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10回
・ 対称行列の固有値問題

本日の内容

- ❖対称行列の固有値問題
  - ❖Jacobi 法
  - ❖３重対角化
    - ❖Householder 法
    - ❖Lanczos 法
  - ❖３重対角行列の固有値
    - ❖二分法（バイセクション法）
    - ❖べき乗法
    - ❖Wielandt の逆反復法

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

- ❖対称行列の固有値問題
  - ❖Jacobi 法
  - ❖３重対角化
    - ❖Householder 法
    - ❖Lanczos 法
  - ❖３重対角行列の固有値
    - ❖二分法（バイセクション法）
    - ❖べき乗法
    - ❖Wielandt の逆反復法

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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.

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

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

本日の内容

- 対称行列の固有値問題
  - Jacobi 法
  - ３重対角化
    - Householder 法
    - Lanczos 法
  - ３重対角行列の固有値
    - 二分法（バイセクション法）
    - べき乗法
    - Wielandt の逆反復法

対称行列の固有値を求める他の方法

- ３重対角化 ＋ ３重対角行列の固有値で求める
- 例： Householder-Givens法
  1. 有限回数の操作で3重対角行列にする(Holseholder法)
  2. ３重対角行列の固有値を2分法で求める(Givens法)
  3. Wielandtの方法を用いて固有ベクトルを求める

実対称行列の3重対角化

- 直交行列を用いて，次のように順次変換

$$
A^{(1)} = P_1^\top A P_1 = \begin{bmatrix} * & * & 0 & \cdots & 0 \\ * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \cdots & * \end{bmatrix}
$$

$$
A^{(2)} = P_2^\top A^{(1)} P_2 = \begin{bmatrix} * & * & 0 & \cdots & & 0 \\ * & * & * & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & * & \cdots & & * \\ 0 & 0 & * & \cdots & & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & * & \cdots & * & \end{bmatrix}
$$

n-2ステップで
3重対角化可能

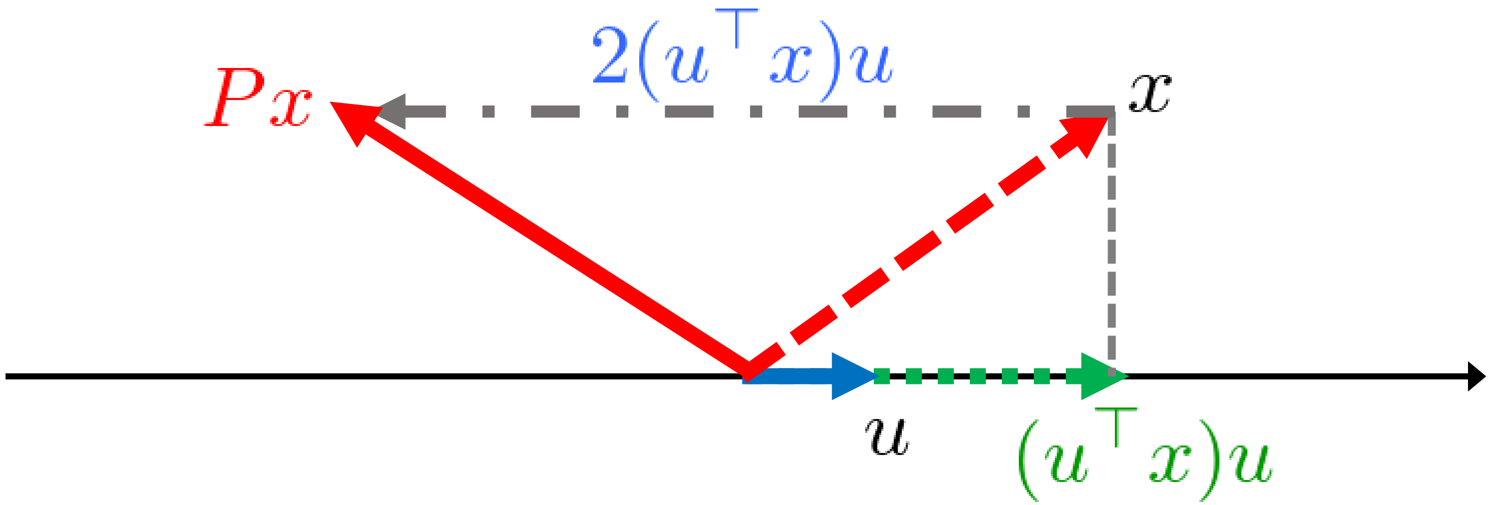
基本直交行列

- 次の直交行列を考える

$$P = I - 2uu^\top,\ u \in \mathbb{R}^n,\ \|u\|_2 = 1$$

- 直交行列の作用:

$$x \in \mathbb{R}^n,\ Px = (I - 2uu^\top)x = x - 2(u^\top x)u,\ u \in \mathbb{R}^n,\ \|u\|_2 = 1$$



ベクトル u の選び方

補題 3.1

$$x, y \in \mathbb{R}^n, \ \ x \neq y, \ \ \|x\|_2 = \|y\|_2$$

$$\Rightarrow \quad (I - 2uu^\top)x = y, \ \ \text{where } u = \frac{x - y}{\|x - y\|_2}$$

$$y = \|x\|_2 e_i, \ \ e_i = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & \underset{i\text{ 番目}}{1} & \cdots & 0 \end{bmatrix}^\top$$

ベクトル x の大きさを変えずに，都合のよいベクトルへ変換

3重対角化:1stステップ

$$x = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} \dfrac{a_{11}}{\sqrt{\sum_{j=2}^{n} a_{j1}^2}} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u_1 = \frac{x - y}{\|x - y\|_2}, \quad P_1 = I - 2u_1u_1^\top$$

$$A^{(1)} = P_1^\top A P_1 = \begin{bmatrix} * & * & 0 & \cdots & 0 \\ * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & * & * & \cdots & * \end{bmatrix}$$

3重対角化：2ndステップ

$$x = \begin{bmatrix} a_{12}^{(1)} \\ a_{22}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n2}^{(1)} \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} a_{12}^{(1)} \\ a_{22}^{(1)} \\ \sqrt{\sum_{j=3}^{n} (a_{j2}^{(1)})^2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u_2 = \frac{x-y}{\|x-y\|_2}, \quad P_2 = I - 2u_2 u_2^\top$$

$$A^{(2)} = P_2^\top A^{(1)} P_2 = \begin{bmatrix} * & * & 0 & \cdots & & 0 \\ * & * & * & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & * & \cdots & & * \\ 0 & 0 & * & \cdots & & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ 0 & 0 & * & \cdots & * & \end{bmatrix}$$

順次繰り返せばよい

Householder法の補足

- 有限回（$O(n^3)$回）の演算で3重対角行列が求まる
- 非対称な行列に同じ手順で直交行列による変換を行うと, Hessenbergの標準形になる

$$A^{(n-2)} = \begin{bmatrix} * & * & & \cdots & & * \\ * & * & * & & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & & * \\ 0 & 0 & * & \cdots & & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & * & * \end{bmatrix}$$

本日の内容

- 対称行列の固有値問題
  - Jacobi 法
  - ３重対角化
    - Householder 法
    - Lanczos 法
  - ３重対角行列の固有値
    - 二分法（バイセクション法）
    - べき乗法
    - Wielandt の逆反復法

別の3重対角化：Lanczos法

- Householder 法：行列 A を変形していく方法
  - $2n^2$回程度の乗算と$2n^2$回程度の加減算
    （非対称行列の場合は$4n^2$回程度の乗算と$4n^2$回程度の加減算）
- Lanczos 法：行列 A をそのまま用いる方法
  - 行列 A が大規模疎行列の場合，計算量と記憶領域の両面でとくに有利
  - 丸め誤差の影響を強く受ける

別の3重対角化：Lanczos法

- 行列 A の3重対角化

$$A = A^\top \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad P \in \{P \in \mathbb{R}^{n\times n} \mid P^\top P = I\}$$

$$B = P^\top A P = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}$$

$$AP = PB$$

Lanczos 法の考え方

$$P = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_n \end{bmatrix},\ u_i \in \mathbb{R}^n,\ u_i^\top u_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

$$AP = PB$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{aligned} Au_1 &= \alpha_1 u_1 + \beta_1 u_2 \\ Au_2 &= \beta_1 u_1 + \alpha_2 u_2 + \beta_2 u_3 \\ &\vdots \\ Au_k &= \beta_{k-1} u_{k-1} + \alpha_k u_k + \beta_k u_{k+1} \\ &\vdots \\ Au_n &= \beta_{n-1} u_{n-1} + \alpha_n u_n \end{aligned} \right.$$

$$\alpha_k = u_k^\top A u_k$$

$$\beta_1 = \|(Au_1 - \alpha_1)\|_2$$

$$\beta_k = \|Au_k - \beta_{k-1} u_{k-1} - \alpha_k A u_k\|_2$$

Lanczos 法のアルゴリズム

- 最初に単位ベクトルを与える

$$u_1$$

- α_1 と β_1 を求める

$$\alpha_1 = u_1^\top A u_1, \;\; \beta_1 = \|Au_1 - \alpha_1 u_1\|_2$$

- 次の正規直交ベクトルを求める

$$u_2 = \frac{1}{\beta_1}(Au_1 - \alpha_1 u_1)$$

Lanczos過程

Lanczos 法のアルゴリズム

- 繰り返す

$$\alpha_k = u_k^\top A u_k, \ \ \beta_k = \| A u_k - \alpha_k u_k - \beta_{k-1} u_{k-1} \|_2$$

$$u_{k+1} = \frac{1}{\beta_k} (A u_k - \alpha_k u_k - \beta_{k-1} u_{k-1})$$

Lanczos過程

Lanczos 法の数値例

Scilab プログラム

```
A = [1 2 3;2 3 4; 3 4 5];
u1 = [1;0;0];
alpha1 = u1'*A*u1;
beta1 = norm(A*u1-alpha1*u1);
u2=(A*u1-alpha1*u1)/beta1;
alpha2 = u2'*A*u2;
beta2 = norm(A*u2-alpha2*u2 - beta1 *u1);
u3=(A*u2-alpha2*u2 - beta1 *u1)/beta2;

% 確認用
P=[u1, u2, u3];
B=P'*A*P
```

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \end{bmatrix}, \quad u1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$u2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.555 \\ 0.832 \end{bmatrix}, \quad u3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.832 \\ -0.555 \end{bmatrix}$$

※ 10進3桁浮動小数点表示

$$B = P^\top AP = \begin{bmatrix} 1 & 3.61 & 0 \\ 3.61 & 8.68 & 0.615 \\ 0 & 0.615 & -0.0769 \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} u1 & u2 & u3 \end{bmatrix}$$

Lanczos 法の補足

- 得られる直交ベクトルはKrylov部分空間の元

$$u_i \in K_k(A; u) = \mathrm{span}(u, Au, A^2u, \cdots, A^{k-1}u),\ i = 1, 2, \cdots, k$$

- 丸め誤差に弱い: 丸め誤差を抑える方法を併用することが多い

Lanczos法の数値例で求めた直交ベクトル

$$u_1^\top u_2 = 0,\ u_1^\top u_3 = -1.44 \times 10^{-15},\ u_2^\top u_3 = 3.16 \times 10^{-15}$$

マシンイプシロン ≒ 2.22×10^{-16}

直交性が1桁悪くなっている

本日の内容

- 対称行列の固有値問題
  - Jacobi 法
  - 3重対角化
    - Householder 法
    - Lanczos 法
  - 3重対角行列の固有値
    - 二分法（バイセクション法）
    - べき乗法
    - Wielandt の逆反復法

３重対角行列の固有値問題

- ２分法（バイセクション法）
  - Sturm の方法で固有値を求める
- べき乗法
  - 固有値の絶対値が最大の固有値と固有ベクトルを求める方法
- Wielamdtの逆反復法
  - 固有ベクトルを求める方法

3重対角行列と特性方程式

3重対角行列

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}$$

次の代数方程式（特性多項式）の根が行列 A の固有値

$$p_n(\lambda) := \underline{\det(\lambda I - A)} = 0$$

あまり嬉しくない

主小行列式の関係

3重対角行列

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} p_k(\lambda) =& \det \begin{bmatrix} \lambda-\alpha_1 & -\beta_1 & & & & \\ -\beta_1 & \lambda-\alpha_2 & -\beta_2 & & & \\ & -\beta_2 & \lambda-\alpha_3 & -\beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \lambda-\alpha_{k-1} & -\beta_{k-1} \\ & & & & -\beta_{k-1} & \lambda-\alpha_k \end{bmatrix} \\ =& (\lambda-\alpha_k)p_{k-1}(\lambda) - \beta_{k-1}^2 p_{k-2}(\lambda) \end{aligned}$$

計算量の低減 ⇒ 数値誤差の低減

Sturm列と固有値の数の関係

一般性を失わない

補題3.2

$\beta_k \neq 0,\ k = 1, 2, \cdots n-1$ とする. このとき,
多項式の列 $p_n(\lambda),\ p_{n-1}(\lambda),\ \cdots,\ p_1(\lambda),\ p_0(\lambda)$ は
実軸上の閉区間においてSturm 列をなす

定理3.1

区間 $[a, b]$ が与えられ, $p_n(a) \neq 0$, $p_n(b) \neq 0$ とする.
$N(\lambda)$: $\lambda \in [a, b]$ を固定した列$\{ p_n(\lambda),\ p_{n-1}(\lambda),\ \ldots,\ p_0(\lambda)\}$
における符号変化の回数
区間$[a, b]$ に含まれる行列 A の固有値の数 n_0 は,

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

2分法（バイセクション法）

- 区間[a, b]を2等分しながら，Sturmの方法で固有値の存在する区間を探索する方法.
- 十分狭い区間に追い込めば，固有値の近似値が得られる
- 初期区間は，例えば教科書 p. 16の固有値の存在範囲を基に決めればよい

2分法の補足

- 代数方程式の解は係数に対して敏感
⇒ 丸め誤差があると，解は大きく変わりうる

（例） $A = \begin{bmatrix} 10 & 5.1 \\ 5 & 2.5 \end{bmatrix}$

$$p(\lambda) = \lambda^2 - 12.5\lambda - 0.1 = 0 \ \Rightarrow \ \lambda = -12.5,\ 0.8 \times 10^2$$

$$p'(\lambda) = \lambda^2 - 12.5\lambda - 0.2 = 0 \ \Rightarrow \ \lambda = -12.5,\ 1.6 \times 10^2$$

倍変わる

- 特性方程式を直接用いたくないのは，計算による数値誤差を減らしたいため

本日の内容

- 対称行列の固有値問題
  - Jacobi 法
  - 3重対角化
    - Householder 法
    - Lanczos 法
  - 3重対角行列の固有値
    - 二分法（バイセクション法）
    - べき乗法
    - 逆反復法

べき乗法

- 固有値の大きい方から数個の固有値，固有ベクトルを求める方法

$$Au_i = \lambda_i u_i \qquad |\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$$

$$x^{(k)} := A^k x^{(0)}, \quad \lambda_1 = \lim_{k \to \infty} \frac{(x^{(k)})^\top x^{(k)}}{(x^{(k)})^\top x^{(k-1)}}$$

適当な初期値から出発

固有値

固有ベクトル

$$u_1 = \lim_{k \to \infty} \frac{x^{(k)}}{\|x^{(k)}\|}$$

べき乗法

固有値と固有ベクトルの関係

$$Au_i = \lambda_i u_i \qquad |\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|$$

$$\forall x \in \mathbb{R}^n,\ \ x = \sum_{i=1}^{n} c_i u_i$$

$$x^{(k)} = A^k x^{(0)} = \sum_{i=1}^{n} c_i \lambda_i^k u_i$$

1未満

$$= c_1 \lambda_1^k \left\{ u_1 + \sum_{i=2}^{n} \frac{c_i}{c_1} \boxed{\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)}^k \right\} \xrightarrow{k \gg 1} c_1 \lambda_1^k u_1 + \epsilon$$

べき乗法

- 原理的には，u_1成分を除いて同じように第二の固有値 λ_2 と固有ベクトルを求められる

$$y^{(k)} = A^k y^{(0)}, \ y^{(0)} = x^{(0)} - u_1^\top x^{(0)} u_1$$

$$\lambda_2 = \lim_{k\to\infty} \frac{(y^{(k)})^\top y^{(k)}}{(y^{(k)})^\top y^{(k-1)}}$$

- 数値誤差があると，第一固有値の成分が大きくなってくるため，数個程度の固有値・固有ベクトルを求めるために使われる

本日の内容

- ❖対称行列の固有値問題
  - ❖Jacobi 法
  - ❖３重対角化
    - ❖Householder 法
    - ❖Lanczos 法
  - ❖３重対角行列の固有値
    - ❖二分法（バイセクション法）
    - ❖べき乗法
    - ❖Wielandt の逆反復法

Wielandtの逆反復法：固有ベクトルを求める方法

- 固有値 λ_s の近似値 μ が得られた場合，

$$|\mu - \lambda_s| < |\mu - \lambda_j|,\ j \neq s \ \Leftrightarrow \ \left|\frac{1}{\mu - \lambda_s}\right| > \left|\frac{1}{\mu - \lambda_j}\right|,\ j \neq s$$

べき乗法が使える：$x^{(k)} = (\mu I - A)^{-1} x^{(k-1)}$

逆行列を求めておくか，次の連立一次方程式を各ステップで解くことで固有ベクトルが得られる

$$(\mu I - A) x^{(k)} = x^{(k-1)}$$

次回の講義予定

- 行列の固有値問題（教科書第3章）の残り
  - 一般の行列の固有値問題