値の例

– 固有値$\lambda = 0$(重根)の固有ベクトル

- $\begin{bmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 0 \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$
  - $\rightarrow \begin{bmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = 0$
  - $-2x_1 + x_3 = 0, 4x_1 - 2x_3 = 0$
    $\rightarrow x_3 = 2x_1, x_2$は不定
  - 固有ベクトルは任意のスカラーC_1, C_2定数を用いて

    » $C_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} + C_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

各々一次独立にとる

べき乗法

- 絶対値が最大の固有値に対応する固有ベクトルを求め，固有ベクトルから固有値を求める
- 適当な初期列ベクトル$X^{(0)}$を設定
  - ただし$AX^{(0)} \neq 0$
  - 反復計算$X^{(1)} = AX^{(0)}, X^{(2)} = AX^{(1)}, \cdots, X^{(k+1)} = AX^{(k)}$
    - $X^{(k)}$は，絶対値最大の固有値に対する固有ベクトルに収束する　→　後で説明
      - ${X^{(k)}}^T = \left[{x_1}^{(k)}, {x_2}^{(k)}, \cdots, {x_n}^{(k)}\right]$

べき乗法

- 求めた固有ベクトルから固有値を求める
  - ベクトルの内積の商(レイリー商)を用いる
    - $AX = \lambda X$
    - $X^{(k+1)} = AX^{(k)} \cong \lambda X^{(k)}$
    - ベクトルの内積を考える
      - $X^{(k)} \cdot X^{(k+1)} \cong \lambda X^{(k)} \cdot X^{(k)}$
    - レイリー商
      - $\lambda \cong \frac{X^{(k)} \cdot X^{(k+1)}}{X^{(k)} \cdot X^{(k)}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i{}^{(k)} x_i{}^{(k+1)}}{\sum_{i=1}^{n} \left\{x_i{}^{(k)}\right\}^2}$
  - $X^{(k)}$と$X^{(k+1)}$の成分比として固有値を考える
    - 下記の$r_1, r_2, \cdots, r_n$のうちの１つ，または平均値を固有値とする簡略法
      - $r_1 = \frac{x_1{}^{(k+1)}}{x_1{}^{(k)}}, r_2 = \frac{x_2{}^{(k+1)}}{x_2{}^{(k)}}, \cdots, r_n = \frac{x_n{}^{(k+1)}}{x_n{}^{(k)}}$

べき乗法の収束

- 絶対値の大きさ順に並べた行列Aの固有値
  - $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_{\mathrm{n}}|$ n個
  - 対応する固有ベクトル$U_1, U_2, \cdots, U_n$
    - 固有ベクトルは一次独立
    - スカラー係数$C_1, C_2, \cdots, C_n$を用いて任意のベクトルを表せる
      - べき乗法で用いる初期値と固有値ベクトルの関係 $X^{(0)} = C_1U_1 + C_2U_2 + \cdots + C_nU_n$
      - 固有値と固有ベクトルとの関係
        - » $AU_1 = \lambda_1 U_1, AU_2 = \lambda_2 U_2, \cdots, AU_{\mathrm{n}} = \lambda_n U_{\mathrm{n}}$

べき乗法の収束

- べき乗法で更新されていく固有値ベクトル近似値
  - $X^{(1)} = AX^{(0)} = C_1 AU_1 + C_2 AU_2 + \cdots + C_n AU_n$
    $= C_1 \lambda_1 U_1 + C_2 \lambda_2 U_2 + \cdots + C_n \lambda_{\mathrm{n}} U_n$
  - $X^{(2)} = AX^{(1)} = C_1 {\lambda_1}^2 U_1 + C_2 {\lambda_2}^2 U_2 + \cdots + C_n {\lambda_{\mathrm{n}}}^2 U_n$
  - $X^{(k)} = AX^{(k-1)} = C_1 {\lambda_1}^k U_1 + C_2 {\lambda_2}^k U_2 + \cdots + C_n {\lambda_{\mathrm{n}}}^k U_n$
    $= {\lambda_1}^k \left\{ C_1 U_1 + C_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k U_2 + \cdots + C_n \left(\frac{\lambda_{\mathrm{n}}}{\lambda_1}\right)^k U_n \right\}$
  - 成分表記
    - ${X^{(k)}}^T = \left[{x_1}^{(k)}, {x_2}^{(k)}, \cdots, {x_n}^{(k)}\right]$
    - ${U_i}^T = \left[{u_1}^i, {u_2}^i, \cdots, {u_n}^i\right]$

べき乗法の収束

- 固有値ベクトル近似値各成分の変化
  - $x_i^{(k)} = \lambda_1^{\ k}\left\{C_1 u_{1,i} + C_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k u_{2,i} + \cdots + C_n\left(\frac{\lambda_\mathrm{n}}{\lambda_1}\right)^k u_{n,i}\right\}$
  - 1回の反復での変化
    - $\frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}} = \frac{\lambda_1^{\ k+1}\left\{C_1 u_{1,i} + C_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{k+1} u_{2,i} + \cdots + C_n\left(\frac{\lambda_\mathrm{n}}{\lambda_1}\right)^{k+1} u_{n,i}\right\}}{\lambda_1^{\ k}\left\{C_1 u_{1,i} + C_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{k} u_{2,i} + \cdots + C_n\left(\frac{\lambda_\mathrm{n}}{\lambda_1}\right)^{k} u_{n,i}\right\}}$
    - $|\lambda_1| > |\lambda_2|$および$C_1 \neq 0$に対して
      - $\lim_{k\to\infty}\frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}} = \lambda_1 \quad \leftarrow \quad \lim_{k\to\infty}\left(\frac{\lambda_\mathrm{i}}{\lambda_1}\right)^k = 0 (i = 2, \cdots, n)$
        - » $\frac{x_i^{(k+1)}}{x_i^{(k)}}$が絶対値が最大の固有値$\lambda_1$に収束する

べき乗法の収束

- 固有値ベクトル近似値の変化
  - $|\lambda_1| > |\lambda_2|$および$C_1 \neq 0$に対して
    - $\lim_{k\to\infty} \frac{X^{(k)}}{{\lambda_1}^k} = \lim_{k\to\infty} \left\{ C_1 U_1 + C_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k U_2 + \cdots + C_n \left(\frac{\lambda_\mathrm{n}}{\lambda_1}\right)^k U_n \right\} = C_1 U_1$
    - $\frac{X^{(k)}}{{\lambda_1}^k}$が固有値$\lambda_1$の固有ベクトル$U_1$に収束する
    - 固有値λ_1の固有ベクトル（大きさを1に規格化）
      - $\frac{X^{(k)}}{|X^{(k)}|} = \frac{X^{(k)}}{\sqrt{\{{x_1}^{(k)}\}^2 + \{{x_2}^{(k)}\}^2 + \cdots + \{{x_n}^{(k)}\}^2}}$

べき乗法の収束

- レイリー商の収束
  - $$\lim_{k\to\infty}\frac{X^{(k)}\cdot X^{(k+1)}}{X^{(k)}\cdot X^{(k)}}=\lim_{k\to\infty}\frac{\lambda_1{}^k\left\{C_1U_1+C_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^kU_2+\cdots+C_n\left(\frac{\lambda_\mathrm{n}}{\lambda_1}\right)^kU_n\right\}\cdot\lambda_1{}^{k+1}\left\{C_1U_1+C_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{k+1}U_2+\cdots+C_n\left(\frac{\lambda_\mathrm{n}}{\lambda_1}\right)^{k+1}U_n\right\}}{\lambda_1{}^k\left\{C_1U_1+C_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^kU_2+\cdots+C_n\left(\frac{\lambda_\mathrm{n}}{\lambda_1}\right)^kU_n\right\}\cdot\lambda_1{}^k\left\{C_1U_1+C_2\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^kU_2+\cdots+C_n\left(\frac{\lambda_\mathrm{n}}{\lambda_1}\right)^kU_n\right\}}$$

$$C_\mathrm{i}\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^kU_i\cdot C_j\left(\frac{\lambda_\mathrm{j}}{\lambda_1}\right)^kU_j\to0$$

$$=\lambda_1$$

  - 収束値をもって固有値とする $\lambda_1\cong\frac{X^{(k)}\cdot X^{(k+1)}}{X^{(k)}\cdot X^{(k)}}=\frac{\sum_{i=1}^n x_i{}^{(k)}x_i{}^{(k+1)}}{\sum_{i=1}^n\left\{x_i{}^{(k)}\right\}^2}$

べき乗法の収束

- 最大固有値が重根・複素共役根($|\lambda_1| = |\lambda_2|$)の場合
  - $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3|$の場合，十分大きい$k$に対して
    - $X^{(k)} = C_1{\lambda_1}^k U_1 + C_2{\lambda_2}^k U_2 + \cdots + C_n{\lambda_\mathrm{n}}^k U_n$
      $\cong C_1{\lambda_1}^k U_1 + C_2{\lambda_2}^k U_2$
    - $X^{(k+1)} \cong C_1{\lambda_1}^{k+1} U_1 + C_2{\lambda_2}^{k+1} U_2$
    - $X^{(k+2)} \cong C_1{\lambda_1}^{k+2} U_1 + C_2{\lambda_2}^{k+2} U_2$
      - $X^{(k+1)} - \lambda_1 X^{(k)} = \left[C_1{\lambda_1}^{k+1} U_1 + C_2{\lambda_2}^{k+1} U_2\right] - \left[C_1{\lambda_1}^k U_1 + C_2{\lambda_2}^k U_2\right]$
        $= C_2{\lambda_2}^{k+1} U_2 - C_2\lambda_1{\lambda_2}^k U_2$
        - » $C_2{\lambda_2}^k U_2 = \frac{X^{(k+1)} - \lambda_1 X^{(k)}}{\lambda_2 - \lambda_1}$
      - $X^{(k+1)} - \lambda_2 X^{(k)} = C_1{\lambda_1}^{k+1} U_1 - C_1{\lambda_1}^k \lambda_2 U_1$
        - » $C_1{\lambda_1}^k U_1 = \frac{X^{(k+1)} - \lambda_2 X^{(k)}}{\lambda_1 - \lambda_2}$
      - $X^{(k+2)} = \frac{X^{(k+1)} - \lambda_2 X^{(k)}}{\lambda_1 - \lambda_2}{\lambda_1}^2 + \frac{X^{(k+1)} - \lambda_1 X^{(k)}}{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_2}^2$

べき乗法の収束

- $X^{(k+2)} = \frac{{\lambda_1}^2 - {\lambda_2}^2}{\lambda_1 - \lambda_2} X^{(k+1)} + \frac{\lambda_1 {\lambda_2}^2 - \lambda_2 {\lambda_1}^2}{\lambda_1 - \lambda_2} X^{(k)}$
  $= (\lambda_1 + \lambda_2) X^{(k+1)} - \lambda_1 \lambda_2 X^{(k)}$
- $X^{(k+2)} - (\lambda_1 + \lambda_2) X^{(k+1)} + \lambda_1 \lambda_2 X^{(k)} = 0$
  - $X^{(k+2)} + a X^{(k+1)} + b X^{(k)} = 0$
    - » $\lambda_1 + \lambda_2 = -a, \lambda_1 \lambda_2 = b$
    - » $\lambda^2 + a\lambda + b = 0$より$\lambda_1, \lambda_2$を求める

- $|\lambda_1| = |\lambda_2| = \cdots = |\lambda_\mathrm{m}| > |\lambda_{m+1}| > \cdots$の場合
  - $X^{(k+m)} + a_1 X^{(k+m-1)} + \cdots + a_m X^{(k)} = 0$より
    - 大きい方からm個の固有値をm次方程式の解として得る
      - $\lambda^m + a_1 \lambda^{m-1} + \cdots + a_{m-1} \lambda + a_m = 0$