固有値解析

中島 研吾
東京大学情報基盤センター
同　大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻
数値解析（科目番号 500080）

- 行列の固有値問題
- べき乗法
- 対称行列の固有値計算法

行列の固有値問題

標準固有値問題(Standard Eigenvalue Problem

$$\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$$

を満足する λ と $\mathbf{x}$ を求める

– λ : 固有値(eigenvalue)
– $\mathbf{x}$: 固有ベクトル(eigenvector)

一般固有値問題(General Eigenvalue Problem)

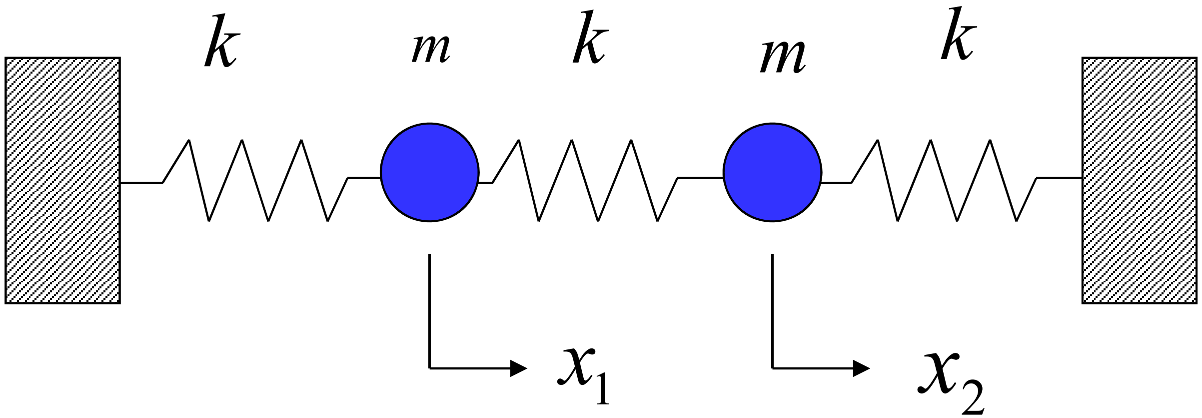
$$\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{Mx}, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$$

ここでは標準固有値問題を扱う

固有値

- **固有振動数**
- **行列の性質に影響:スペクトル半径, 条件数**

固有値問題の例(1/3)



運動方程式

$$kx_1 + k(x_1 - x_2) = -m\ddot{x}_1$$

$$k(x_2 - x_1) + kx_2 = -m\ddot{x}_2$$

$$\frac{d}{dt^2}\mathbf{x} = \begin{bmatrix} -2k/m & k/m \\ k/m & -2k/m \end{bmatrix}\mathbf{x} \qquad \mathbf{x} \equiv \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix}$$

固有値問題の例(2/3)

$$\frac{d}{dt^2}\mathbf{x} = -\begin{bmatrix} 2k/m & -k/m \\ -k/m & 2k/m \end{bmatrix}\mathbf{x}$$

$$\mathbf{A} \equiv \begin{bmatrix} 2k/m & -k/m \\ -k/m & 2k/m \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} \equiv \mathbf{a}e^{j\omega t}$$ 振動的な解を仮定

$$\mathbf{A}\mathbf{a} = \omega^2\mathbf{a}$$ ω(固有円振動数)

固有値問題の例（3/3）

固有振動数(Natural Frequency)

（構造物などの）力学システムには，固有振動数が存在する.

固有振動数あるいは，それに近い周波数で
力学システムを加振すると，システムは共振を起す.

↓

共振したシステムは，非常に大きな変位，ひずみ，応力を
生じて，システムが崩壊，破損する！

↓

共振を避けたり，抑制したりする設計が必要
（耐震設計・免振設計など）

固有値問題の計算(1/3)

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}$$ の固有値・固有ベクトルを求めよ.

$$\mathbf{A}\mathbf{x}=\lambda\mathbf{x},\quad \mathbf{x}\neq\mathbf{0} \quad\rightarrow\quad [\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}]\cdot\mathbf{x}=\mathbf{0},\quad \mathbf{x}\neq\mathbf{0}$$

特性方程式 $\therefore\quad \det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})=0$

特性方程式=0

$$\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})=\begin{vmatrix}1-\lambda & -1\\ -1 & 2-\lambda\end{vmatrix}=\lambda^2-3\lambda+1=0$$

$$\lambda=\frac{3\pm\sqrt{5}}{2}\quad\longrightarrow\quad \lambda_1=\frac{3+\sqrt{5}}{2},\lambda_2=\frac{3-\sqrt{5}}{2}$$

固有値問題の計算(2/3)

$\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$ より

$$x_1 - x_2 = \lambda x_1$$
$$-x_1 + 2x_2 = \lambda x_2$$

→ この連立方程式は、必ず不定

したがって, x_1,x_2のどちらか一方を定数をおく.

たとえば $x_1=c_1$とおけば $x_2=(1-\lambda)c_1$

固有ベクトル:

$$\lambda = \lambda_1 \to \mathbf{x} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{-1-\sqrt{5}}{2} \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -2.7 \end{pmatrix}$$

$$\lambda = \lambda_2 \to \mathbf{x} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{-1+\sqrt{5}}{2} \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0.62 \end{pmatrix}$$

固有値問題の計算例(3/3)

一般のn元の正方行列Aの固有値，固有ベクトルは，前述したような方法で求めることができる

特性方程式は固有値λについてのn次の代数方程式(非線形)

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0$$

大規模な次元($>10^6$)を有する行列の固有値問題も扱える方法が開発されている：実に様々な解法がある

実用上重要なのは(絶対値)最大・最小固有値
重根があると特別な扱い必要
- 本講義では基本的に重根は無しとする

- 行列の固有値問題
- べき乗法
- 対称行列の固有値計算法

べき乗法（Power Method）

絶対値最大の実固有値と
それに対応する固有ベクトルを求める方法

適当な初期ベクトル $\mathbf{x}^{(0)}$ から始めて

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}^{(1)} &= \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)} \\
\mathbf{x}^{(2)} &= \mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)} \\
&\vdots \\
\mathbf{x}^{(k+1)} &= \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}
\end{aligned}
$$

Aをどんどん乗じていく
但し，単に乗じていくだけでは、
発散したり，原点に収束したり
してしまうので，常に $\mathbf{x}^{(k)}$の大きさを
一定（例えば=1）に保つ必要がある.

$\mathbf{x}^{(k)}$は絶対値最大の固有値に対応する固有ベクトルに収束していく

べき乗法のアルゴリズム

- **<u>Step 0</u>**: $\|\mathbf{x}^{(0)}\|_2=1$ である初期ベクトル $\mathbf{x}^{(0)}$ を選び，$k=0$ とする
- **<u>Step 1</u>**: 以下のように $\mathbf{x}^{(k+1)}$ を更新する:

$$\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}, \lambda = \left(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{y}^{(k)}\right) \Rightarrow \mathbf{x}^{(k+1)} = \frac{\mathbf{y}^{(k)}}{\left\|\mathbf{y}^{(k)}\right\|_2}$$

- **<u>Step 2:</u>** $k=k+1$ としてStep 1を繰り返す

λ :**A** の絶対値最大の実固有値に収束

$\mathbf{x}^{(k)}$:**A** の絶対値最大の実固有値に対応する固有ベクトルに収束

べき乗法が最大固有値に収束する理由(1/3)

$$\mathbf{y}^{(0)} = c_1\mathbf{x}_1 + c_2\mathbf{x}_2 + c_3\mathbf{x}_3 + \cdots + c_n\mathbf{x}_n$$

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$$ 固有値(絶対値の大きさ順)

$$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \cdots, \mathbf{x}_n$$ それに対応する固有ベクトル
(一次独立と仮定)

$$\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{A}\mathbf{y}^{(0)} = \lambda_1 c_1\mathbf{x}_1 + \lambda_2 c_2\mathbf{x}_2 + \lambda_3 c_3\mathbf{x}_3 + \cdots + \lambda_n c_n\mathbf{x}_n$$

$$\Downarrow$$

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{A}\mathbf{y}^{(k-1)} = \mathbf{A}^k\mathbf{y}^{(0)} = \lambda_1{}^k c'_1\,\mathbf{x}_1 + \lambda_2{}^k c'_2\,\mathbf{x}_2 + \lambda_3{}^k c'_3\,\mathbf{x}_3 + \cdots + \lambda_n{}^k c'_n\,\mathbf{x}_n$$

べき乗法が最大固有値に収束する理由(2/3)

$$if \quad c'_1 \neq 0$$

$$\mathbf{y}^{(k)} = \lambda_1{}^k c'_1 \cdot \left\{ \mathbf{x}_1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k \frac{c'_2}{c'_1}\mathbf{x}_2 + \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^k \frac{c'_3}{c'_1}\mathbf{x}_3 + \cdots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k \frac{c'_n}{c'_1}\mathbf{x}_n \right\}$$

$$\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right| < 1 \left(i = 2,3,\cdots,n\right) \Rightarrow \lim_{k\to\infty}\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k = 0$$

$$\therefore \quad if\ k \to \infty : \mathbf{y}^{(k)} = \lambda_1{}^k c'_1\, \mathbf{x}_1$$

べき乗法によって求められるベクトル$\mathbf{x}^{(k)}$の「方向」が最大固有値 λ_1 に対応する固有ベクトル $\mathbf{x}_1$ のそれに収束していく

べき乗法が最大固有値に収束する理由(3/3)

$$\mathbf{y}^{(k-1)} = \lambda_1^{\;k-1} c'_1\, \mathbf{x}_1 \Rightarrow \mathbf{x}^{(k)} = \frac{\mathbf{y}^{(k-1)}}{\left\|\mathbf{y}^{(k-1)}\right\|_2} = \lambda_1^{\;k-1} c'_1\, \mathbf{x}_1 \cdot \frac{1}{\left\|\mathbf{y}^{(k-1)}\right\|_2}$$

$$\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}^{(k)} = \lambda_1^{\;k} c'_1\, \mathbf{x}_1 \cdot \frac{1}{\left\|\mathbf{y}^{(k-1)}\right\|_2}$$

$$\frac{\left(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{y}^{(k)}\right)}{\left(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{x}^{(k)}\right)} = \frac{\left(\left(\lambda_1^{\;k-1} c'_1\, \mathbf{x}_1 \cdot \frac{1}{\left\|\mathbf{y}^{(k-1)}\right\|_2}\right), \left(\lambda_1^{\;k} c'_1\, \mathbf{x}_1 \cdot \frac{1}{\left\|\mathbf{y}^{(k-1)}\right\|_2}\right)\right)}{\left(\left(\lambda_1^{\;k-1} c'_1\, \mathbf{x}_1 \cdot \frac{1}{\left\|\mathbf{y}^{(k-1)}\right\|_2}\right), \left(\lambda_1^{\;k-1} c'_1\, \mathbf{x}_1 \cdot \frac{1}{\left\|\mathbf{y}^{(k-1)}\right\|_2}\right)\right)} = \lambda_1$$

$$\frac{\left(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{y}^{(k)},\right)}{\left(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{x}^{(k)}\right)} = \left(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{y}^{(k)}\right) = \lambda_1 \quad \because \left(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{x}^{(k)}\right) = 1$$

べき乗法の収束

$$\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right| < 1 \left(i = 2,3,\cdots,n\right) \Rightarrow \lim_{k\to\infty}\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k = 0$$

$|\lambda_i/\lambda_1|$が1より充分小さいことが収束に影響，特に以下の成立が高速な収束に必要

$$\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right| << 1$$

べき乗法の例(1/3)

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

の絶対値最大の固有値およびその固有ベクトルをべき乗法により求めよ.

1回目

$$\mathbf{x}^{(0)} = \{1,0\}, \quad \mathbf{y}^{(0)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)} = \{1,-1\}$$

$$\mathbf{x}^{(1)} = \frac{1}{\left\|\mathbf{y}^{(0)}\right\|_2}\{1,-1\} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{1,-1\}$$

$$\left(\mathbf{x}^{(0)}, \mathbf{y}^{(0)}\right) = (\{1 \quad 0\}, \{1,-1\}) = 1$$

べき乗法の例(2/3)

2回目

$$\mathbf{x}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{1,-1\}, \quad \mathbf{y}^{(1)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{2,-3\}$$

$$\mathbf{x}^{(2)} = \frac{1}{\left\|\mathbf{y}^{(1)}\right\|_2}\frac{1}{\sqrt{2}}\{2,-3\} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{13}}\frac{1}{\sqrt{2}}\{2,-3\} = \frac{1}{\sqrt{13}}\{2,-3\}$$

$$\left(\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{y}^{(1)}\right) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\{1 \quad -1\}, \frac{1}{\sqrt{2}}\{2,-3\}\right) = \frac{5}{2} = 2.500$$

べき乗法の例（3/3）

3回目

$$\mathbf{x}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{13}}\{2,-3\}, \quad \mathbf{y}^{(2)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{13}}\{5,-8\}$$

$$\mathbf{x}^{(3)} = \frac{1}{\left\|\mathbf{y}^{(2)}\right\|_2}\frac{1}{\sqrt{13}}\{5,-8\} = \frac{\sqrt{13}}{\sqrt{89}}\frac{1}{\sqrt{13}}\{5,-8\} = \frac{1}{\sqrt{89}}\{5,-8\}$$

$$\left(\mathbf{x}^{(2)}, \mathbf{y}^{(2)}\right) = \left(\frac{1}{\sqrt{13}}\{2 \quad -3\}, \frac{1}{\sqrt{13}}\{5,-8\}\right) = \frac{34}{13} = 2.6153$$

前述した厳密解

$$\lambda_1 = \frac{3+\sqrt{5}}{2} = 2.618034$$

逆べき乗法

絶対値「最小」の実固有値と
それに対応する固有ベクトルを求める方法

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \Rightarrow \mathbf{A}^{-1}\mathbf{x} = \lambda^{-1}\mathbf{x}$$

$\mathbf{A}' = \mathbf{A}^{-1}, \lambda' = \lambda^{-1}$ として $\mathbf{A}'\mathbf{x} = \lambda'\mathbf{x}$ にべき乗法を適用する

$\mathbf{LU} = \mathbf{A}$ としてLU分解を求めておくと効率が良い

べき乗法の加速手法：原点移動（Shift）

$|\lambda_2/\lambda_1|$の値を小さくすることにより収束を加速する

$$\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}, \quad \mathbf{B} = \mathbf{A} - p\mathbf{I} \ \textit{where}\ p : \mathrm{constant}$$

$$\mathbf{Ax} = (\mathbf{B} + p\mathbf{I})\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

$$\mathbf{Bx} = \lambda\mathbf{x} - p\mathbf{Ix} = (\lambda - p)\mathbf{x}$$

$(\lambda - p)$: 行列Bの固有値（λ: 行列Aの固有値）

$\mathbf{x}$: 行列Bの固有ベクトル（Aの固有ベクトルに一致）

適当な定数pを選択することにより行列Bの絶対値最大／2番目に大きな固有値の比を小さくできれば，行列Bにべき乗法を適用した方が良い

$$\frac{|\lambda_2 - p|}{|\lambda_1 - p|} < \frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}$$

行列Bの固有値　行列A

原点移動の効果

下記の条件においてAの絶対値最大の固有値およびその固有ベクトルをべき乗法，原点移動付きべき乗法により求めよ.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}^{(0)} = \{1, 0\}, \quad p = 0.40$$

	原点移動無し	原点移動有り
1	1.000000E+00	1.000000E+00
2	2.500000E+00	2.617647E+00
3	2.615385E+00	2.618034E+00
4	2.617978E+00	
5	2.618033E+00	
6	2.618034E+00	

べき乗法・原点移動付きべき乗法の例

べき乗法

```
do iter= 1, 10
  Y(1)= A(1,1)*X(1) + A(1,2)*X(2)
  Y(2)= A(2,1)*X(1) + A(2,2)*X(2)

  EIGEN= X(1)*Y(1) + X(2)*Y(2)

  DL= dsqrt(Y(1)**2+Y(2)**2)
  X(1)= Y(1)/DL
  X(2)= Y(2)/DL
enddo
```

原点移動付きべき乗法

```
X(1)= 1.d0; X(2)= 0.d0
A(1,1)= A(1,1) - SHIFT
A(2,2)= A(2,2) - SHIFT

do iter= 1, 10
  Y(1)= A(1,1)*X(1) + A(1,2)*X(2)
  Y(2)= A(2,1)*X(1) + A(2,2)*X(2)

  EIGEN= X(1)*Y(1) + X(2)*Y(2) + SHIFT

  DL= dsqrt(Y(1)**2+Y(2)**2)
  X(1)= Y(1)/DL
  X(2)= Y(2)/DL
enddo
```

- 行列の固有値問題
- べき乗法
- 対称行列の固有値計算法

対称行列の固有値計算法

- 実対称行列の固有値⇒実数
- 弾性振動問題などで工学的に重要な実対称行列の固有値計算法として代表的な手法について紹介する:
  - ハウスホルダ変換(Householder)による三重対角化(tridiagonalization)
  - 二分法(Bi-Section)による固有値計算
  - 逆反復法による固有ベクトル計算

相似変換（Similar Transformation）

- N×Nの正方行列**A**, **B**に対して以下を満たすような正則行列Pが存在するとする:

$$\mathbf{B} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\ \mathbf{P}$$

- このとき**A**と**B**は相似（similar）であると呼び，Bは**A**を相似変換した行列であると言う。

- **A**と**B**が相似であればそれらの固有値は一致する
- 任意の固有値に対する**B**の固有ベクトルを **x** とすると，**A** の固有ベクトルは **Px** となる

Householder変換：三重対角化（1/6）

N次のベクトル$\mathbf{x},\mathbf{y}$に対して以下の行列$\mathbf{Q}$を定義するとき，行列$\mathbf{Q}$による相似変換をハウスホルダー変換（Householder）と呼ぶ：

$$\mathbf{Q} = \mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T, \mathbf{u} = \frac{\mathbf{x}-\mathbf{y}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \Rightarrow \mathbf{u}\mathbf{u}^T = 1$$

変換行列$\mathbf{Q}$は対称かつ直交：

$$\mathbf{Q}^T = \left(\mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T\right)^T = \mathbf{I}^T - 2\left(\mathbf{u}\mathbf{u}^T\right)^T = \mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T = \mathbf{Q}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{Q}^T\mathbf{Q} = \mathbf{Q}\mathbf{Q} &= \left(\mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T\right)\left(\mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T\right) \\ &= \mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T + 4\mathbf{u}\left(\mathbf{u}\mathbf{u}^T\right)\mathbf{u}^T = \mathbf{I}\end{aligned}$$

Householder変換:三重対角化(2/6)

以下に示す対称行列**A**を**Q**によって三重対角化する:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{k1} & \cdots & a_{n1} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{k2} & \cdots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} & \cdots & a_{nk} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nk} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \Rightarrow \tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}$$

Householder変換：三重対角化（3/6）

N次のベクトル $\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{u}$ を以下のように置く：

$$\mathbf{x}=\begin{Bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{Bmatrix},\ \mathbf{y}=\begin{Bmatrix} a_{11} \\ -s_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{Bmatrix} \Rightarrow \mathbf{x}-\mathbf{y}=\begin{Bmatrix} 0 \\ a_{21}+s \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{Bmatrix},\ \mathbf{u}=\begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_n \end{Bmatrix}=\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}\begin{Bmatrix} 0 \\ a_{21}+s \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{Bmatrix}$$

$$|\mathbf{x}-\mathbf{y}|=\sqrt{(a_{21}+s)^2+a_{31}{}^2+\cdots+a_{n1}{}^2}$$

Householder変換：三重対角化（4/6）

変換行列 $\mathbf{Q}_1$ を以下のように置く：

$$\mathbf{Q}_1=\mathbf{I}-2\mathbf{u}\mathbf{u}^T=\begin{bmatrix}1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 1-2{u_2}^2 & \cdots & -2u_2u_k & \cdots & -2u_2u_n\\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots\\ 0 & -2u_ku_2 & \cdots & 1-2{u_k}^2 & \cdots & -2u_ku_n\\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots\\ 0 & -2u_nu_2 & \cdots & -2u_nu_k & \cdots & 1-2{u_n}^2\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{y}=\mathbf{Q}_1\mathbf{x}=\begin{bmatrix}1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 1-2{u_2}^2 & \cdots & -2u_2u_k & \cdots & -2u_2u_n\\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots\\ 0 & -2u_ku_2 & \cdots & 1-2{u_k}^2 & \cdots & -2u_ku_n\\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots\\ 0 & -2u_nu_2 & \cdots & -2u_nu_k & \cdots & 1-2{u_n}^2\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}a_{11}\\ a_{21}\\ a_{31}\\ \vdots\\ a_{n1}\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix}a_{11}\\ -s_1\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{Bmatrix}$$

Householder変換：三重対角化（5/6）

$$\mathbf{B} \equiv \mathbf{Q}_1^{-1}\mathbf{A}\mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & -s_1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ -s_1 & a'_{22} & \cdots & a'_{k2} & \cdots & a'_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & a'_{k2} & \cdots & a'_{kk} & \cdots & a'_{nk} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & a'_{n2} & \cdots & a'_{nk} & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix}$$

s_1は以下のようにとられる。桁落ちを防ぐため，a_{21} とs_1の符号は同じになるようにする：

$$s_1 = -\mathrm{sign}(a_{21})\left(a_{21}{}^2 + a_{21}{}^2 + \cdots + a_{n-1,1}{}^2 + a_{n1}{}^2 = \sum_{i=2}^{n} a_{i1}{}^2 \right)$$

Householder変換：三重対角化(6/6)

この操作を(n-2)回繰り返すことによって行列$\mathbf{A}$は三重対角行列$\tilde{\mathbf{A}}$に変換可能される

$$\mathbf{B} \equiv \mathbf{Q}_1^{-1}\mathbf{A}\mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & -s_1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ -s_1 & a'_{22} & \cdots & a'_{k2} & \cdots & a'_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & a'_{k2} & \cdots & a'_{kk} & \cdots & a'_{nk} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & a'_{n2} & \cdots & a'_{nk} & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix}$$

新たな$\mathbf{A}$とする

Householder変換：非対称行列の場合

三重対角行列ではなく，下記に示すような上ヘッセンベルク行列（Hessenberg）となる

$$
\widetilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} * & * & * & \cdots & * & * \\ * & * & * & \ddots & * & * \\ 0 & * & * & * & \ddots & * \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & * & * \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & * & * \end{bmatrix}
$$

スツルム列（Sturm Chain/Sequence）

実区間$[a,b]$において，実係数を持つ多項式$f(x)$が与えられた場合，以下の4条件を満たす実係数多項式の列

$$f(x), f_1(x), f_2(x), f_3(x), \ldots, f_l(x)$$

は実区間$[a,b]$においてスツルム列をなすという。但し$f_0(x)=f(x)$

① 実区間$[a,b]$内の全ての点xに対して，隣り合う2つの多項式$f_k(x), f_{k+1}(x)$は同時に0とならない

② 実区間$[a,b]$内のある点x_0で$f_k(x_0)=0$ ならば,$f_{k-1}(x_0)\, f_{k+1}(x_0)<0$

③ 列の最後の式$f_l(x)$は実区間$[a,b]$において一定の符号を持つ

④ ある点x_0で$f(x_0)=0$ ならば$f'(x_0)\, f_1(x_0)>0$である

スツルムの定理（Sturm’s Theorem）

- 多項式の列 $f(x), f_1(x), f_2(x), f_3(x), \ldots, f_l(x)$ が実区間$[a,b]$においてスツルム列をなし, $f(a)\,f(b)\neq 0$ とする
- xを固定して関数列 $f(x), f_1(x), f_2(x), f_3(x), \ldots, f_l(x)$ を左から右に見ていったときの符号の変化の回数を $N(x)$ とする
- 多項式 $f(x)$ の実区間$[a,b]$に存在する零点（解）の個数 n_0 は以下の式で与えられる（証明略）:

$$n_0 = N(a) - N(b)$$

二分法（1/4）

- 三重対角行列 $\tilde{\mathbf{A}}$ に対して行列 $\lambda\mathbf{I}-\tilde{\mathbf{A}}$ を考え，その第k主小行列を $p_k(\lambda)$ と置く:

$$p_k(\lambda)=\begin{vmatrix} \lambda-\alpha_1 & -\beta_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\beta_1 & \lambda-\alpha_2 & -\beta_2 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & -\beta_2 & \lambda-\alpha_3 & -\beta_3 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \lambda-\alpha_{k-1} & -\beta_{k-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\beta_{k-1} & \lambda-\alpha_k \end{vmatrix}$$

- これを最後の行に関して展開すると以下の漸化式を得る:

$$p_k(\lambda)=(\lambda-\alpha_k)p_{k-1}(\lambda)-\beta_{k-1}{}^2 p_{k-2}(\lambda)$$

- k=2について成立するように下記のように仮定しておく:

$$p_0(\lambda)=1$$

二分法(2/4)

- $k=n$ のとき以下のn次多項式の根が$\tilde{\mathbf{A}}$の固有値⇒$\mathbf{A}$の固有値:

$$p_n(\lambda)=\left|\lambda\mathbf{I}-\tilde{\mathbf{A}}\right|$$

- 上記多項式の以下の列はスツルム列を構成する(証明付録)

$$p_n(\lambda),\ p_{n-1}(\lambda),\ p_{n-2}(\lambda),\cdots,\ p_1(\lambda),\ p_0(\lambda)$$

- 対称行列の固有値は全て実数であり, 以下を仮定すると:

$$\lambda_1>\lambda_2>\lambda_3>\cdots>\lambda>\cdots>\lambda_n$$

- 実区間$[a,b]$に存在する零点(固有値)の個数 n_0 は:

$n_0=N(a)$ - $N(b)$, $n_0=1$なら実区間$[a,b]$に固有値が1個存在

- λより大きい固有値の個数は$N(\lambda)$
  - 証明略, スツルムの定理より導かれる

二分法(3/4)

- 二分法では，スツルムの定理を用いて行列の特性方程式の根の存在範囲を狭めて行くことで固有値の近似解を得る。
- ある適当な実定数$[a,b]$に関して，もしλ_k（k番目に大きい固有値）が区間$[a,b]$の間に存在するのであれば，以下が成立:

$$k \le N(a), \quad k > N(b)$$

- 区間$[a,b]$を半分に狭めるために2点の中点$c = \dfrac{a+b}{2}$を考える。
- もしλ_kが区間$[a,c]$に存在するならば，下記が成立する:

$$k \le N(a), \quad k > N(c)$$

そうでなければ，λ_kは区間$[c,b]$に存在する。

- λ_kの存在する区間を改めて$[a,b]$と設定し以上を繰り返す。
- 正の微少量εに対して$|a-b|<\varepsilon$ならば$\lambda_k = (a+b)/2$として終了。

二分法(4/4)

- $[a,b]$の初期値は前述のゲルシュゴリンの定理(次頁)を使用して以下のように設定することができる:

$$r = \max_{1 \le i \le n}\left(\left|\beta_{i-1}\right| + \left|\alpha_i\right| + \left|\beta_i\right|\right), \quad \beta_0 = \beta_n = 0$$

$$a = -r, \quad b = r$$

- 予めbを固定して絞りこめば最大固有値を最初に求められる
  - $(k+1)$番目に大きい固有値は λ_k を上限値として繰り返し適用することで計算できる
- 逆にaを固定して絞りこめば最小固有値を最初に求めることができ, k番目に小さい固有値を下限として$(k+1)$番目に小さい固有値を求められる

ゲルシュゴリンの定理（Gershgorin）

中心がa_{ii}, 半径$r_i = \sum_{i \neq j} |a_{ij}|$の円で囲まれた複素平面内の領域を$S_i$

このとき，行列$\mathbf{A}(a_{ij})$の全ての固有値 λ_k は和集合 $\bigcup_{i=1}^{n} S_i$の内部に存在する。すなわち以下を満たす行番号iが存在：

$$|a_{ii} - \lambda_k| \leq \sum_{i \neq j} |a_{ij}|$$

（証明）

$\mathbf{x}$を $\mathbf{A}\mathbf{x}=\lambda_k\mathbf{x}$ を満たす$\mathbf{A}$の固有ベクトルとする。$\mathbf{x}$の絶対値最大の成分をx_iとするとき，$\mathbf{A}\mathbf{x}=\lambda_k\mathbf{x}$ の第i行を書き下すと以下を得る。

$$a_{ii} - \lambda_k = -\sum_{i \neq j} \left(a_{ij} \frac{x_j}{x_i} \right)$$

これから直ちに結論を得る。

逆反復法による固有ベクトル計算
Inverse Iteration

- 二分法によって求めた固有値をλ_kとすると適当な初期ベクトル$\mathbf{x}^{(0)}$について以下の方程式を解いていくと:

$$\left(\lambda_k \mathbf{I} - \mathbf{A}\right)\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} \quad \left(i = 0,1,2,\cdots\right)$$

- $k \Rightarrow \infty$のとき，$\mathbf{x}^{(i)}$は固有値λ_kの固有ベクトルに収束していくことが期待される。

計算例（1/2）

$$A=\begin{bmatrix}6&5&4&3&2&1\\5&5&4&3&2&1\\4&4&4&3&2&1\\3&3&3&3&2&1\\2&2&2&2&2&1\\1&1&1&1&1&1\end{bmatrix}\Rightarrow\begin{bmatrix}6.00&-7.42&0&0&0&0\\-7.42&12.2&1.25&0&2&0\\0&1.25&1.47&.318&0&0\\0&0&.318&.641&.117&0\\0&0&0&.117&.398&-.0416\\0&0&0&0&-.0416&.294\end{bmatrix}$$

計算例(2/2)

λ_1= 1.721E+01
{5.507E-01 5.187E-01 4.565E-01 3.678E-01 2.578E-01 1.327E-01}

λ_2= 1.988E+00
{5.187E-01 2.578E-01 -1.327E-01 -4.565E-01 -5.507E-01 -3.678E-01}

λ_3= 7.747E-01
{4.565E-01 -1.327E-01 -5.507E-01 -2.578E-01 3.678E-01 5.187E-01}

λ_4= 4.462E-01
{3.678E-01 -4.565E-01 -2.578E-01 5.187E-01 1.327E-01 -5.507E-01}

λ_5= 3.189E-01
{2.578E-01 -5.507E-01 3.678E-01 1.327E-01 -5.187E-01 4.565E-01}

λ_6= 2.652E-01
{1.327E-01 -3.678E-01 5.187E-01 -5.507E-01 4.565E-01 -2.578E-01}

本講義のまとめ

- スーパーコンピューティングへの招待
- 連立一次方程式の解法(直接法，反復法)
- 偏微分方程式の数値解法
- 固有値解法
- C言語によるプログラミング(入門編)
  - 基礎的な事項(様々な原理)の説明，証明

- 数学的な背景をしっかりと理解した上で自分でプログラムを作って動かして見ることが重要
- 色々なことにチャレンジしてほしい
  - 計算機を使いこなせること(数学的背景を理解した上でプログラムを作れること)は，チャレンジ可能性の幅を大きく広げることになる

スツルム列を構成することの証明（1/3）

$$p_n(\lambda), p_{n-1}(\lambda), p_{n-2}(\lambda), \cdots, p_1(\lambda), p_0(\lambda)$$

① 実区間内の全ての点λに対して，隣り合う2つの多項式 $p_k(\lambda)$, $p_{k+1}(\lambda)$は同時に0とならない

- もし $p_k(\lambda)=p_{k-1}(\lambda)=0$ が成立すると，下記漸化式より，$p_{k-2}(\lambda)=0$となる：

$$p_k(\lambda)=(\lambda-\alpha_k)p_{k-1}(\lambda)-\beta_{k-1}{}^2 p_{k-2}(\lambda)$$

- 従って，全ての j について$p_j(\lambda)=0$となってしまうため，下記よりこの仮定はあり得ない：

$$p_0(\lambda)=1$$

② 実区間内のある点λ_0で $p_k(\lambda_0)=0$ ならば，$p_{k-1}(\lambda_0)\, p_{k+1}(\lambda_0)<0$

$$p_{k+1}(\lambda)=(\lambda-\alpha_{k+1})p_k(\lambda)-\beta_k{}^2 p_{k-1}(\lambda)$$

$$\text{if } p_k(\lambda_0)=0 \Rightarrow p_{k+1}(\lambda_0)=-\beta_k{}^2 p_{k-1}(\lambda_0)$$

$$\therefore p_{k-1}(\lambda_0)p_{k+1}(\lambda_0)<0$$

スツルム列を構成することの証明（2/3）

$$p_n(\lambda), p_{n-1}(\lambda), p_{n-2}(\lambda), \cdots, p_1(\lambda), p_0(\lambda)$$

③ 列の最後の式 $p_0(\lambda)$は実区間において一定の符号を持つ

- これは下記より明らか：

$$p_0(\lambda) = 1$$

④ ある点λ_0で $p_n(\lambda_0)=0$ ならば $p_n'(\lambda_0)\, p_{n-1}(\lambda_0)>0$である

$$p_k(\lambda) = (\lambda - \alpha_k)p_{k-1}(\lambda) - \beta_{k-1}{}^2 p_{k-2}(\lambda)$$

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}(p_k(\lambda)) = p_k{}'(\lambda) = p_{k-1}(\lambda) + (\lambda - \alpha_k)p_{k-1}{}'(\lambda) - \beta_{k-1}{}^2 p_{k-2}{}'(\lambda)$$

$$\therefore p_k{}'(\lambda)p_{k-1}(\lambda) - p_k(\lambda)p_{k-1}{}'(\lambda)$$
$$= \beta_{k-1}{}^2\left\{p_{k-1}{}'(\lambda)p_{k-2}(\lambda) - p_{k-1}(\lambda)p_{k-2}{}'(\lambda)\right\} + p_{k-1}{}^2(\lambda) \qquad \text{(*1)}$$

スツルム列を構成することの証明(3/3)

$$p_n(\lambda),\ p_{n-1}(\lambda),\ p_{n-2}(\lambda),\cdots,\ p_1(\lambda),\ p_0(\lambda)$$

- ここで下記のように q_k を定義すると**(*1)**は**(*2)**のように表される:

$$q_k \equiv p_k{}'(\lambda)p_{k-1}(\lambda) - p_k(\lambda)p_{k-1}{}'(\lambda)$$

$$q_k(\lambda) = p_{k-1}{}^2(\lambda) + \beta_{k-1}{}^2 q_{k-1}(\lambda), \quad k = 2,3,\ldots,n \qquad \textbf{(*2)}$$

- ところで,以下が成立する:

$$q_1(\lambda) = p_1{}'(\lambda)p_0(\lambda) - p_1(\lambda)p_0{}'(\lambda) = p_1{}'(\lambda) = 1 > 0$$

$$\because\ p_1(\lambda) = \lambda - \alpha_k \Rightarrow p_1{}'(\lambda) = 1$$

- したがって**(*2)**より以下が成立する:

$$q_k(\lambda) > 0, \quad k = 2,3,\ldots,n$$

$$q_n(\lambda) = p_n{}'(\lambda)p_{n-1}(\lambda) - p_n(\lambda)p_{n-1}{}'(\lambda) > 0$$

$$\boxed{q_n(\lambda_0) = p_n{}'(\lambda_0)p_{n-1}(\lambda_0) > 0} \quad \because\ p_n(\lambda_0) = 0$$