数値解析（松尾）　配付資料　　　　　2019年10月28日

固有値問題の解法

■ べき乗法

べき乗法

$\boldsymbol{x}_0$: given
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
　$\boldsymbol{y}_{k+1} := A\boldsymbol{x}_k$
　$\boldsymbol{x}_{k+1} := \boldsymbol{y}_{k+1}/\|\boldsymbol{y}_{k+1}\|$
}

べき乗法バリエーション：　逆反復

$\boldsymbol{x}_0$: given,　$PA = LU$
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
　$\boldsymbol{y}_{k+1} := A^{-1}\boldsymbol{x}_k$
　$\boldsymbol{x}_{k+1} := \boldsymbol{y}_{k+1}/\|\boldsymbol{y}_{k+1}\|$
}

べき乗法バリエーション：　シフト付き逆反復

$\boldsymbol{x}_0$: given,　μ: given, $P(A - \mu I) = LU$
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
　$\boldsymbol{y}_{k+1} := (A - \mu I)^{-1}\boldsymbol{x}_k$
　$\boldsymbol{x}_{k+1} := \boldsymbol{y}_{k+1}/\|\boldsymbol{y}_{k+1}\|$
}

■ QR法

QR分解：$m \times n$ の行列 A は，m 次ユニタリ行列 Q と $m \times n$ の上三角行列 R を用いて，$A = QR$ と書ける.（この表現は Q（および R）の列（行）の符号を除いて一意）．また QR 分解は本質的に Gram–Schmidt の直交化に等しい（Q に直交化された列ベクトル，R に直交化に要した係数が並ぶ）.

Hessenberg 形： 任意の n 次行列は $O(n^3)$ の（有限回の）手間で次の形（Hessenberg 形）にユニタリ変換できる．(つまり $a_{ij} = 0$ $(i > j + 1)$).

$$\begin{pmatrix} * & \cdots & \cdots & * \\ * & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & * & * \end{pmatrix}$$

QR 法

A_0: given Hessenberg matrix
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
  $A_k =: Q_k R_k$ (※ QR 分解)
  $A_{k+1} := R_k Q_k$
}

（注意）記号 “=:” の行では，左辺を QR 分解して右辺を得る，という操作を表している．

Hessenberg 形の行列に対する QR 法は，一段を $O(n^2)$ で計算できる（→別資料）．

（参考）QR 法の導出．
QR 法の原型アルゴリズム（「同時反復法」）:

X_0: given unitary matrix (e.g. $X_0 := I$)
for $k := 0, 1, 2, \ldots$ {
  $Y_{k+1} := AX_k$
  $Y_{k+1} =: X_{k+1} R_k$ (※ QR 分解)
}

これは X_k の n 本の列ベクトルに対し一斉にべき乗法を適用しつつ，毎回直交化をかけていることに等しい．(直交化せずに A をかけ続けると，すべての列ベクトルが絶対値最大固有値に対応する固有ベクトルを向いてしまう)．

$A_k \equiv {X_k}^* A X_k$，$Q_k \equiv {X_k}^* X_{k+1}$ とおくと，上の原型アルゴリズムは QR 法と一致する．
実際，$AX_k = X_{k+1} R_k$ より $A_k = Q_k R_k$（☆）．同様に $A_{k+1} = Q_{k+1} R_{k+1}$ であるがここで $A_{k+1} = {X_{k+1}}^* A X_{k+1} = {X_{k+1}}^* X_k {X_k}^* A X_k {X_k}^* X_{k+1} = {Q_k}^* A_k Q_k$．つまり A_{k+1} は A_k のユニタリ相似変換である．ここで（☆）式から ${Q_k}^* A_k Q_k = R_k Q_k$．

【演習】（自分の興味に従って自習し，理解・実装力を高めることを奨励する）

1. 適当に行列 A を設定し，べき乗法，逆反復等を実験してみよ．
2. 同様に QR 法も実験して試してみよ．
   （注意）前問と本問を通じて，ランダムに行列を生成すると一般に固有値は実数とは限らないので注意すること．また，観察しやすい（実）固有値を持つ行列を生成しながら実験するにはどうしたらよいか，少し考えてみるとよい（固有値集合を指定し，それを持つランダムな行列を生成できるか？）．