数値計算

京都大学大学院情報学研究科
大木 健太郎
連絡先： ohki@i.kyoto-u.ac.jp

第9回
- 代数方程式の数値解法
- 対称行列の固有値問題

本日の内容

- 代数方程式の数値解法
  - 連立法: Durand-Kerner 法
  - 連立法: Ehrlich-Aberth 法
  - 多項式の計算と微分法
- 対称行列の固有値問題
  - Jacobi 法

代数方程式の連立法

- 多項式の根を全て求める計算法
  - Durand-Kerner 法: ２次収束

多項式

$$p_n(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n,$$
$$a_0 \neq 0, a_i \in \mathbb{C}, i = 0, 1, \cdots, n$$

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} - \frac{p_n(z_i^{(k)})}{a_0 \prod_{j=1, j\neq i}^{n} (z_i^{(k)} - z_j^{(k)})}$$

    - Durand-Kerner-Aberth 法: 初期値の取り方を工夫

$$z_i^{(0)} = -\frac{a_1}{n} + r_0 \exp\left(\sqrt{-1}\left(\frac{2(i-1)\pi}{n} + \frac{\pi}{2n}\right)\right)$$

  - Ehrlich-Aberth 法: ３次収束

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} - \frac{\dfrac{p_n(z_i^{(k)})}{p_n'(z_i^{(k)})}}{1 - \dfrac{p_n(z_i^{(k)})}{p_n'(z_i^{(k)})} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \dfrac{1}{z_i^{(k)} - z_j^{(k)}}}$$

連立法の導出の準備

- 多項式

$$p_n(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n,$$

$$a_0 \neq 0, a_i \in \mathbb{C}, i = 0, 1, \cdots, n$$

- 書き直すと

$$\begin{aligned} p_n(z) &= a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n, \\ &= a_0 (z - \alpha_1) \cdots (z - \alpha_n) \end{aligned}$$

求めたい多項式の根

Durand-Kerner法の導出

多項式に Newton 法をそのまま適用

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} - \frac{p_n(z_i^{(k)})}{p_n'(z_i^{(k)})} = z_i^{(k)} - \frac{p_n(z_i^{(k)})}{a_0 \prod_{j=1, j\neq i}^{n} (z_i^{(k)} - \alpha_j)}$$

$\alpha_j \rightarrow z_j^{(k)}$ と置き換える

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} - \frac{p_n(z_i^{(k)})}{a_0 \prod_{j=1, j\neq i}^{n} (z_i^{(k)} - z_j^{(k)})}$$

※ 重根のある場合は，そのまま適用できないことに注意

DK法の初期値の選択

命題（[伊理正夫：数値計算，朝倉書店(1981)]，定理12.1）

$$p_n(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_{n-1} z + a_n = 0$$

の解の絶対値は，方程式

$$q_n(z) = |a_0| z^n - |a_1| z^{n-1} - \cdots - |a_{n-1}| z - |a_n| = 0$$

の唯一の正の実数解 r を超えない

$$q_n(z) = 0 \;\Rightarrow\; 1 = \frac{|a_1|}{|a_0|} z^{-1} + \frac{|a_2|}{|a_0|} z^{-2} + \cdots + \frac{|a_n|}{|a_0|} z^{-n}$$

右辺は単調減少関数なので，必ず正の実数で唯一の解をもつ

DK法の初期値の選択

仮定 $a_0 = 1$ とする

原点シフト

$$
\begin{aligned}
p_n(z) =& p_n\left(w - \frac{a_1}{n}\right) \\
=& w^n + c_{n-2}w^{n-2} + \cdots + c_n = 0
\end{aligned}
$$

$$S(w) := w^n - |c_{n-2}|w^{n-2} - \cdots - |c_n| = 0$$

⇒ 命題より，唯一の正の実数解 *r* が存在し，
多項式の根は全て$\Gamma := \{z \in \mathbb{C} \mid |z + a_1/n| \leq r\}$
に含まれる

DK法の初期値の選択

- $r \leq r_0$ となる r_0 を適当な方法で選ぶ
  （Sturm の定理を使えば，[0, r_0] 内に根が存在するかどうか調べられる）

$$z_i^{(0)} = -\frac{a_1}{n} + r_0 \exp\left(\sqrt{-1}\left(\frac{2(i-1)\pi}{n} + \frac{\pi}{2n}\right)\right)$$

- 原点から半径 r_0 の円周に，等間隔で初期値を配置
- 初期値の配置を実軸対称にしないように，$\pi/2n$ 角度をずらす
  （初期値を複素共役対にとると，真値に収束しない場合がある）

本日の内容

- 代数方程式の数値解法
  - 連立法: Durand-Kerner 法
  - 連立法: Ehrlich-Aberth 法
  - 多項式の計算と微分法
- 対称行列の固有値問題
  - Jacobi 法

Ehrlich-Aberth法の導出

- 多項式の対数をとる

$$\log p_n(z) = \log a_0 + \sum_{i=1}^{n} \log(z - \alpha_i)$$

- 両辺を微分し，α_j に十分近い z_j を用いて整理

$$\frac{p'_n(z)}{p_n(z)} = \frac{1}{z - \alpha_i} + \sum_{j=1, j \neq i}^{n} \left(\frac{1}{z - z_j} - \frac{z_j - \alpha_j}{(z - z_j)(z - \alpha_j)} \right)$$

$$\simeq \frac{1}{z - \alpha_i} + \sum_{j=1, j \neq i}^{n} \frac{1}{z - z_j}$$

Ehrlich-Aberth法の導出

- 両辺を整理

$$\alpha_i \simeq z - \frac{\frac{p_n(z)}{p_n'(z)}}{1 - \frac{p_n(z)}{p_n'(z)} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{1}{z - z_j}}$$

- α_i と z を置き換える

$$z_i^{(k+1)} = z_i^{(k)} - \frac{\frac{p_n(z_i^{(k)})}{p_n'(z_i^{(k)})}}{1 - \frac{p_n(z_i^{(k)})}{p_n'(z_i^{(k)})} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{1}{z_i^{(k)} - z_j^{(k)}}}$$

連立法の性質

- Durand-Kerner 法
  - 収束の速さ: 真値に近いと2次収束（Newton法なので）
  - 収束する初期値の範囲: 多項式の根が単根の場合，Aberthの初期値設定で収束が保証される
（DKA法）
  - Aberthの初期値配置を用いると，真値から遠いところでも1次収束が保証される
- Ehrlich-Aberth 法
  - 収束の速さ:真値に近いと3次収束（証明は次ページ）

Ehrlich-Aberth法の収束の速さ

$$\delta z_i^{(k)} := z_i^{(k)} - \alpha_i$$

$\boxed{\text{仮定}}$ $|\delta z_i^{(k)}| < \epsilon, \ i = 1, 2, \cdots, n$

$$\begin{aligned}
\delta z_i^{(k+1)} &= \delta z_i^{(k)} - \left(\frac{p_n'(z_i^{(k)})}{p_n(z_i^{(k)})} - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{1}{z_i^{(k)} - z_j^{(k)}} \right)^{-1} \\
&= \delta z_i^{(k)} - \left(\sum_{j=1}^{n} \frac{1}{z_j^{(k)} - \alpha_j} - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{1}{z_i^{(k)} - z_j^{(k)}} \right)^{-1} \\
&= \delta z_i^{(k)} - \left(\frac{1}{z_i^{(k)} - \alpha_i} - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{\delta z_j^{(k)}}{(z_i^{(k)} - z_j^{(k)})(z_j^{(k)} - \alpha_j)} \right)^{-1}
\end{aligned}$$

Ehrlich-Aberth法の収束の速さ(続き)

$$
\begin{aligned}
\delta z_i^{(k+1)} =& \delta z_i^{(k)} - \delta z_i^{(k)} \left(1 - \delta z_i^{(k)} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{\delta z_j^{(k)}}{(z_i^{(k)} - z_j^{(k)})(z_j^{(k)} - \alpha_j)} \right) \\
=& \delta z_i^{(k)} \left(1 - \left(1 + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\delta z_i^{(k)} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{\delta z_j^{(k)}}{(z_i^{(k)} - z_j^{(k)})(z_j^{(k)} - \alpha_j)} \right)^m \right) \right) \\
=& (\delta z_i^{(k)})^2 \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{\delta z_j^{(k)}}{(z_i^{(k)} - z_j^{(k)})(z_j^{(k)} - \alpha_j)} + O(\epsilon^5)
\end{aligned}
$$

⇒ $\delta z_i^{(k+1)} = O(\epsilon^3)$ 3次の収束

補足

- 多項式に重根がある場合は，例えば
  伊理正夫: 数値計算，朝倉書店 (1981)
  を参照すること
- Matlab や Scilab には，係数ベクトルから多項式を生成するコマンド（poly）と，多項式の根を計算するコマンド（roots）がある．そこではJenkins-Traub法（コンパニオン行列の固有値を求める方法）が用いられている

本日の内容

- ❖代数方程式の数値解法
  - ❖ 連立法: Durand-Kerner 法
  - ❖ 連立法: Ehrlich-Aberth 法
  - ❖ 多項式の計算と微分法
- ❖対称行列の固有値問題
  - ❖Jacobi 法

多項式の効率的な計算法

- 多項式の効率的な計算法：Horner 法
- 通常の多項式の計算：*n*(*n*+1)/2 回の乗算
- Horner 法：*n* 回の乗算

$$p_n(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \cdots + a_n$$

$$\begin{aligned} p_n(\zeta) =& a_0\zeta^n + a_1\zeta^{n-1} + \cdots + a_n \\ =& (\zeta - z)\left(b_0^{(1)}\zeta^{n-1} + b_1^{(1)}\zeta^{n-2} + \cdots + b_{n-1}^{(1)}\right) + b_n^{(1)} \end{aligned}$$

$$p_n(z) = b_n^{(1)}$$

Horner 法

形式的に整理する

$$
\begin{aligned}
p_n(\zeta) =& a_0\zeta^n + a_1\zeta^{n-1} + \cdots + a_n \\
=& (\zeta - z)\left(b_0^{(1)}\zeta^{n-1} + b_1^{(1)}\zeta^{n-2} + \cdots + b_{n-1}^{(1)}\right) + b_n^{(1)}
\end{aligned}
$$

⇒ $p_n(z) = b_n^{(1)}$

$b_l^{(1)}, l = 0, 1, \cdots, n$ を計算すればよい

$$
\begin{cases}
b_0^{(1)} = a_0 \\
b_l^{(1)} = z b_{l-1}^{(1)} + a_l
\end{cases}
\Rightarrow \quad p_n(z) = b_n^{(1)}
$$

多項式の微分法

- 多項式を Taylor 展開

$$
\begin{aligned}
p_n(\zeta) =& p_n(z) + (\zeta - z)p_n'(z) + (\zeta - z)^2 \frac{1}{2!}p_n''(z) + \cdots + (\zeta - z)^n \frac{1}{n!}p_n^{(n)}(z) \\
=& p_n(z) + (\zeta - z)\underline{q_1(\zeta, z)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
q_1(\zeta, z) =& p_n'(z) + (\zeta - z)\frac{1}{2!}p_n''(z) + \cdots + (\zeta - z)^{n-1}\frac{1}{n!}p_n^{(n)}(z) \\
=& b_0^{(1)}\zeta^{n-1} + b_1^{(1)}\zeta^{n-2} + \cdots + b_{n-1}^{(1)}
\end{aligned}
$$

$$
p_n'(z) = b_0^{(1)} z^{n-1} + b_1^{(1)} z^{n-2} + \cdots + b_{n-1}^{(1)}
$$

Horner法で計算可能

多項式の高次微分

- *m* 回微分の場合

$$
\begin{cases}
b_0^{(m+1)} = a_0 \\
b_l^{(m+1)} = z b_{l-1}^{(m+1)} + b_l^{(m)}, \quad l = 1, 2, \cdots, n-m
\end{cases}
$$

$$
\frac{d^m p_n(z)}{dz^m} = m! b_{n-m}^{(m+1)}
$$

※ z を固定して，Horner 法を繰り返し適用

本日の内容

- ❖ 代数方程式の連立法
  - ❖ 連立法: Durand-Kerner 法
  - ❖ 連立法: Ehrlich-Aberth 法
  - ❖ 多項式の計算と微分法
- ❖ 対称行列の固有値問題
  - ❖ Jacobi 法

固有値問題

- n 次複素正方行列 A に対し

$$Ax = \lambda x,$$

を満たす複素数 λ と非ゼロの n 次複素ベクトル x を求める問題

✓ 固有値を求める：代数方程式（行列の特性方程式）

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

✓ 固有ベクトルを求める：線形方程式（ランク落ちしている行列の連立一次方程式）

$$(A - \lambda I)x = 0$$

固有値問題の応用例

- 線形方程式の安定性

$$\frac{d}{dt}x(t) = Ax(t)$$

  - 行列 *A* の固有値の実部が負であることが，ゼロベクトルに収束するための必要十分条件

$$\frac{d}{dt}x(t) = Ax(t) + Bu(t), \quad u(t) = Fx(t)$$

  - フィードバック制御の場合，行列 *A* + *BF* の固有値の実部を負にする設計パラメータ *F* を探す問題

固有値問題の解法

- 特性多項式のゼロ点を求める

$$p(\lambda) := \det(\lambda I - A) = 0$$

- 計算量や数値誤差が大きくなるので，あまり用いられない．

よく用いられる固有値問題の解法

- 小規模・中規模の行列
  - 行列にユニタリ変換を施して上三角行列（Hermite 行列の場合は対角行列）に変形
- 大規模疎行列
  - Krylov 部分空間法を用いた反復法

具体的な固有値の求め方

- 対称行列の固有値
  - Jacobi 法
  - ３重対角化 ＋ ３重対角行列の固有値
    - ３重対角化：Householder 法，Lanczos 法
    - ３重対角行列の固有値：バイセクション法，べき乗法，逆反復法
- 非対称行列の固有値
  - QR分解

本日の内容

- 代数方程式の連立法
  - 連立法: Durand-Kerner 法
  - 連立法: Ehrlich-Aberth 法
  - 多項式の計算と微分法
- 対称行列の固有値問題
  - Jacobi 法

対称行列の固有値問題

- Jacobi 法
  - 現在は小規模の行列に対して使われる（大規模行列には適さない）
  - 近似固有値の相対精度が良い
- ３重対角化 + ３重対角行列の固有値問題
  - Householder 法
  - Lanczos 法

Jacobi法

- 実対称行列に対し，直交行列を繰り返し作用させて固有値を求める方法

$$A = A^\top \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

$$\mathcal{O}(n) := \{P \in \mathbb{R}^{n\times n} \mid P^\top P = I\}$$

$$P_i \in \mathcal{O}(n),$$

$$P_1^\top A P_1 \mapsto P_2^\top P_1^\top A P_1 P_2 \mapsto \cdots \mapsto P_k^\top \cdots P_1^\top A P_1 \cdots P_k$$

$\longrightarrow$ 対角行列

Jacobi法の考え方：2×2行列の場合

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & a_3 \end{bmatrix}, \quad a_1, a_2, a_3 \in \mathbb{R}$$

$$\det(AB) = \det(A)\det(B)$$

$$\Rightarrow \det(\lambda I - A) = \det(\lambda I - P^{-1}AP)$$

固有値は相似変換で不変

$$P = \begin{bmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) \end{bmatrix}$$

Jacobi法の考え方

$$P^\top AP = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 \\ b_2 & b_3 \end{bmatrix}$$

$$b_1 = \frac{1}{2}(a_1 + a_3) + \frac{1}{2}(a_1 - a_3)\cos(2\phi) - a_2\sin(2\phi),$$

$$\boxed{b_2 = \frac{1}{2}(a_1 - a_3)\sin(2\phi) + a_2\cos(2\phi)}$$

＝０になるよう
角度を調整

$$b_3 = \frac{1}{2}(a_1 + a_3) + \frac{1}{2}(-a_1 + a_3)\cos(2\phi) + a_2\sin(2\phi)$$

⇨ 対角化される

一般の場合の直交行列の選び方

- 第 p 行と第 q 行にのみ作用する直交行列（平面内の回転行列）

$$P = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & \cos(\phi) & \cdots & \sin(\phi) & & \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & & -\sin(\phi) & \cdots & \cos(\phi) & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

- Givens変換: $A \mapsto P^\top A P$

角度ϕの選び方

$$\phi = \begin{cases} \frac{\pi}{4} & a_{pp} = a_{qq} \\ \frac{1}{2}\arctan\left(\frac{-2a_{pq}}{a_{pp}-a_{qq}}\right) & a_{pp} \neq a_{qq} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad (P^\top AP)_{pq} = 0$$

(p, q)を変えてこれを続けていくと,
全ての非対角要素がゼロにできる？

直交変換の例

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{bmatrix}, \quad P_1 = \begin{bmatrix} \cos(\phi) & 0 & \sin(\phi) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\phi) & 0 & \cos(\phi) \end{bmatrix}, \quad \phi = \frac{1}{2}\arctan(2)$$

求める固有値 $\begin{pmatrix} -1.2323 & 1.1086 & 5.1237 \end{pmatrix}$

$$A_1 = \begin{bmatrix} 0.3820 & \boxed{-1.5772} & 0 \\ \boxed{-1.5772} & 2 & 2.5520 \\ 0 & 2.5520 & 2.6180 \end{bmatrix},$$

ゼロだった要素が非ゼロになる

$$P_2 = \begin{bmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) & 0 \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \phi = \frac{1}{2}\arctan(-1.9495)$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} -0.5816 & 0 & \boxed{1.3304} \\ 0 & 2.9636 & 2.1777 \\ \boxed{1.3304} & 2.1777 & 2.6180 \end{bmatrix}$$

ゼロにした要素が非ゼロになる

直交変換の例の続き

- 何度か繰り返していくと,

固有値の1つ

$$A_k = \begin{bmatrix} \boxed{-1.2323} & 0 & 0 \\ 0 & 3.1021 & 2.0075 \\ 0 & 2.0075 & 3.1302 \end{bmatrix}$$

- 繰り返すことで固有値の近似値が求まる.

消去する非対角要素の選択

$$A = (a_{ij}), \ \ A = A^\top \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

- 非対角要素の減少を評価したい
  ⇒ 非対角要素の平方和

$$F = \sum_{i \neq j} a_{ij}^2, \quad \tilde{F} = \sum_{i \neq j} (P^\top A P)_{ij}^2$$

- 消去する成分の選択

$$a_{pq}^2 = \max\{|a_{ij}|^2 \mid i \neq j\}$$

こう選んでも，変換によって他の非対角要素が大きくなると意味がない

消去する非対角要素の選択

$$B = (b_{ij}) := P^\top A P$$

$$\begin{cases} b_{pj} = b_{jp} = a_{pj}\cos(\phi) - a_{pj}\sin(\phi), & (j \neq q, p) \\ b_{qj} = b_{jq} = a_{qj}\cos(\phi) + a_{qj}\sin(\phi), & (j \neq q, p) \end{cases}$$

$$\tilde{F} - F = 2(b_{pq}^2 - a_{pq}^2) = -2a_{pq}^2$$

$$a_{pq}^2 = \max\{|a_{ij}|^2 \mid i \neq j\}$$

を選ぶと**非対角成分の平方和を最小にする**

この意味で最適な選択

Jacobi 法の収束：大域的1次収束

- 非対角要素の最大の成分を消去する場合，
  - 大域的1次収束性

$$F_{k+1} \leq \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right) F_k$$

$$F_k := \sum_{i \neq j} (a_{ij}^{(k)})^2, \ A^{(k+1)} = (a_{ij}^{(k+1)}) = P_k^\top A^{(k)} P_k$$

Jacobi 法の収束：局所的2次収束

- 非対角要素の最大の成分を消去する場合，
  - 局所的2次収束性

A の固有値を $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ とする

$$\exists k_0 \in \mathbb{N},\ \ F_{k_0} < \left(\frac{2 \min_{\lambda_r \neq \lambda_s} |\lambda_r - \lambda_s|}{6 + \sqrt{n-2}} \right)^2$$

$$F_{k_0+N} \leq \frac{n-2}{2} \left(\frac{F_{k_0}}{\min_{\lambda_r \neq \lambda_s} |\lambda_r - \lambda_s| - 2\sqrt{F_{k_0}}} \right)^2,\ \ N := \frac{n(n-1)}{2}$$

固有ベクトル

- 固有値と固有ベクトルの関係

$$AT = T\boxed{\Lambda}$$

固有値を対角に並べた対角行列

$$T := \lim_{m \to \infty} P_1 P_2 \cdots P_m$$

- T の k 番目の列ベクトルが,
  対応する固有値 λ_k の固有ベクトル

Jacobi法の補足

- 絶対値最大の非対角要素を探すのは非効率.
  消去する非対角要素は適当に選んでもよい(非対角要素の平方和が単調に減少する)
- 30次元でも数千回の回転を要するので,
  高次元になると時間と精度に難がある.
- 固有ベクトルの直交性はよく保たれる
- 回転角度そのものを, 実際には計算する必要はない.

$$\cos(2\phi) = \frac{|a_{pp} - a_{qq}|}{\sqrt{4a_{pq}^2 + (a_{pp} - a_{qq})^2}}, \quad \cos(\phi) = \sqrt{\frac{1}{2}(1 + \cos(2\phi))}$$

$$\sin(\phi) = \mathrm{sgn}\left(-a_{pq}(a_{pp} - a_{qq})\right) \sqrt{\frac{1}{2}(1 - \cos(2\phi))}$$

次回の講義予定

- 行列の固有値問題の続き（教科書第3章）