数値解析
第七回　固有値
ハウスホルダー法①
実対称行列の変換と固有値

舟木　剛

平成29年11月14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

ハウスホルダー法による固有値求解

- 実対称行列Aの固有値と固有ベクトル
  - 実対称行列$A^T = A$
  - 回路方程式等，実対称行列は多い
  - 求解過程
    - 実対称行列の三重対角行列化
      - 相似変換
        - ハウスホルダー変換の適用
    - 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
  - $(kA)^* = \bar{k}A^*$
  - $(A+B)^* = A^* + B^*$
  - $(A^*)^* = A$
  - $(AB)^* = B^*A^*$

共役転置行列$(\bar{A})^{\mathrm{T}} = A$

- 直交行列Aの性質
  - $A^{\mathrm{T}}A = AA^{\mathrm{T}} = \mathrm{I}$
  - $A^{\mathrm{T}} = A^{-1}$
  - $\det(I) = \det\left(A^{\mathrm{T}}A\right) = \det\left(A^{\mathrm{T}}\right)\det(A) = \det(A)^2 = 1$

実対称行列の固有値

- 実対称行列$A = A^*$
  - 固有値λ, 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$A = A^*$より
      - $X^*AX = X^*A^*X = (X^*A^*)X = (AX)^*X = (\lambda X)^*X = \bar{\lambda}X^*X$
      - $\bar{\lambda}X^*X = \lambda X^*X$となる
        - $X^*X \neq 0$より$\lambda = \bar{\lambda}$となるので$\mathrm{Im}(\lambda) = 0$
        - 実対称行列の固有値λは**実数** ➡ 重要な性質

行列の相似変換と固有値

正則:逆行列がある

- 正則なn次正方行列P
  - $PX = I$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
  - $\det(B - \lambda I) = \det(P^{-1}AP - \lambda P^{-1}P)$
    $= \det(P^{-1}AP - \lambda P^{-1}IP)$
    $= \det(P^{-1}\{A - \lambda I\}P)$
    $= \det(P^{-1})\det(A - \lambda I)\det(P)$
    $= \dfrac{1}{\det(P)}\det(A - \lambda I)\det(P) = \det(A - \lambda I)$

行列の相似変換と固有ベクトル

- Pで相似変換した行列Aの固有値λの固有ベクトルX（固有値は不変）
  - 元の行列Aの固有ベクトルX　　$AX = \lambda X$
  - 変換した行列Bの固有ベクトルX'　　$BX' = \lambda X'$
    - $BX' = P^{-1}APX' = \lambda X'$
    - 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
        - $X = PX'$
        - 元の行列の固有ベクトルが求まる

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)
  - $a_{i,i+1} = a_{i+1,i} = b_i \quad (i = 1,2,\cdots,n-1)$
  - $a_{i,j} = 0 \qquad (i = 1,\cdots,n\,, j = 1,\cdots,i-2,i+2,\cdots,n)$
- 実対称行列を<u>ハウスホルダー変換</u>して求める　次回
  - 相似変換(直交変換)なので固有値は不変

三重対角行列の固有値

ハウスホルダー変換は後回しにして，とりあえず三重対角行列が得られたとする

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

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

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

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

三重対角行列の固有値

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

$n-1 \times n-1$の三重対角行列

$n-2 \times n-2$の三重対角行列

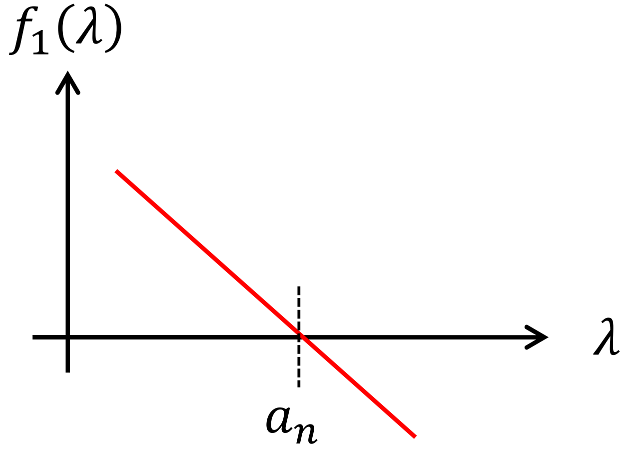
$$= (a_1-\lambda)\begin{vmatrix} a_2-\lambda & b_2 & & 0 \\ b_2 & a_3-\lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n-\lambda \end{vmatrix} - {b_1}^2 \begin{vmatrix} a_3-\lambda & b_3 & & 0 \\ b_3 & a_4-\lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n-\lambda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

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

遡る

三重対角行列の固有値

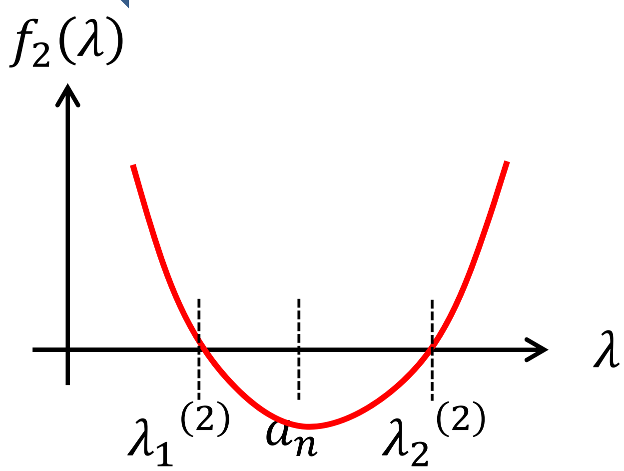
- 三重対角行列Aの固有値の性質
  - $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \cdots \neq \lambda_\mathrm{n}$（相異なる実解）となる
- 漸化式の性質
  - $f_1(\lambda) = a_n - \lambda = 0$の解
    - $\lambda = a_n$
      - $\lambda < a_n$に対して$f_1(\lambda) > 0$
      - $a_n < \lambda$に対して$f_1(\lambda) < 0$



三重対角行列の固有値

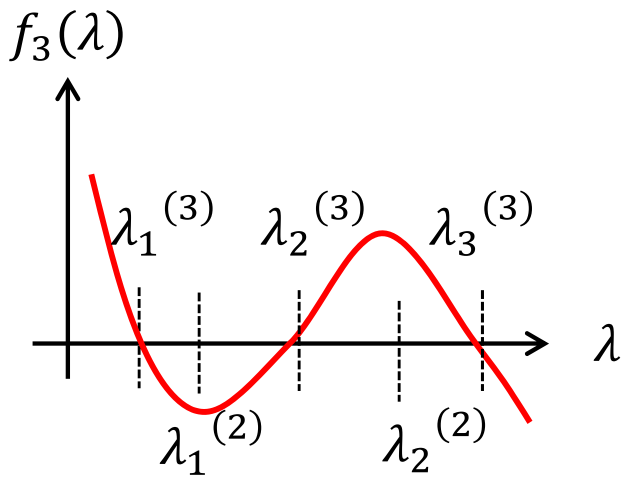
- $f_2(\lambda) = (a_{n-1} - \lambda)f_1(\lambda) - {b_{n-1}}^2 f_0(\lambda)$
  - $\lambda \to -\infty$に対して$\lim_{\lambda\to-\infty} f_2(\lambda) > 0$
    - $a_{n-1} - \lambda > 0, f_1(\lambda) > 0, f_0(\lambda) = 1$
  - $\lambda = a_n$に対して$f_2(\lambda) < 0$
    - $a_{n-1} - \lambda =?, f_1(\lambda) = 0, f_0(\lambda) = 1$
  - $\lambda \to +\infty$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
      - ${\lambda_1}^{(2)} < a_n$
      - ${\lambda_2}^{(2)} > a_n$

極値をとる



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

$$f_n(x) = c_n x^n + c_{n-1} x^{n-1} + \cdots + c_0$$

  - 区間$[a, b]$にある$f_n(x) = 0$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$w(\lambda)$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

固有値の存在する端を決める
∞では探せない

- 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
  - $\|A\| \geq \rho(A)$
    - $\|A\|$を$\|A\|_\infty$とすると，$-\|A\|_\infty \leq \lambda_i \leq \|A\|_\infty \ (i = 1, \cdots, n)$
      →固有値の存在する範囲

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）
  5. 固有値が求まった