

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11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

❖ 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
 - i. 有限回数で3重対角行列にする(Householder法)
 - ii. 3重対角行列の固有値を2分法で求める(Givens法)
 - iii. 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**

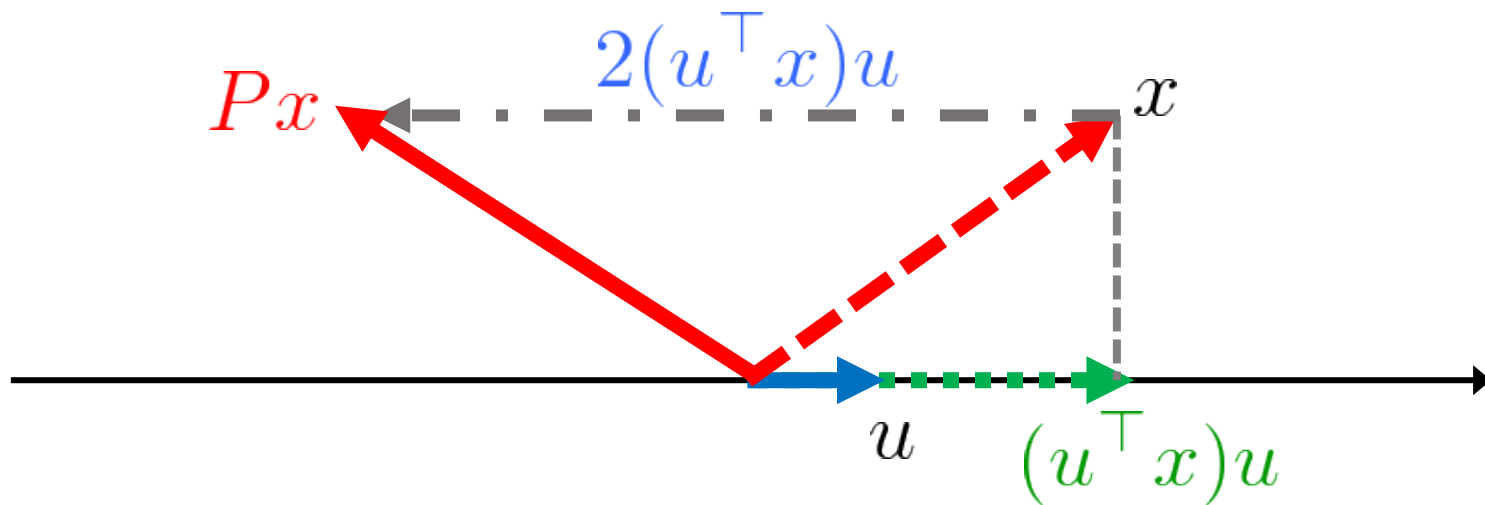
基本直交行列

- 次の直交行列を考える

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

- 直交行列の作用:


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



ベクトル u の選び方

補題 3.1

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

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

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

i 番目

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

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



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

3重対角化: 2ndステップ

$$x = \begin{bmatrix} a_{12}^{(1)} \\ a_{22}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n2}^{(1)} \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} a_{12}^{(1)} \\ a_{22}^{(1)} \\ \sqrt{\sum_{j=3}^n (a_{j2}^{(1)})^2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u_2 = \frac{x - y}{\|x - y\|_2}, \quad P_2 = I - 2u_2u_2^\top$$



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

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

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

$$AP = PB$$


$$Au_1 = \alpha_1 u_1 + \beta_1 u_2$$

$$Au_2 = \beta_1 u_1 + \alpha_2 u_2 + \beta_2 u_3$$

$$\vdots$$

$$Au_k = \beta_{k-1} u_{k-1} + \alpha_k u_k + \beta_k u_{k+1}$$

$$\vdots$$

$$Au_n = \beta_{n-1} u_{n-1} + \alpha_n u_n$$

$$\alpha_k = u_k^\top Au_k$$

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

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

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

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

- 次の正規直交ベクトルを求める

$$u_2 = \frac{1}{\beta_1} (Au_1 - \alpha_1 u_1) \quad \text{Lanczos過程}$$

Lanczos 法のアルゴリズム

- 繰り返す

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

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

Lanczos過程と同じ

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

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

Lanczos 法の補足

- 得られる直交ベクトルは Krylov 部分空間の元

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

- 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

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

$$\text{マシンイプシロン} \doteq 2.22 \times 10^{-16}$$

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

❖ 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
- Wielandt 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


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

あまり嬉しくない

主小行列式の関係

3重対角行列

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


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

計算量の低減 ⇒ 数値誤差の低減

Sturm列と固有値の数の関係

補題3.2

一般性を失わない

$\beta_k \neq 0, k = 1, 2, \dots, n - 1$ とする. このとき,
多項式の列 $p_n(\lambda), p_{n-1}(\lambda), \dots, p_1(\lambda), p_0(\lambda)$ 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 $\{p_n(\lambda), p_{n-1}(\lambda), \dots, p_0(\lambda)\}$
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、解は大きく変わってしまう

(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

❖ 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

$$Au_i = \lambda_i u_i \quad |\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$$

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

固有値

適当な初期値から出発

固有ベクトル

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

べき乗法

固有値と固有ベクトルの関係

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

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

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

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

1 未満

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

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

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

- 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

❖ 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