応用数理工学特論：6 月 5 日講義ノート

担当：山本雅文，中村翔太郎

2008 年 6 月 23 日

1　ヘッセンベルグ行列への変換

ヘッセンベルグ行列とは，対角成分より 1 つ下まで要素がある行列．

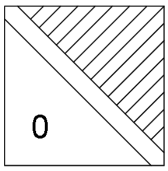

図 1　ヘッセンベルグ行列

ヘッセンベルグ行列の作り方は以下の通りである．まず，図 2 のような行列に対して，図 3 のように $\boldsymbol{a_1}$ の第 2 要素以下を 0 にする鏡像変換行列 Q_1 を左からかける．となるような操作を行う．

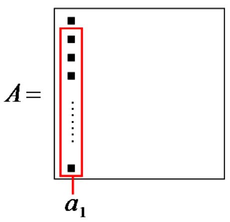

図 2　ステップ 1

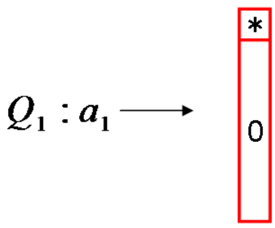

図 3　鏡像変換

これにより，A の第 1 列の第 3 要素以下は 0 に消去される。次に，相似変換とするため，Q_1^* を右からかける。0 に消去された部分は，この操作によって影響を受けない。同様の操作を図 4，図 5 といった具合に繰り返していく．

n-1 回同様の操作を繰り返すことで，図 6 のようにヘッセンベルグ行列ができる．

2　ヘッセンベルグ行列の固有値計算

A: n×n 非対称行列

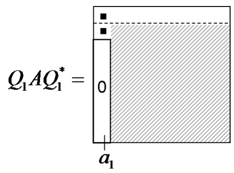

図 4　ステップ 2

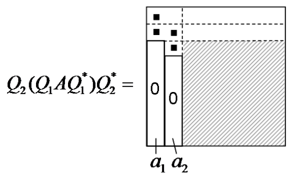

図 5　ステップ 3

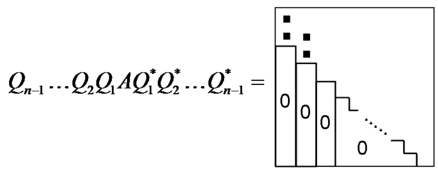

図 6　ステップ n-1

$\mathrm{A}\boldsymbol{s_i}=\boldsymbol{\lambda_i s_i}$

$|\boldsymbol{\lambda_1}| > |\boldsymbol{\lambda_2}| > \cdots > |\boldsymbol{\lambda_n}|, \boldsymbol{i = 1, 2, \cdots, n}$

2.1　べき乗数

- 絶対値最大の固有値 ($\boldsymbol{\lambda_1}$) と対応する固有ベクトルを求める．

＜アルゴリズム＞

$\boldsymbol{x_0}$: 初期ベクトル (長さ 1)

do　i=1,2,···

　$\boldsymbol{x_i}=\mathrm{A}\boldsymbol{x_{i-1}}$

end　do

$\boldsymbol{x_i} \longrightarrow \boldsymbol{s_i}$ (i$\longrightarrow\infty$ のとき)

＜べき乗法の解析＞

$\{\boldsymbol{s_1, s_2, s_3, \cdots, s_n}\}$は 1 次独立．すなわち，n 次元空間の基底となる．よって

$$\boldsymbol{x_0}=\sum_{\boldsymbol{j=1}}^{\boldsymbol{n}} \mathrm{c}_{\boldsymbol{j}} \boldsymbol{s_j}$$

と書くことができる．アルゴリズム中では１ステップごとに $\boldsymbol{x_i}$ の規格化を行っているが，最後にまとめて規格化を行っても数学的には同じなので，以下では後者のアルゴリズムに対して解析を行う。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x_i} &= \mathrm{A}^{\boldsymbol{i}}\boldsymbol{x_0}\\ &= \sum_{j=1}^{n}\mathrm{c}_j\mathrm{A}^{\boldsymbol{i}}\boldsymbol{s_j}\\ &= \sum_{j=1}^{n}\mathrm{c}_j\boldsymbol{\lambda}_j^i\boldsymbol{s_j}\end{aligned}$$

であることから，

$$\frac{\boldsymbol{x_i}}{\|\boldsymbol{x_i}\|_2} = \frac{\sum_{j=1}^{n}\mathbf{c}_j\mathbf{A}^{\boldsymbol{i}}\boldsymbol{s_j}}{\|\sum_{j=1}^{n}\mathbf{c}_j\mathbf{A}^{\boldsymbol{i}}\boldsymbol{s_j}\|_2}$$

$$=\frac{\sum_{j=1}^{n}\mathbf{c}_j(\boldsymbol{\lambda}_\mathrm{j}/\boldsymbol{\lambda}_1)^{\boldsymbol{i}}\boldsymbol{s_j}}{\|\sum_{j=1}^{n}\mathbf{c}_j(\boldsymbol{\lambda}_\mathrm{j}/\boldsymbol{\lambda}_1)^{\boldsymbol{i}}\boldsymbol{s_j}\|_2}$$

j≠1　の 時　$(\boldsymbol{\lambda}_j/\boldsymbol{\lambda}_1)^i \rightarrow 0$

(i→∞)

ゆえに

$$\frac{\boldsymbol{x_i}}{\|\boldsymbol{x_i}\|}\rightarrow\frac{\mathbf{c}_1\boldsymbol{s_1}}{\|\mathbf{c}_1\boldsymbol{s_1}\|}$$

となる．

また，固有値の求め方は以下の通りである．

$$\frac{\boldsymbol{x}_i^*\mathbf{A}\boldsymbol{x}_i}{\|\boldsymbol{x}_i\|_2^2}\rightarrow\frac{\boldsymbol{s}_1^*\mathbf{A}\boldsymbol{s}_1}{\|\boldsymbol{s}_1\|_2^2}$$

$$=\frac{\boldsymbol{\lambda}_1\boldsymbol{s}_1^*\boldsymbol{s}_1}{\|\boldsymbol{s}_1\|_2^2}$$

$$=\boldsymbol{\lambda}_1$$

2.2　直交化つき同時反復法

- p 本の固有ベクトルからなる不変部分空間と，p 個の固有値を求める．

＜アルゴリズム＞

$\mathrm{Z}_{\boldsymbol{0}}$: n×p　列直交行列

do　i=1,2,···

　$\mathrm{Y}_{\boldsymbol{i}} := \mathrm{AZ}_{\boldsymbol{i-1}}$

　$\mathrm{Y}_{\boldsymbol{i}} \longrightarrow \mathrm{Z}_{\boldsymbol{i}}\mathrm{R}_{\boldsymbol{i}}$ (QR 分解)

end　do

性質

$$\mathrm{span}(\mathrm{Z}_{\boldsymbol{i}}) \longrightarrow \mathrm{span}\{\boldsymbol{s_1},\boldsymbol{s_2},\cdots,\boldsymbol{s_p}\}$$

ここで，

$$\mathrm{span}(\mathrm{Z}_{\boldsymbol{i}}) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{z_{i1}},\boldsymbol{z_{i2}},\cdots,\boldsymbol{z_{ip}}\}$$

$$\begin{aligned}&\mathrm{span}\{\boldsymbol{s_1},\boldsymbol{s_2},\cdots,\boldsymbol{s_p}\}\\ &\quad = \{\sum_{i=1}^{p}\mathrm{c}_{\boldsymbol{i}}\boldsymbol{s_i}|\mathrm{c}_{\boldsymbol{i}}\in\mathrm{R}\}\end{aligned}$$

$\mathrm{Z}_{\boldsymbol{i}}^*\mathrm{AZ}_{\boldsymbol{i}}$ が，固有値 $\boldsymbol{\lambda_1},\boldsymbol{\lambda_2},\boldsymbol{\lambda_3},\cdots,\boldsymbol{\lambda_p}$ を対角要素とする上三角行列に収束する．

$$\begin{pmatrix}\boldsymbol{\lambda_1} & & & \boldsymbol{*}\\ & \boldsymbol{\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ \boldsymbol{O} & & & \boldsymbol{\lambda_p}\end{pmatrix}$$

解析

$$\begin{aligned}\mathrm{span}(\mathrm{Z}_{\boldsymbol{i}}) &= \mathrm{span}(\mathrm{Y}_{\boldsymbol{i}})\\ &= \mathrm{span}(\mathrm{AZ}_{\boldsymbol{i-1}})\\ &\vdots\\ &= \mathrm{span}(\mathrm{A}^{\boldsymbol{i}}\mathrm{Z}_{\boldsymbol{0}})\\ &= \mathrm{span}(\mathrm{S}\boldsymbol{\Lambda}^{\boldsymbol{i}}\mathrm{S}^{\boldsymbol{-1}}\mathrm{Z}_{\boldsymbol{0}})\end{aligned}$$

上記の変形は以下の理由で可能となっている．

$\mathrm{A}\boldsymbol{s_i}=\boldsymbol{\lambda_i}\boldsymbol{s_i}\Rightarrow\mathrm{A}=\mathrm{S}\boldsymbol{\Lambda}\mathrm{S}^{\boldsymbol{-1}}$ より

$\mathrm{A}^{\boldsymbol{i}}=\mathrm{S}\boldsymbol{\Lambda}^{\boldsymbol{i}}\mathrm{S}^{\boldsymbol{-1}}$

ここで，

$\mathrm{S}\boldsymbol{\Lambda}^{\boldsymbol{i}}\mathrm{S}^{\boldsymbol{-1}}\boldsymbol{Z_0}$

$=\mathrm{S}\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{p}}^{\boldsymbol{i}}\boldsymbol{B}\mathrm{S}^{\boldsymbol{-1}}\boldsymbol{Z_0}$

$$\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix}(\frac{\boldsymbol{\lambda_1}}{\boldsymbol{\lambda_p}})^{\boldsymbol{p}} & & & & \boldsymbol{*}\\ & \ddots & & & \\ & & \mathbf{1} & & \\ & & & \ddots & \\ \boldsymbol{O} & & & & (\frac{\boldsymbol{\lambda_n}}{\boldsymbol{\lambda_p}})^{\boldsymbol{p}}\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{B}\mathrm{S}^{-1}\boldsymbol{Z_0} \equiv \begin{bmatrix} \boldsymbol{V_i} \\ \boldsymbol{W_i} \end{bmatrix}$$

すると　$\boldsymbol{W_i} \to \boldsymbol{0} \quad (\boldsymbol{i} \to \infty)$

(なぜなら $\boldsymbol{W_i}$ は $\boldsymbol{S^{-1}Z_0}$ の下部の $\boldsymbol{n-p}$ 行に $(\frac{\boldsymbol{\lambda_{p+1}}}{\boldsymbol{\lambda_p}})^{\boldsymbol{i}}, \ldots, (\frac{\boldsymbol{\lambda_n}}{\boldsymbol{\lambda_p}})^{\boldsymbol{p}}$ をかけたもの)

そこで

$$\boldsymbol{S} = [\mathrm{s}_1, \mathrm{s}_2, \ldots, \mathrm{s}_p, \mathrm{s}_{p+1}, \ldots, \mathrm{s}_n]$$

$$= [\underbrace{\boldsymbol{S_p}}_{\mathrm{p}}\ ,\ \underbrace{\boldsymbol{\hat{S}_p}}_{\mathrm{n\text{-}p}}] \text{ とおくと}$$

$$\boldsymbol{S\Lambda^i S^{-1} Z_0} = \boldsymbol{\lambda_p^i} \begin{bmatrix} \boldsymbol{S_p} & \boldsymbol{\hat{S}_p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{V_i} \\ \boldsymbol{W_i} \end{bmatrix}$$

$$= \boldsymbol{\lambda_p^i}(\boldsymbol{S_p V_i} + \underbrace{\boldsymbol{\hat{S}_p W_i}}_{\to \boldsymbol{0}})$$

$$\to \boldsymbol{\lambda_p^i S_p V_i}$$

以上より

$$\mathbf{span}(\boldsymbol{Z_i}) \to \mathbf{span}(\boldsymbol{S_p V_i})$$

$$= \mathbf{span}(\boldsymbol{S_p})$$

$$= \mathbf{span}\{\mathrm{s}_1, \mathrm{s}_2, \ldots, \mathrm{s}_p\}$$

$\boldsymbol{A_i} \equiv \boldsymbol{Z_i^* A Z_i}\ ,\ \boldsymbol{Z_i} = [\boldsymbol{Z_{1i}}\ ,\ \boldsymbol{Z_{2i}}]$　とすると

$$\boldsymbol{A_i} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{Z_{1i}^*} \\ \boldsymbol{Z_{2i}^*} \end{bmatrix} \boldsymbol{A} \begin{bmatrix} \boldsymbol{Z_{1i}} & \boldsymbol{Z_{2i}} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \boldsymbol{Z_{1i}^* A Z_{1i}} & \boldsymbol{Z_{1i}^* A Z_{2i}} \\ \underbrace{\boldsymbol{Z_{2i}^* A Z_{1i}}}_{= \boldsymbol{0}} & \boldsymbol{Z_{2i}^* A Z_{2i}} \end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{Z_i}$ は A の不変部分空間に収束するから

$$\mathbf{span}(\boldsymbol{A Z_{1i}}) = \mathbf{span}(\boldsymbol{Z_{1i}})$$

これは $\boldsymbol{Z_{2i}}$ と直交

$\boldsymbol{A_i}$ は上三角行列に収束

$$\boldsymbol{A_\infty} \equiv \mathbf{lim}_{i\to\infty} \boldsymbol{A_i}$$

$$\boldsymbol{Z_\infty} \equiv \mathbf{lim}_{i\to\infty} \boldsymbol{Z_i}$$

$$\to \boldsymbol{A_\infty} \equiv \underbrace{\boxed{\boldsymbol{Z_\infty^* A Z_\infty} = \boldsymbol{R}}}_{\text{A の schur 分解}}$$

このとき R の対角要素は A の固有値

なぜなら

・固有値は相似変換で不変

・上三角行列の固有値は対角要素

(上三角行列の行列式は対角要素の積であることを使う)

2.3　QR **法**

同時反復法

$$\boldsymbol{Y_{i+1}} = \boldsymbol{A Z_i}$$

$$\boldsymbol{Y_{i+1}} \to \boldsymbol{Z_{i+1} R_{i+1}} \quad \text{より}$$

$$\text{ここで} \quad \boldsymbol{A_i} \equiv \boldsymbol{Z_i^* A Z_i} \quad \text{とおく}$$

$$\text{すると} \quad \boldsymbol{A Z_i} = \boldsymbol{Z_{i+1} R_{i+1}} \quad \text{より}$$

$$\boldsymbol{R_{i+1}} = \boldsymbol{Z_{i+1}^* A Z_i}$$

$$\boldsymbol{A_i} = \boldsymbol{Z_i^* A Z_i}$$

$$= \underbrace{\boldsymbol{Z_i^* Z_{i+1}}}_{\boldsymbol{Q_{i+1}}} \boldsymbol{R_{i+1}} \quad \text{(A の QR 分解)}$$

$$\boldsymbol{A_{i+1}} = \boldsymbol{Z_{i+1}^* A Z_{i+1}}$$

$$= \boldsymbol{Z_{i+1}^* A Z_i} \cdot \boldsymbol{Z_i^* Z_{i+1}}$$

$$= \boldsymbol{R_{i+1} Q_{i+1}}$$

QR **法**

＜アルゴリズム＞

$\boldsymbol{A_i} = \boldsymbol{A}$

do　$\boldsymbol{i} = \boldsymbol{1}, \boldsymbol{2}, \cdots$

　$\boldsymbol{A_i} \to \boldsymbol{Q_i R_i}$

　$\boldsymbol{A_{i+1}} = \boldsymbol{R_i Q_i}$

end do