

固有値問題の解法

べき乗法

べき乗法

```

 $x_0$ : given
for  $k := 0, 1, 2, \dots$  {
     $y_{k+1} := Ax_k$ 
     $x_{k+1} := y_{k+1} / \|y_{k+1}\|$ 
}
    
```

べき乗法バリエーション： 逆反復

```

 $x_0$ : given,  $PA = LU$ 
for  $k := 0, 1, 2, \dots$  {
     $y_{k+1} := A^{-1}x_k$ 
     $x_{k+1} := y_{k+1} / \|y_{k+1}\|$ 
}
    
```

べき乗法バリエーション： シフト付き逆反復

```

 $x_0$ : given,  $\mu$ : given,  $P(A - \mu I) = LU$ 
for  $k := 0, 1, 2, \dots$  {
     $y_{k+1} := (A - \mu I)^{-1}x_k$ 
     $x_{k+1} := y_{k+1} / \|y_{k+1}\|$ 
}
    
```

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 $k := 0, 1, 2, \dots$ {
 $A_k =: Q_k R_k$ (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.

(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 $k := 0, 1, 2, \dots$ {
 $Y_{k+1} := AX_k$
 $Y_{k+1} =: X_{k+1} R_k$ (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).

$A_k \equiv X_k^* AX_k$, $Q_k \equiv X_k^* X_{k+1}$ 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 $A_{k+1} = X_{k+1}^* AX_{k+1} = X_{k+1}^* X_k X_k^* AX_k X_k^* X_{k+1} = Q_k^* A_k Q_k$. 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 $Q_k^* A_k Q_k = R_k Q_k$.