

数値解析
第八回 固有値
ハウスホルダー変換

舟木 剛

平成26年11月19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

行列の相似変換の性質

- 正則な n 次正方行列 P
 - $PX = PA = I$ となる X が存在
- 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 λ は不変
 - $\det(B - \lambda I) = \det(A - \lambda I)$

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

$$- A_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$- A_2 = B_2^{-1}A_1B_2 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & & \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & & \\ 0 & a_{42} & a_{43} & a_{43} & 0 & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \\ 0 & a_{n2} & \cdots & & & a_{nn} \end{bmatrix}$$

相似変換を用いて
逐次0要素にする

$$- A_{n-2} = B_{n-2}^{-1}A_{n-3}B_{n-2} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & \cdots & & & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & & & & \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & & & & \vdots \\ \vdots & 0 & a_{44} & a_{44} & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & & a_{54} & \ddots & \ddots & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & a_{n-2,n-1} & 0 \\ 0 & \cdots & & & & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ & & & & & 0 & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix}$$

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

- 相似変換行列 B_i を直交行列とする

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

- 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, $U^T U = u_1^2 + u_2^2 + \dots + u_n^2 = 1$

- $U U^T$ は対称行列

$$U U^T = \begin{bmatrix} u_1^2 & u_1 u_2 & \cdots & u_1 u_n \\ u_2 u_1 & u_2^2 & & u_2 u_n \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ u_n u_1 & u_n u_2 & \cdots & u_n^2 \end{bmatrix}$$

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 次元列ベクトル U で構成する

- $B = I - 2UU^T$

- 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

- 行列 A の相似変換

- $A' = B^{-1}AB = BAB$

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

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

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

ハウスホルダー(相似)変換行列

- $AB = A(I - 2UU^T) = A - 2AUU^T$

- $P = AU = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix}$ とする

- $AB = A - 2PU^T = A - 2 \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix} [0, u_2, \dots, u_n]$

この行はP1のみ使用

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} - 2p_1u_2 & a_{13} - 2p_1u_3 & \cdots & a_{1n} - 2p_1u_n \\ a_{21} & a_{22} - 2p_2u_2 & a_{23} - 2p_2u_3 & \cdots & a_{2n} - 2p_2u_n \\ a_{31} & a_{32} - 2p_3u_2 & a_{33} - 2p_3u_3 & \cdots & a_{3n} - 2p_3u_n \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} - 2p_nu_2 & a_{n3} - 2p_nu_3 & \cdots & a_{nn} - 2p_nu_n \end{bmatrix}$$

←

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

$$a_{1i} = 2p_1u_i$$

ハウスホルダー(相似)変換行列

p_1 を求める

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

- p_1 を求める

- $(AB)(AB)^T =$

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

– 1行1列目要素 $a'_{11}{}^2 + a'_{12}{}^2 = a_{11}{}^2 + (a_{12} - 2p_1 u_2)^2$

- 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
 - $a_{11}^2 + (a_{12} - 2p_1u_2)^2 = a_{11}^2 + a_{12}^2 + \dots + a_{1n}^2$
 - $(a_{12} - 2p_1u_2)^2 = a_{12}^2 + \dots + a_{1n}^2$
- $a_{1i} - 2p_1u_i = 0 \quad (i = 3, 4, \dots, n)$ より
 - $a_{1i} = 2p_1u_i$ を $a_{12}^2 + \dots + a_{1n}^2$ に適用
 - $a_{12}^2 + \dots + a_{1n}^2 = a_{12}^2 + \sum_{i=3}^n a_{1i}^2$
 $= a_{12}^2 + \sum_{i=3}^n (2p_1u_i)^2 = a_{12}^2 + 4p_1^2 \sum_{i=3}^n u_i^2$

ハウスホルダー(相似)変換行列

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

ハウスホルダー(相似)変換行列

u_2 を求める

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

ハウスホルダー(相似)変換行列

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

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

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

u_i を求める

$$\bullet \quad a_{1i} - 2p_1u_i = 0 \quad (i = 3, 4, \dots, n) \text{より}$$

$$- \quad u_i = \frac{a_{1i}}{2p_1} = \frac{a_{1i}}{2 \frac{a_{12}u_2}{2u_2^2-1}} = \frac{a_{1i}(2u_2^2-1)}{2a_{12}u_2} = \frac{a_{1i}(2u_2^2-1)}{2a_{12}u_2} \quad (i = 3, 4, \dots, n)$$

三重対角行列化

AB の結果を用いて $B^{-1}AB$ を求める

- $$\begin{aligned}
 A' &= B^{-1}AB = BAB \\
 &= (I - 2UU^T)A(I - 2UU^T) \\
 &= (A - 2UU^T A)(I - 2UU^T) \\
 &= A - 2UU^T A - 2AUU^T + 4UU^T AUU^T
 \end{aligned}$$

- $$- P = AU, A = A^T \text{ より } U^T A = U^T A^T = (AU)^T = P^T$$

- $$- A' = A - 2UP^T - 2PU^T + 4UU^T AUU^T$$

- $$- U = \begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \text{ より } UU^T = \begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} [0, u_2, \dots, u_n] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & u_2^2 & & u_2 u_n \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & u_n u_2 & \dots & u_n^2 \end{bmatrix}$$

- $$\bullet UU^T AUU^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22}'' & & a_{2n}'' \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}'' & \dots & a_{nn}'' \end{bmatrix} \quad \text{第4項}$$

三重対角行列化

$$\begin{aligned} \bullet \quad PU^T &= \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix} [0, u_2, \dots, u_n] \\ &= \begin{bmatrix} 0 & p_1 u_2 & p_1 u_3 & \cdots & p_1 u_n \\ 0 & p_2 u_2 & p_2 u_3 & \cdots & p_2 u_n \\ 0 & p_3 u_2 & p_3 u_3 & \cdots & p_3 u_n \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & p_n u_2 & p_n u_3 & \cdots & p_n u_n \end{bmatrix} \quad \text{第3項} \\ &- \quad \text{ここで } a_{1i} - 2p_1 u_i = 0 \quad (i = 3, 4, \dots, n) \end{aligned}$$

三重対角行列化

$$\begin{aligned} \bullet \quad UP^T &= \begin{bmatrix} 0 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} [p_1, p_2, \dots, p_n] \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ p_1 u_2 & p_2 u_2 & p_3 u_2 & \cdots & p_n u_2 \\ p_1 u_3 & p_2 u_3 & p_3 u_3 & \cdots & p_n u_3 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ p_1 u_n & p_2 u_n & p_3 u_n & \cdots & p_n u_n \end{bmatrix} \quad \text{第2項} \end{aligned}$$

– A は対称行列なので, $a_{i1} = a_{1i}$

$$\gg a_{i1} - 2p_1 u_i = a_{1i} - 2p_1 u_i = 0 \quad (i = 3, 4, \dots, n)$$

三重対角行列化

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

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

- $a'_{1i} = a_{1i} - 2p_1 u_i = 0 \quad (i = 3, \dots, n)$ 1行目の3列目以降が0

- $a'_{i1} = a_{i1} - 2p_1 u_i = 0 \quad (i = 3, \dots, n)$ 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

- 固有値を求めることができる