

情報数学C

Mathematics for Informatics C

第10回 行列の固有値計算
(べき乗法, ハウスホルダー変換, QR法)

情報メディア創成学類
藤澤誠

今回の講義内容

- 今日の問題
- べき乗法
- ハウスホルダー変換
- QR法

今回の講義で解く問題

$$Av = \lambda v$$

を満たす λ と v
(ただし $v \neq 0$)

今回の講義で解く問題

固有値(eigen value)と固有ベクトル(eigen vector)
を求める問題(固有値問題)

$n \times n$ の正方行列 A について

$$Av = \lambda v \quad (v \neq 0)$$

を満たすスカラー値 λ とベクトル v を求めよ.

λ : 行列 A の固有値
 v : 行列 A の固有ベクトル

$n \times n$ の正方行列 A は重複&値がゼロのものを含めて
 n 個の固有値(とそれに対応する n 個の固有ベクトル)
を持つ

今回の講義で解く問題

固有値問題を数学的に解いてみよう

$n \times n$ の正方行列 A について: $A\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}$

単位行列を I とすると式を変形して,

$$(A - \lambda I)\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$$

前提条件で \boldsymbol{v} がゼロベクトルでない($\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$)としているが、もし、行列 $(A - \lambda I)$ の逆行列が存在してしまうと、

$$(A - \lambda I)^{-1}(A - \lambda I)\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$$

$$\implies \boldsymbol{v} = \mathbf{0}$$

となり、 \boldsymbol{v} がゼロベクトルになってしまう。よって $(A - \lambda I)$ には逆行列が存在しない、つまり、**行列式が0になる。**

今回の講義で解く問題

固有値問題を数学的に解いてみよう

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

この式の行列式を展開すると:

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

⇩ n 次の多項式になる

$$\lambda^n + c_1 \lambda^{n-1} + \cdots + c_{n-1} \lambda + c_n = 0$$

これを**特性方程式**と呼び, この**多項式**を解くことで **n 個の固有値**が得られ, 得られた λ を **$Av = \lambda v$** に代入することで**固有ベクトル v** が得られる.

今回の講義で解く問題

例) 行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$ の固有値と固有ベクトルを求めよ.

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 1 - \lambda & 4 \\ 3 & 2 - \lambda \end{vmatrix} = (1 - \lambda)(2 - \lambda) - 3 \times 4$$

↙ 展開して整理

$$\lambda^2 - 3\lambda - 10 = 0$$

⇓ 因数分解

$$(\lambda + 2)(\lambda - 5) = 0$$

$$\underline{\text{固有値 } \lambda = -2, 5}$$

$$A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \Rightarrow (A - \lambda I)\mathbf{v} = 0 \text{ より}$$

$$\lambda = -2 \text{ について}$$

$$\begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$3v_1 + 4v_2 = 0 \Leftrightarrow \mathbf{v} = \begin{pmatrix} -4 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\lambda = 5 \text{ について}$$

$$\begin{pmatrix} -4 & 4 \\ 3 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$-v_1 + v_2 = 0 \Leftrightarrow \mathbf{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

⇒ 固有ベクトルを定数倍したのもも固有ベクトル

今回の講義で解く問題

固有値/固有ベクトルって何？

$Av = \lambda v$ という定義から考えると、
「ベクトル v を行列 A で線形変換したときに、変換した結果のベクトルの向きは変わらず、スカラー倍 (λ 倍) しただけのベクトルになる」ときにベクトル v を固有ベクトルという。

先ほどの例だと

$\lambda = 5, v = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ の場合

$$Av = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 5 \end{pmatrix} = 5v$$

⇒ 行列 A を固有ベクトルにかけても **方向は変わっていない**

今回の講義で解く問題

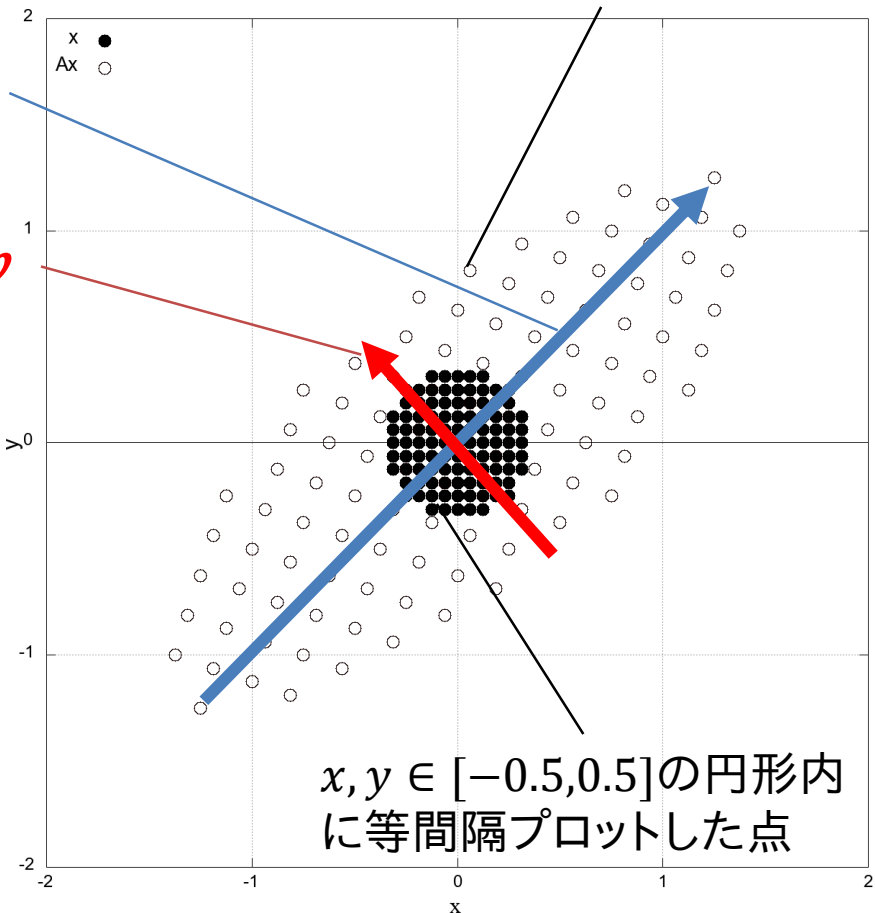
$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$ で実際に線形変換してみると…

$\lambda = 5, v = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ でのベクトル λv

$\lambda = -2, v = \begin{pmatrix} -4 \\ 3 \end{pmatrix}$ でのベクトル λv

固有ベクトルと固有値(の絶対値)は変換した点の分布における長い方向と短い方向,そして、それぞれの長さを示している。

(x, y)に行列Aを掛けた結果

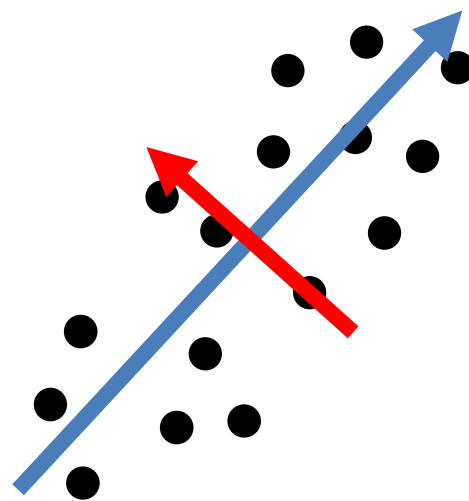


今回の講義で解く問題

固有値/固有ベクトルって何？

計測等で得られた点の分布を形成する
線形変換行列 M が求められれば、

- 行列 M の最大/最小固有値の絶対値は分布の一番長い/短い長さを示す
- 対応する固有ベクトルは長い方向/短い方向を示す



分布がどのようなになっているのかを調べられる

⇒ 主成分分析(PCA:Principal Component Analysis)と呼ぶ
(行列 M には共分散行列が使われることが多い)

今回の講義で扱う問題

固有値/固有ベクトルはどんなところで使われる？

自然現象, 工学モデルが行列の形で表されたときの安定性解析や特徴解析に使われる.

統計

得られた多次元データの固有値・固有ベクトルから主成分を調べるために用いられる(主成分分析:PCA). グラフ理論やマルコフ連鎖などでも固有値は使われる

画像処理・CG・シミュレーション

周囲の画素間の共分散行列の固有値を用いたテクスチャ特徴解析や固有ベクトルを用いた点群の局所座標設定(対称行列なら固有ベクトルが直交するので), 粒子法における楕円体カーネルの計算などなど

固有値/固有ベクトルで何かの問題を解くというよりは, システムの**解析**や特性を調べての**高速化/効率化***に使われる.

*高次元のデータを固有値が高い方向のみ残して低次元化することで高速化する(次元削減)など

今回の講義で解く問題

今回の講義資料における注意点

- いつもはプログラムとの整合性のために、0スタートの添え字を使っているが、今回は数学的な数式変形が多いので**1スタートの添え字をほとんどのところで使っている**ことに注意

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$n \times n$ 行列の表記の例
添え字(インデックス)が1から始まり n で終わる

固有値の数値計算法

固有値を数値計算で求める方法

- 対角化, 直交ベクトルを上手く使うことで固有値を求める
⇒ **べき乗法**
- 特性方程式を2分法とかDKAで解けば良いのでは?
⇒ 行列が大きいと計算時間的に厳しい
 - 解きやすい形に行列を変形してやる
⇒ **ハウスホルダー変換**
 - ハウスホルダー変換を使って, 行列を直交行列 Q と上三角行列 R に分解して固有値を求める
⇒ **QR法**

べき乗法

べき乗法 は対角化可能な行列について最大固有値とそれに対応する固有ベクトルを求める方法

⇒ すべての固有値を求めるものではないけど、最大固有値だけがほしいときには効率的

⇒ まずは行列の対角化の方法とその意味を復習しよう!

行列の対角化とは?

$n \times n$ の正方行列 A に対して、正則な行列 P を $P^{-1}AP$ と前後から掛けたときに、 $P^{-1}AP$ が対角行列になる場合を対角化と呼ぶ

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_n \end{pmatrix} = D$$

べき乗法

対角化できると**何が良い**のか？

⇒ 行列の累乗計算が簡単になる

($n \times n$ 行列 A の m 乗(A^m)の計算コストは $O(mn^3)$)

$$(P^{-1}AP)^m = P^{-1}AP \underline{P^{-1}AP} \cdots P^{-1}AP$$

単位行列 I になる

$$(P^{-1}AP)^m = P^{-1}A^mP$$



$$A^m = PD^mP^{-1}$$

対角行列 D の m 乗は**対角要素をそれぞれ m 乗すれば良い**だけなので、
計算コストは $O(mn)$, P, P^{-1} の計算コストを加えても $O(2n^3) + O(mn)$
で m が大きいときほど効率的

べき乗法

対角化と固有値の関係

$P^{-1}AP = D$ を変形すると

$$AP = P \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

行列 P の各列成分を $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n$ とすると(つまり $P = (\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \cdots \mathbf{p}_n)$)

$$\underline{A\mathbf{p}_i = \lambda_i \mathbf{p}_i}$$

固有値の定義式 $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ と全く同じ形

⇒ A の固有ベクトル \mathbf{v}_i を縦ベクトルとして並べた行列を P とすると,
 $P^{-1}AP$ は A の固有値を対角成分に持つ対角行列になる

べき乗法

対角化可能な行列の条件は？

固有ベクトルを並べた行列 P が正則である

⇒ 行列 A の固有ベクトル v_1, v_2, \dots, v_n が**線形独立**である*

- $n \times n$ の行列 A が **n 個の重複しない固有値を持つ**場合は、異なる固有値の固有ベクトルはすべて線形独立なので**対角化可能**

⇒ n 個の固有値を $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ (絶対値が大きい順)とすると以下が成り立つ

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > \dots > |\lambda_n|$$

- 行列 A が重複する固有値を持つと**対角化不可能な場合がある**

⇒ これらから**べき乗法**のアルゴリズムを導いてみよう

*行列 P が正則ならば、その列ベクトルは互いに線形独立という定理を使っている。 17

べき乗法

行列 A が対角化可能ならば, 線形独立な固有ベクトルを使って, あるベクトル $\boldsymbol{x}^{(0)}$ を任意の定数ベクトル $\boldsymbol{c} = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$ を使って表せる

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{(0)} &= c_1 \boldsymbol{v}_1 + c_2 \boldsymbol{v}_2 + \dots + c_n \boldsymbol{v}_n \\ &= P \boldsymbol{c}\end{aligned}$$

(\boldsymbol{v}_i が線形独立でない $\boldsymbol{x}^{(0)}$ になる係数列 \boldsymbol{c} が唯一定まらない)

$\boldsymbol{x}^{(0)}$ に行列 A を掛けたものを $\boldsymbol{x}^{(1)}$ とすると

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{(1)} &= A \boldsymbol{x}^{(0)} = A P \boldsymbol{c} = P P^{-1} A P \boldsymbol{c} = P \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} \boldsymbol{c} \\ &= \lambda_1 c_1 \boldsymbol{v}_1 + \lambda_2 c_2 \boldsymbol{v}_2 + \dots + \lambda_n c_n \boldsymbol{v}_n\end{aligned}$$

ということは同様にすれば $\boldsymbol{x}^{(2)}$ は

$$\boldsymbol{x}^{(2)} = \lambda_1^2 c_1 \boldsymbol{v}_1 + \lambda_2^2 c_2 \boldsymbol{v}_2 + \dots + \lambda_n^2 c_n \boldsymbol{v}_n$$

べき乗法

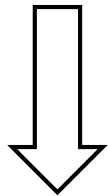
k 回繰り返すと

$$\mathbf{x}^{(k)} = \lambda_1^k c_1 \mathbf{v}_1 + \lambda_2^k c_2 \mathbf{v}_2 + \cdots + \lambda_n^k c_n \mathbf{v}_n$$

A が対角化可能ならば $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots$ であるので、 $\lambda_1 \neq 0$ ($\lambda_1 = 0$ だと重複しない固有値が n 個存在しないことになるので)。

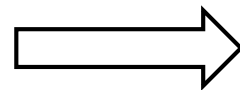
また、 $c_1 \neq 0$ とすると:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \lambda_1^k c_1 \left\{ \mathbf{v}_1 + \underbrace{\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k}_{\text{この部分}} \frac{c_2}{c_1} \mathbf{v}_2 + \cdots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k \frac{c_n}{c_1} \mathbf{v}_n \right\}$$



この部分に注目すると $|\lambda_1| > |\lambda_2|$ より、 $\lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k = 0$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \lambda_1^k c_1 \mathbf{v}_1$$



固有ベクトルを定数倍したのも固有ベクトル

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{v}_1$$

べき乗法

べき乗法(power method)

適当な初期値 $x^{(0)}$ から

$$x^{(k+1)} = Ax^{(k)}$$

により x を更新していくと, 絶対値最大固有値 λ_1 の固有ベクトル v_1 が得られる

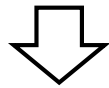
初期値はどう設定する?

- $c_1 \neq 0$ ならなんでもよいが, $\lambda_1^k c_1$ 倍されることになるので $\lambda_1 > 1$ だと $x^{(k)}$ が大きくなりすぎる可能性がある.
 - ⇒ 固有ベクトルは定数倍OKなので $|x^{(k)}| = 1$ となるように
毎ステップ正規化する
 - ⇒ 当然**初期値も** $|x^{(0)}| = 1$ となるようにする(間違ってもすべて0とかにしない)
 - ⇒ ちなみに $c_1 = 0$ となるように初期値設定されると v_2 以降が求まることあり

べき乗法

固有値 λ_1 は？

レイリー(Rayleigh)商というものを考えてやると固有値 λ_1 も計算可能



固有値の定義 $Av = \lambda v$ より

$$R(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x} \cdot A\mathbf{x}}{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}} \quad \Rightarrow \quad R(\mathbf{v}_1) = \frac{\mathbf{v}_1 \cdot A\mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1} = \frac{\mathbf{v}_1 \cdot \lambda_1 \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1} = \lambda_1$$

つまり、**毎反復**以下の式で**固有値が計算できる**

$$R(\mathbf{x}^{(k)}) = \frac{\mathbf{x}^{(k)} \cdot A\mathbf{x}^{(k)}}{\mathbf{x}^{(k)} \cdot \mathbf{x}^{(k)}} = \frac{\mathbf{x}^{(k)} \cdot \mathbf{x}^{(k+1)}}{\mathbf{x}^{(k)} \cdot \mathbf{x}^{(k)}} = \lambda^{(k)}$$

- 毎反復計算する必要はなさそう(最後の1回だけでよさそう)だけど、**収束判定**で $\lambda^{(k)}$ が必要なので**毎回計算する**。
- $\mathbf{x}^{(k+1)}$ は次ステップのために計算した値を使えば良い。
- $|\mathbf{x}^{(k)}| = 1$ と正規化されているなら実際は $\lambda^{(k)} = \mathbf{x}^{(k)} \cdot \mathbf{x}^{(k+1)}$ で計算できる

べき乗法

収束判定はどうする？

固有値の定義 $Av = \lambda v$ から $|Av_1 - \lambda_1 v_1| = 0$ となればよい。実際にはこの式の値が設定した閾値 ε より小さくなるまで繰り返すとすると収束判定は：

$$|Ax^{(k)} - \lambda^{(k)} x^{(k)}| < \varepsilon$$

計算コストを少しでも抑えるためにもう少し変形してみる。

平方根を使いたくないので両辺を2乗して**2乗距離で判定**するようにして、更に $x^{(k+1)} = Ax^{(k)}$ を代入する。

$$|x^{(k+1)} - \lambda^{(k)} x^{(k)}|^2 < \varepsilon^2$$

展開

$$|x^{(k+1)}|^2 - 2\lambda^{(k)} \underline{x^{(k+1)} \cdot x^{(k)}} + (\lambda^{(k)})^2 \underline{|x^{(k)}|^2}$$

$$|x^{(k+1)}|^2 - (\lambda^{(k)})^2 < \varepsilon^2$$

収束条件

前ページの式から

$$x^{(k+1)} \cdot x^{(k)} = \lambda^{(k)} |x^{(k)}|^2$$

毎ステップ $|x^{(k)}| = 1$ となるように正規化している

べき乗法

べき乗法の計算手順

1. 初期値 $\mathbf{x}^{(0)}$ を設定
2. 以下の手順を収束するまで繰り返す ($k = 0, 1, 2, \dots$)
 - a. $\mathbf{x}^{(k)}$ を $|\mathbf{x}^{(k)}| = 1$ となるように正規化: $\mathbf{x}^{(k)} \leftarrow \mathbf{x}^{(k)} / |\mathbf{x}^{(k)}|$
 - b. $\mathbf{x}^{(k+1)} = A\mathbf{x}^{(k)}$ を計算
 - c. k ステップ目の固有値 $\lambda^{(k)}$ を計算: $\lambda^{(k)} = \mathbf{x}^{(k)} \cdot \mathbf{x}^{(k+1)}$
 - d. $\left| |\mathbf{x}^{(k+1)}|^2 - (\lambda^{(k)})^2 \right| < \varepsilon^2$ なら反復終了

実際のコードでは2-dでの $|\mathbf{x}^{(k+1)}|^2$ を変数に格納しておいて次ステップに使う

べき乗法

べき乗法のコード例

行列Aが2次元配列に格納され, 初期値 x (正規化していない)が引数で与えられる

```
vector<double> x1(n); // v^(k+1)格納用
double l2 = dot(x, x, n), e;
int k;
for(k = 0; k < max_iter; ++k){
    // |x^(k)|=1となるように正規化
    double l = sqrt(l2); // |x^(k)|の計算
    x = mul_sv(1.0/l, x, n); // |x^(k)|で割る(1/|x|を掛ける)

    // x^(k+1) = A x^(k)の計算
    x1 = mul_mv(A, x, n);

    // 固有値λの計算(|x^(k)|=1で正規化されていることが前提)
    lambda = dot(x, x1, n);

    // 収束判定
    l2 = dot(x1, x1, n);
    if((e = fabs(l2-lambda*lambda)) < eps*eps) break;

    x = x1;
}
```

初期値の正規化用に $|x^{(0)}|^2$ を計算しておく

$x^{(k)}$ の正規化. `mul_sv()`はベクトルにスカラー値を掛ける関数

$x^{(k)}$ の更新: $x^{(k+1)} = Ax^{(k)}$. `mul_mv()`は行列とベクトルの積を計算する関数

$\lambda^{(k)}$ の計算. 正規化されている($|x^{(k)}|^2 = 1$)ので $R(x^{(k)})$ の分子の計算のみで良いことに注意

収束判定. $|x^{(k+1)}|^2$ は次のステップの処理のために変数に格納しておこう. `dot()`はベクトル同士の内積を計算する関数

べき乗法

べき乗法の実行結果例

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 5 & 3 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{array}{l} \text{固有値 } \lambda = 5, 2, 0 \\ \text{固有ベクトル } v = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 8 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix} \end{array}$$

許容誤差 $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$, 初期値 (1, 1, 1)

```
0 : lambda = 5.3333333, v = 0.57735027, 0.57735027, 0.57735027
1 : lambda = 5.2830189, v = 0.29138576, 0.38851434, 0.87415728
2 : lambda = 5.1333333, v = 0.18257419, 0.36514837, 0.91287093
3 : lambda = 5.0555556, v = 0.14213381, 0.35533453, 0.92386977
4 : lambda = 5.0225207, v = 0.12649735, 0.35138154, 0.92764726
  : (省略)
15 : lambda = 5.000001, v = 0.11624807, 0.34874303, 0.92998102
16 : lambda = 5.0000004, v = 0.11624781, 0.34874296, 0.92998107
lambda_max = 5.0000004
v = 0.11624771, 0.34874293, 0.92998109
iter = 16, eps = 5.3974301e-07
```

17回の反復で処理終了

正解の最大固有値の固有ベクトルを正規化すると $v = \begin{pmatrix} 0.11624764 \\ 0.34874292 \\ 0.92998111 \end{pmatrix}$ なので、
最大固有値/固有ベクトルともに 10^{-6} の精度まで求められている。

固有値の数値計算法

固有値を数値計算で求める方法

- 対角化, 直交ベクトルを上手く使うことで固有値を求める
⇒ **べき乗法**
- 特性方程式を2分法とかDKAで解けば良いのでは?
⇒ 行列が大きいと**計算時間的に厳しい**
- **解きやすい形に行列を変形してから求根問題として解く**
⇒ **ハウスホルダー変換**
- ハウスホルダー変換を使って, 行列を直交行列 Q と上三角行列 R に分解して固有値を求める
⇒ **QR法**

相似変換

行列Aの対角化を思い出してみよう

$$P^{-1}AP = D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

「対角行列の固有値=対角成分」である*ので、
対角行列Dの固有値は行列Aと同じ($\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$)

行列Aを対角化すれば固有値は簡単に求まる？

⇒ 固有値を変えない対角化のために固有値・固有ベクトルが必要
⇒ 「卵が先か鶏が先か」という状況になってしまう**

対角化まで行かなくても**固有値が求めやすい形に、**
(固有値を変えないように)行列Aを變形できないか？

* $\det(A - \lambda I) = 0$ が $(\lambda_1 - \lambda)(\lambda_2 - \lambda) \cdots (\lambda_n - \lambda) = 0$ となるので $\lambda = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$

**対称行列限定だけど対角化までしてしまうヤコビ法という方法もある

相似変換

固有値を変えない行列の変換:相似変換

行列 A をある正則行列 P を用いて $P^{-1}AP$ と変換したとき、 A と $P^{-1}AP$ の固有値は等しくなる*

証明: A と $P^{-1}AP$ の特性方程式が一致すれば固有値は等しい

$$\begin{aligned}\det(P^{-1}AP - \lambda I) &= \det(P^{-1}AP - \lambda \underbrace{P^{-1}IP}_{P^{-1}P = I}) = \det(P^{-1}(A - \lambda I)P) \\ &= \det(P^{-1}) \det(A - \lambda I) \det(P) = \frac{1}{\det(P)} \det(P) \det(A - \lambda I) \\ &= \det(A - \lambda I)\end{aligned}$$

行列式の性質 $\det(AB) = \det(A) \det(B)$ より
行列式の性質 $\det(A^{-1}) = 1/\det(A)$ より

(証明終了)

どのような行列に変換すると良いのだろうか？

実際に 3×3 とかの行列の固有値を求めてみると分かるが、**非対角成分に0が多い**と固有値は求めやすい

相似変換

固有値が求めやすい行列の形は？

3 × 3の行列を例にすると：

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{特性方程式}} \det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} - \lambda \end{vmatrix}$$

この列を中心に行列式を余因子展開

$$(a_{11} - \lambda) \begin{vmatrix} a_{22} - \lambda & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} - \lambda \end{vmatrix} - a_{21} \begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{32} & a_{33} - \lambda \end{vmatrix} - a_{31} \begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} - \lambda & a_{23} \end{vmatrix}$$

$a_{21} = a_{31} = 0$ で後ろの2項が0になって消える. 更に $a_{32} = 0$ ならば,

$$(a_{11} - \lambda)(a_{22} - \lambda)(a_{33} - \lambda) = 0$$

となり, **対角成分** a_{11}, a_{22}, a_{33} が**固有値**ということになる.

0にした a_{21}, a_{31}, a_{32} は左下の非対角成分

⇒ **上三角行列の固有値は対角成分に等しい**

QR法

行列 A を直交行列 Q と上三角行列 R に分解することを **QR分解** と呼ぶ.

$$A = QR$$

直交行列は**逆行列=転置行列**となる行列のこと: $Q^{-1} = Q^T$
(この性質は結構重要なので覚えておこう)

今やりたいことは A の**相似変換**なので, 直交行列 Q で相似変換すると:

$$Q^T A Q = Q^T Q R Q = R Q$$

変換された結果は RQ だけど, この手順を**何度も繰り返すと**, $Q^T A Q$ は**上三角行列に収束する**ことが分かっている*.

QR法

k 回目の反復における行列を $A^{(k)}$ とすると

1. $A^{(k)}$ を $Q^{(k)}R^{(k)}$ に分解：

$$A^{(k)} = Q^{(k)}R^{(k)}$$

2. $R^{(k)}$ と $Q^{(k)}$ を逆に掛けて $A^{(k+1)} (= Q^T A Q)$ を計算：

$$A^{(k+1)} = R^{(k)}Q^{(k)}$$

この手順を繰り返すことで固有値を計算する方法を **QR法** と呼ぶ



QR法にはQR分解が必要

QR分解の方法にはいくつかある*がここではハウスホルダー変換を用いた方法を説明する(固有値を求める別の方法でも使うことが多いので)

ハウスホルダー変換

ハウスホルダー変換は鏡映を表す線形変換

右の図のように2つのベクトル x, y があるときに、 x と y を結ぶ線の垂直二等分線による鏡映変換を行列 H として表したい

$$x = Hy \quad \text{もしくは} \quad y = Hx$$

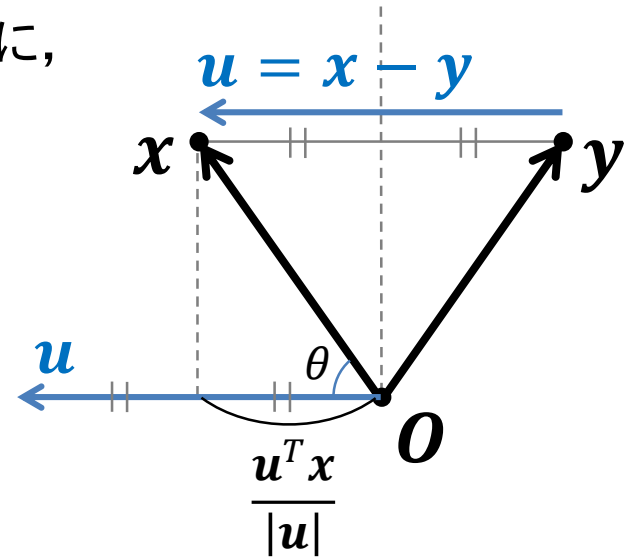
y から x へのベクトル $u = x - y$ を考え、それを右図のように原点 O に置くと x との間の角度は内積で表され、

$$u \cdot x = u^T x = |u||x| \cos \theta$$

ベクトル u の長さは元の定義から $|x| \cos \theta$ の2倍なので、 $2 \frac{u^T x}{|u|}$ になる。

u 方向の単位ベクトル $u/|u|$ を使うと $u = 2 \frac{uu^T}{|u|^2} x$ となる*ので、

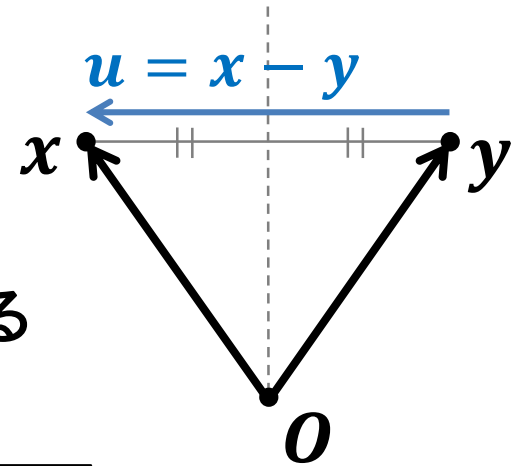
$$y = x - u = x - 2 \frac{uu^T}{|u|^2} x = \left(I - 2 \frac{uu^T}{|u|^2} \right) x = Hx$$



ハウスホルダー変換

ハウスホルダー行列 H による変換をハウスホルダー変換という

$$\text{ハウスホルダー行列} : H = I - 2 \frac{uu^T}{|u|^2}$$



- $x = Hy$ と $y = Hx$ のどちらも成り立つ
⇒ 同じ大きさの2ベクトルを入れ替えられる
- ハウスホルダー行列 H は対称行列

$$H^T = H$$

- ハウスホルダー行列 H は直交行列

$$u^T u = |u|^2$$

$$H^T H = H^2 = \left(I - 2 \frac{uu^T}{|u|^2} \right)^2 = I - 4 \frac{uu^T}{|u|^2} + 4 \frac{uu^T uu^T}{|u|^2 |u|^2} = I$$
$$\Rightarrow H^{-1} = H^T$$

ハウスホルダー変換は2つのベクトルの入れ替えを可能にする変換

⇒ 行列 A の1列目を $(b_{ii}, 0, 0, \dots, 0)^T$ というベクトルと入れ替えれば…

QR分解

ハウスホルダー変換を用いたQR分解

3 × 3の行列Aを試しにハウスホルダー変換でQR分解してみよう

$$A^{(0)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & a_{23}^{(0)} \\ a_{31}^{(0)} & a_{32}^{(0)} & a_{33}^{(0)} \end{pmatrix}$$

← 反復処理していくので上付きで反復回数をつけている. k 番目の反復では $A^{(k)}$

まずはこの列ベクトルを $(a_{11}^{(1)}, 0, 0)$ となるように変換する

$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} \\ a_{31}^{(0)} \end{pmatrix} \text{ と } \mathbf{y}_1 = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ という2つのベクトルを考える}$$

2つのベクトルの大きさを同じ $(|\mathbf{x}_1| = |\mathbf{y}_1|)$ にするために

$$a_{11}^{(1)} = |\mathbf{x}_1| = \sqrt{\left(a_{11}^{(0)}\right)^2 + \left(a_{21}^{(0)}\right)^2 + \left(a_{31}^{(0)}\right)^2} \quad \text{とする}$$

QR分解

x_1 と y_1 のハウスホルダー行列は, $u_1 = x_1 - y_1$ とすると

$$H^{(0)} = I - 2 \frac{(x_1 - y_1)(x_1 - y_1)^T}{|x_1 - y_1|^2} = I - 2\tilde{u}_1\tilde{u}_1^T$$

ここで $\tilde{u}_1 = \frac{x_1 - y_1}{|x_1 - y_1|}$

$H^{(0)}$ を $A^{(0)}$ に左から掛けると

$$A^{(1)} = H^{(0)}A^{(0)} = (\underbrace{H^{(0)}x_1}_{y_1} \quad H^{(0)}x_2 \quad \dots \quad H^{(0)}x_n)$$

↓

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} \end{pmatrix}$$

: 1列目の下部分が0になる形に変換できた

2列目以降の要素も値は変わっているので注意
(上付きの添え字が変わっていることに注意)

QR分解

2列目についても同じことを行う

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} \end{pmatrix}$$

変換すべきベクトルの次元が
1つ小さくなっていることに注意

$$\mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} a_{22}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)} \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{y}_2 = \begin{pmatrix} a_{22}^{(2)} \\ 0 \end{pmatrix} \quad H^{(1)} = I - 2\tilde{\mathbf{u}}_2\tilde{\mathbf{u}}_2^T, \quad \tilde{\mathbf{u}}_2 = \frac{\mathbf{x}_2 - \mathbf{y}_2}{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{y}_2|}$$

ハウスホルダー行列 H の大きさが 2×2 になっていることに注意.

$A^{(1)}$ の1列目は変えずに2列目以降に $H^{(1)}$ を掛けるには

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & h_{11}^{(1)} & h_{12}^{(1)} \\ 0 & h_{21}^{(1)} & h_{22}^{(1)} \end{pmatrix} A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix} = R$$

QR分解

$A \rightarrow R$ と変換してしまったが、やりたいことは $A = QR$ の変換
(こちらはイコールになっていることに注意)

$A^{(k)}$ の更新をまとめると:

$$A^{(1)} = H^{(0)} A^{(0)} \quad \Longrightarrow \quad A^{(0)} = (H^{(0)})^{-1} A^{(1)}$$

$$R = A^{(2)} = H^{(1)} A^{(1)} = H^{(1)} (H^{(0)} A^{(0)})$$

$$\Longrightarrow A^{(0)} = (H^{(0)})^{-1} (H^{(1)})^{-1} R$$

H は直交行列なので、 $Q = (H^{(0)})^T (H^{(1)})^T$ とすれば*

$$A^{(0)} = QR$$

QR分解できた!

実際には $H^{(1)}$ は $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & h_{11}^{(1)} & h_{12}^{(1)} \\ 0 & h_{21}^{(1)} & h_{22}^{(1)} \end{pmatrix}$ という形にしていたことに注意.

この行列も直交行列になる.

QR分解

$n \times n$ の場合でもやることは同じ.

QR分解の手順をまとめると:

1. 上三角行列 $R^{(0)}$ を A で初期化, 直交行列 $Q^{(0)}$ を単位行列で初期化: $R^{(0)} = A, Q^{(0)} = I$
2. 以下の手順を $k = 0 \sim n - 2$ まで繰り返す
 - a. ベクトル $\mathbf{x}_k = (R_{k,k}^{(k)}, R_{k+1,k}^{(k)}, \dots, R_{n-1,k}^{(k)})$ の大きさ $a_{k,k}^{(k+1)} = |\mathbf{x}_k|$ を計算
 - b. $\mathbf{y}_k = (a_{k,k}^{(k+1)}, 0, \dots, 0)^T$ を設定して, $\tilde{\mathbf{u}}_k = (\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k) / |\mathbf{x}_k - \mathbf{y}_k|$ を計算
(このときの $\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k, \mathbf{u}_k$ の要素数は $k \sim n - 1$ の $n - k$ 個)
 - c. ハウスホルダー行列 $H^{(k)} = I - 2\tilde{\mathbf{u}}_k \tilde{\mathbf{u}}_k^T$ を計算
 - d. $R^{(k+1)} = H^{(k)} R^{(k)}, Q^{(k+1)} = Q^{(k)} (H^{(k)})^T$ を計算

前スライドまでの $A^{(k)}$ を $R^{(k)}$ と書き換えている. また, このスライドではインデックスが0スタートになっているので注意

QR分解

QR分解のコード例

行列 R, Q, H 用の2次元配列($n \times n$)が確保され, 行列 A も2次元配列で与えられている

```
R = A; unit(Q, n); // Rを $A^{(0)}$ , Qを単位行列で初期化
```

```
vector<double> u(n, 0.0);
```

```
for(int k = 0; k < n-1; ++k){  
    //  $a_{kk}^{(k+1)}$ の計算 (ベクトル $x$ の大きさ)
```

```
    double akk = 0.0;
```

```
    for(int i = k; i < n; ++i){  
        akk += R[i][k]*R[i][k];
```

```
    }  
    akk = sqrt(akk);
```

```
    //  $u=(x_1-y_1)/|x_1-y_1|$ の計算
```

```
    double l = 0.0;
```

```
    for(int i = k; i < n; ++i){  
        u[i] = R[i][k]-(i == k ? akk : 0.0);  
        l += u[i]*u[i];
```

```
    }
```

```
    if(fabs(l) < 1e-10) break;
```

```
    l = sqrt(l);
```

```
    for(int i = k; i < n; ++i) u[i] /= l;
```

(次のページに続く)

$$a_{k,k}^{(k+1)} = |x_k| =$$

$$\sqrt{(R_{k,k}^{(k)})^2 + (R_{k,k+1}^{(k)})^2 + \dots + (R_{k,n-1}^{(k)})^2}$$
 の計算.

k が進むにつれてベクトルのサイズが小さくなっていくことに注意

(サイズ n の配列の後ろの方しか使わなくなる)

$\tilde{u}_k = (x_k - y_k)/|x_k - y_k|$ の計算. x_k, y_k は明示的に配列に格納せず, その値を直接計算している. ベクトルの正規化を忘れずに!

QR分解

QR分解のコード例(前ページからの続き)

行列 R, Q, H 用の2次元配列($n \times n$)が確保され, 行列 A も2次元配列で与えられている

```
// ハウスホルダーク行行列 $H^{(k)}$ の計算( $H=I-2uu^T$ )
unit(H, n); // Hを単位行列で初期化
for(int i = k; i < n; ++i){
    for(int j = k; j < n; ++j){
        H[i][j] -= 2*u[i]*u[j];
    }
}

//  $A^{(k+1)} = H^{(k)} A^{(k)}$ 
R = mul_mm(H, R, n);

//  $Q^{(k+1)} = Q^{(k)} (H^{(k)})^T$ 
Q = mul_mm(Q, transpose(H, n), n);
}
```

ハウスホルダーク行行列

$H^{(k)} = I - 2\tilde{u}_k \tilde{u}_k^T$ の計算.

unit()は単位行列を作る関数

$$R^{(k+1)} = H^{(k)} R^{(k)}$$

$$Q^{(k+1)} = Q^{(k)} (H^{(k)})^T$$

で上三角行列と直交行列を更新していく. mul_mm()は行列同士の積を計算する関数.

transpose()は転置行列を計算する関数

QR分解

QR分解の実行結果例

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 5 & 3 \end{pmatrix}$$

$$Q = \begin{pmatrix} 0.816497 & -0.492366 & 0.301511 \\ 0.408248 & 0.123091 & -0.904534 \\ 0.408248 & 0.86164 & 0.301511 \end{pmatrix}$$

$$R = \begin{pmatrix} 2.44949 & 3.67423 & 1.63299 \\ 9.37286e-16 & 4.06202 & 2.70801 \\ -5.73968e-16 & 0 & 1.11022e-16 \end{pmatrix}$$

$$QR = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -4.10615e-16 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 5 & 3 \end{pmatrix}$$

$$QQ = \begin{pmatrix} 1 & -5.55112e-17 & -8.32667e-17 \\ -5.55112e-17 & 1 & 1.66533e-16 \\ -8.32667e-17 & 1.66533e-16 & 1 \end{pmatrix}$$

⇐ チェック用に Q と R の積を計算

⇐ Q が直交行列になっているか
チェックするために QQ^T を計算

数値誤差はあるものの行列 A は直交行列 Q と上三角行列 R に分解できている

QR法

k 回目の反復における行列を $A^{(k)}$ とすると

1. $A^{(k)}$ を $Q^{(k)}R^{(k)}$ に分解：

$$A^{(k)} = Q^{(k)}R^{(k)}$$

2. $R^{(k)}$ と $Q^{(k)}$ を逆に掛けて $A^{(k+1)} (= Q^T A Q)$ を計算：

$$A^{(k+1)} = R^{(k)}Q^{(k)}$$

この手順を繰り返すことで固有値を計算する方法を **QR法** と呼ぶ

ハウスホルダー変換でQR分解が可能になったので
今度はQR法で固有値を求めてみよう！

QR法

QR法のコード例

行列 R, Q, H 用の2次元配列($n \times n$)が確保され, 行列 A も2次元配列で与えられている

```
vector< vector<double> > R(A), Q(A); // R, Q用配列を確保
vector<double> lambda(n, 0.0); // 収束判定用
double e;
int k;
for(k = 0; k < max_iter; ++k){
    // A^(k) ← Q^(k) R^(k)
    qr_decomposition(A, Q, R, n);

    // A^(k+1) ← R^(k) Q^(k)
    A = mul_mm(R, Q, n);

    // 収束判定
    e = 0;
    for(int i = 0; i < n; ++i) e += fabs(lambda[i]-A[i][i]);
    if(e/n < eps) break;

    for(int i = 0; i < n; ++i) lambda[i] = A[i][i];
}
```

$A^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)}$ と
 $A^{(k+1)} = R^{(k)} Q^{(k)} (= Q^T A Q)$
の計算

収束判定は前ステップの固有値
の値の差を使う

QR法

QR法の実行結果例

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 5 & 3 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{array}{l} \text{固有値 } \lambda = 5, 2, 0 \\ \text{固有ベクトル } v = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 8 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \end{pmatrix} \end{array}$$

許容誤差 $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$

```
0 : lambda = 4.16667, 2.83333, -1.39583e-16
1 : lambda = 5.33333, 1.66667, -7.98978e-17
2 : lambda = 5.20225, 1.79775, -7.98978e-17
3 : lambda = 5.08757, 1.91243, -7.98978e-17
4 : lambda = 5.03585, 1.96415, -7.98978e-17
   : (省略)
13 : lambda = 5.00001, 1.99999, -7.98978e-17
14 : lambda = 5, 2, -7.98978e-17
15 : lambda = 5, 2, -7.98978e-17
e = (5, 2, -7.98978e-17)
iter = 15, eps = 0
```

16回の反復で処理終了

べき乗法と反復回数自体はそんなに変わらないけど、3つすべての固有値が求まっている(ただし、毎反復QR分解をするので計算コストはこちらの方がずっと高い)

逆反復法

QR法で固有値が分かったけど固有ベクトルは？

べき乗法で求められる？

⇒ 最大固有値に対応する固有ベクトルのみ

行列 A の最小固有値を λ_{min} とすると、その逆行列 $B = A^{-1}$ の最大固有値は $1/\lambda_{min}$ となる*

⇒ 行列 $B = A^{-1}$ についてべき乗法を適用すると行列 A の最小固有値に対応する固有ベクトルが求められる

逆反復法

逆反復法を使って、 λ_i それぞれに対応するように行列 B を設定してやれば、すべての固有値の固有ベクトルが求められそう！

* $Av = \lambda v$ より $A^{-1}v = \frac{1}{\lambda}v$ となるため.

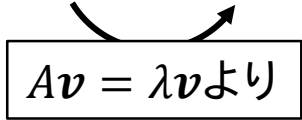
逆反復法

特性方程式の導出を思い出すと $(A - \lambda I)v = \mathbf{0}$ で $v = \mathbf{0}$ とならないために $\det(A - \lambda I) = 0$ とした.

⇒ QR法で求めた固有値は近似値なので、
正確には $(A - \lambda I)v = \mathbf{0}$ になっていない?

i 番目の固有値を λ_i として、その近似値を $\hat{\lambda}_i$ とすると

$$(A - \hat{\lambda}_i I)v_i = (\lambda - \hat{\lambda}_i)v_i \quad \Leftrightarrow \quad (A - \hat{\lambda}_i I)^{-1}v_i = \frac{1}{(\lambda - \hat{\lambda}_i)}v_i$$



$B = (A - \hat{\lambda}_i I)^{-1}$ とするとべき乗法で最大の $\frac{1}{(\lambda - \hat{\lambda}_i)}$ の時の固有ベクトルが求まる.

⇒ これが $\lambda = \lambda_i$ の時のものであればOK

逆反復法

i 番目の固有値の近似値 $\hat{\lambda}_i$ がその他の近似値よりも真値 λ_i に近いならば,

$$|\lambda_i - \hat{\lambda}_i| < |\lambda_j - \hat{\lambda}_i| \quad (i \neq j)$$

が成り立つので、べき乗法を使った場合、 $1/|\lambda_i - \hat{\lambda}_i|$ が行列 B の最大固有値となるので,

適当な初期値 $\mathbf{y}^{(0)}$ から

$$\mathbf{y}^{(k)} = B\mathbf{y}^{(k-1)} = (A - \hat{\lambda}_i I)^{-1} \mathbf{y}^{(k-1)}$$

により \mathbf{y} を更新していくと、固有値 λ_i の固有ベクトル $\mathbf{v}_i = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{y}^{(k)}$ が得られる

逆反復法

実際に解かないといけないのは

$$(A - \hat{\lambda}_i I) \mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{y}^{(k-1)}$$

という線形システムになる。

⇒ $(A - \hat{\lambda}_i I)$ の部分は k 反復中は変わらないので
予めLU分解しておき, 線形システムを $\mathbf{y}^{(k)}$ について解く

⇒ べき乗法と同じく $\mathbf{y}^{(k)}$ は毎ステップ正規化する

⇒ レイリー商 $R(\mathbf{y}^{(k)})$ で固有値 $1/|\lambda_i - \hat{\lambda}_i|$ が求まるので
その変化が閾値以下になったら反復終了(収束条件)とする

べき乗法を繰り返すだけなのでコード例は省略

QR法+逆反復法

QR法+逆反復法の実行結果例

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 & -2 \\ -2 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{array}{l} \text{固有値 } \lambda = 4, -2, 1 \\ \text{固有ベクトル } v = \begin{pmatrix} -2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix} \end{array}$$

許容誤差 $\varepsilon = 1 \times 10^{-6}$

```
Q = 0.333333 -0.666667 -0.666667  
     -0.666667 0.333333 -0.666667  
     -0.666667 -0.666667 0.333333
```

```
R = 3 -2 -0.666667  
     6.66134e-16 2 1.33333  
     5.55112e-16 0 1.33333
```

```
e = (4, -2, 1)
```

```
iter = 12, eps = 2.68221e-07
```

```
v1 = (-0.666667, 0.666667, 0.333333)
```

```
v2 = (0.666667, 0.333333, 0.666667)
```

```
v3 = (0.333333, 0.666667, -0.666667)
```

```
iter = 2, eps = 3.67933e-10
```

固有ベクトル

逆反復法ではLU分解(ピボット交換なし)を使ったので $(A - I\lambda)$ の対角が0になると解が求められないことあり. ちゃんとピボット交換を使おう.

(計算例の行列がここまでのものと違うのはそのせい)

QR法

QR法は反復内でQR分解を行うので**計算効率が良い**くない
⇒ **高速化手法**が提案されている

- **ウィルキンソンの移動法(原点シフト)**

$A^{(k)}$ の左下要素が0に近づくにつれて対角との値の差が大きくなり,収束しにくくなるということが発生する.

⇒ 対角要素でも絶対値が最小になるもの($\mu^{(k)}$)で減算して対角の値を小さくすれば良い

QR法の更新式を以下のように書き換えることで反復を減らす

$$\begin{aligned}A^{(k)} - \mu^{(k)}I &= Q^{(k)}R^{(k)} \\A^{(k+1)} &= R^{(k)}Q^{(k)} + \mu^{(k)}I\end{aligned}$$

QR法

QR法は反復内でQR分解を行うので**計算効率が良くない**
⇒ **高速化手法**が提案されている

- **ヘッセンベルグ行列**への変換

QR分解は n が大きくなると計算に時間が掛かるが, A を以下のようなヘッセンベルグ行列に変換してからQR法を適用すると, より高速にQR分解できることが分かっている.

$$H = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\ \mathbf{a_{2,1}} & a_{2,2} & a_{2,3} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2,n} \\ 0 & \mathbf{a_{3,2}} & a_{3,3} & \cdots & a_{3,n-1} & a_{3,n} \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \mathbf{a_{n-1,n-2}} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \mathbf{a_{n,n-1}} & a_{n,n} \end{pmatrix}$$

ヘッセンベルグ行列への変換はハウスホルダー変換やギブンス変換などでできる
⇒ ヘッセンベルグ行列を用いたQR法のコードはサンプルにも含まれている

その他の方法

その他の固有値計算方法

- 対称行列限定の方法
 - ハウスホルダー法

ハウスホルダー変換で三重対角行列に相似変換した後、特性方程式をDKA法や二分法+ニュートン法で解く方法。解のある範囲をGerschgorin(ゲルシュゴリン)の定理で求め、Sturm(スツルム)の定理で解が1つだけの範囲を判定、ニュートン法で根を求める

- ヤコビ法

回転行列を利用して、対称行列を対角行列になるまで相似変換して固有値を求める方法

⇒ ハウスホルダー法, ヤコビ法どちらもgithubのサンプルにも含まれているので気になる人はそちらも参照してください。

講義内容のまとめ

- 今日の問題：固有値, 固有ベクトル
- べき乗法
 - 最大固有値に対応する固有ベクトルを求める
 - レイリー商による固有値計算
- ハウスホルダー変換
 - 相似変換と固有値を求めやすい行列への変換
 - 鏡映変換を用いた相似変換
- QR法
 - 上三角行列へ変換することで固有値を簡単に求める
 - 逆反復法による固有ベクトル算出

講義全体を通して

今回でこの講義は終了です(レポートは残っているけど).
皆さんが今後他の講義や研究, 仕事などで出てきた
数式をどうやってコンピュータで実装しようか
と悩んだときに, この講義を思い出してくれると幸いです.

講義で示した例は比較的単純なものばかりですが,
複雑なものにも適用可能です.

大事なのはどの問題にどの方法を適用するか?
ということだと覚えておいてください.

Appendix

(以降のページは補足資料です)

線形独立と線形従属

ベクトルの集合 $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ に対して

$$c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n = 0$$

となる係数が $c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0$ 以外にないときそのベクトル集合は**線形独立**であるという。

逆に上の式の解に $c_i \neq 0$ となるものが1つでも含まれていたら、そのベクトル集合は**線形従属**であるという。

線形独立の場合は、あるベクトル x を

$$x = c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_n v_n$$

として表した場合、 (c_1, c_2, \dots, c_n) は**一意に定まる**(v_i は線型代数学における**基底**になる)