応用数理工学特論：6 月 19 日講義ノート

担当：打田裕樹，山家慎一朗

2008 年 7 月 2 日

1　QR 法の収束定理

A_i は上三角行列に収束し，対角要素は λ_1，λ_2，...，λ_n となる．A_i は第（k，j）要素 a^i_{kj}（$j<k$）は，収束率 $\frac{|\lambda_k|}{|\lambda_j|}$（$<1$）で 0 に収束．($a^i_{kj}\approx(\frac{|\lambda_k|}{|\lambda_j|})^i$)

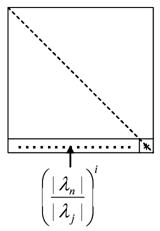


図 1　QR 法の収束定理

もし，$|\lambda_n|\ll 1$ ならば $\frac{|\lambda_n|}{|\lambda_j|}\ll 1$，$(\frac{|\lambda_n|}{|\lambda_j|})^i$ は極めて速く 0 に近づく．よって，QR 法は絶対値最小の固有値が 0 に近いほど早く収束する．いま，λ_n の近似値 σ_i がわかっているとすると，$A_i-\sigma_i I$ の絶対値最小固有値は 0 に近い．

2　シフト付き QR 法

$A_0=A$

do　i=0,1,2,$\cdots$

（λ_n の近似値 σ_i を何らかの方法で計算）

$A_i-\sigma_i I\rightarrow Q_iR_i$

（全固有値を σ_i だけ小さくする）

A_{i+1}=R_iQ_i+σ_iI

（全固有値を元に戻す）

end　do

⇒ 収束が加速

2.1　シフト σ_i の選び方

A_i の第（n，n）要素を σ_i とする．この要素は λ_n に収束するので，途中段階でも良い近似値になっていると期待される．

2.2　減次（デフレーション）

シフト付き QR 法より

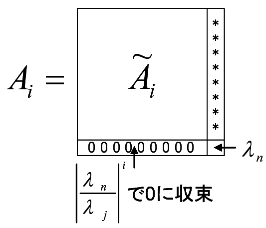


図 2　減次 (デフレーション)

$\tilde{A}_i$ の固有値= $\{\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_{n-1}\}$
det($A_i-\lambda I$)=($\lambda_n-\lambda$)det($\tilde{A}_i$-λI_{n-1})

この 1 つ上の式は，左辺も右辺も $\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_n$ が零点ですが，右辺は最初の因子が λ_n を零点に持つので，残りの因子である det($\tilde{A}_i$-λI_{n-1}) が $\lambda_1,\lambda_2,...,\lambda_{n-1}$ を零点に持つのだ

今度は (n-1) × $(n-1)$ 行列 $\tilde{A}_i$ に対して，シフト付きの QR 法を適用すればよい．

3　密行列に対する QR 法

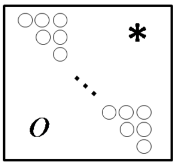
シフト付き QR 法では 4 回程度の反復で 1 個の固有値が求まる．

$\boldsymbol{A_i\rightarrow Q_iR_i}$ の演算量は $\boldsymbol{O(n^3)}$

$\boldsymbol{A_{i+1}\rightarrow R_iQ_i}$ の演算量は $\boldsymbol{O(n^3)}$

⇒全固有値を求める演算量は $\boldsymbol{O(n^4)}$

ベッセンベルグ形の利用

$A_i =$ 

Givens 回転

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} x\cos\theta - y\sin\theta \\ \boxed{x\sin\theta + y\cos\theta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

これが 0 になるよう θ を選ぶ.

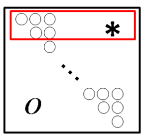
$$\Leftrightarrow \qquad x\sin\theta + y\cos\theta = 0 \qquad (2)$$

$$\frac{\sin\theta}{\cos\theta} = -\frac{y}{x} \qquad (3)$$

$$\theta = \tan^{-1}(-\frac{y}{x}) \qquad (4)$$

$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$ を $n \times n$ に拡大

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & & & \boldsymbol{O} \\ -\sin\theta & \cos\theta & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ \boldsymbol{O} & & & & 1 \end{pmatrix} = G_i(\text{直交行列})$$

$\underbrace{G_{n-1}\ldots G_3 G_2 G_1}_{Q^T(\text{直交行列})} A_i =$ 

1 回の Givens 回転は 2 行のみに作用

演算量 $O(n)$

上三角化の演算量は $O(n^2)$

$R_i = G_{n-1} \cdots G_3\ G_2\ G_1 A_i$

$A_{i+1} = R_i Q_i = R_i\ G_1^T\ G_2^T \cdots G_{n-1}^T$

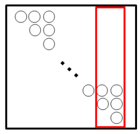
$R_i G_1^T G_2^T \ldots G_{n-1}^T =$ 

図 3　ヘッセンベルグ行列

1 回の Givens 回転は 2 列のみに作用

演算量 $O(n)$

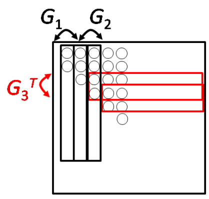
$R_i Q_i$ を求める演算量は $O(n^2)$

$\Rightarrow$ 全固有値を求める演算量は $O(n^3)$

4　マルチシフト QR 法

・複数 (m 個) の固有値を同時に求める.

・QR 法の複数ステップを同時に実行



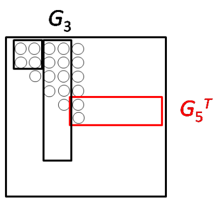
左　　右

G_3^T と G_1 は同時に作用可能

G_4^T と G_2 は同時に作用可能

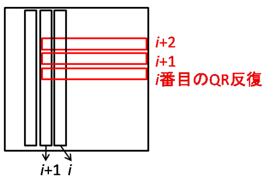
$\vdots$

G_{n-1}^T と G_{n-3} は同時に作用可能



この領域は QR 反復終了後の状態になっている

$\Rightarrow$ これらの要素の使って次の QR 反復の Givens 回転を決められる



1 つ前の反復で使ったデータがキャッシュに残っている．それを次の反復がすぐ使う.