数値計算

大阪大学基礎工学部

永原正章

2012年7月5日（5限）

休講と補講のお知らせ

- 本日,6限目,補講です.
- 来週,7月12日(木)は休講です.
- 7月26日(木)は6限目に補講があります.
  - 教室は B102(5限目,6限目)

行列の固有値問題

- 固有値とは?
- 行列 $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ の固有値 λ と対応する固有ベクトル x

$$Ax = \lambda x$$

- 固有値問題
  - 全ての固有値の存在する領域を求める.
  - 全ての固有値を求める.

固有値の存在する領域

- A を正方行列とすると

$$\rho(A) \leq \|A\|$$

が成り立つ.ただし,

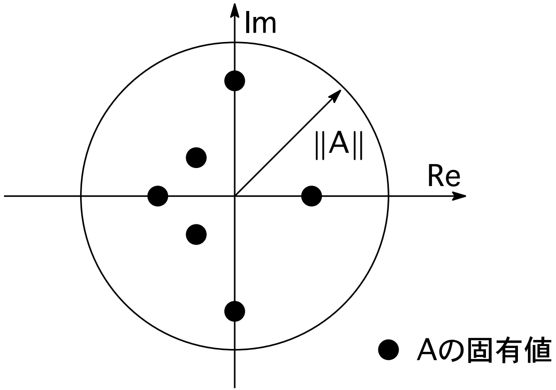
$$\rho(A) = \max_i |\lambda_i(A)| \quad \text{（スペクトル半径）}$$

$$\|A\| = \max_i \sum_j |a_{ij}| \quad \text{または} \quad \max_j \sum_i |a_{ij}| \quad \text{（行列のノルム）}$$

- すなわち行列 A の固有値は全て,原点を中心とした半径 $\|A\|$ の円の内部(または境界)に存在する.

固有値の存在する領域

- $\rho(\mathrm{A}) \leq \|\mathrm{A}\|$



固有値の存在する領域

- 半径 $\|A\|$ の円は広すぎる.
- もっと精密に(そして,もっと簡単に)領域を求めたい.
- Gershgorin の定理

Gershgorin の定理 (1)$\star\star\star$

- 行列 $A = [a_{ij}] \in \mathbb{C}^{N \times N}$ に対して

$$\sigma(A) \subseteq S_R = \bigcup_{i=1}^{N} R_i, \quad R_i := \left\{ z \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} |a_{ij}| \right\}$$

- R_i: 中心 a_{ii},
  半径 $|a_{i1}| + \cdots + |a_{i(i-1)}| + |a_{i(i+1)}| + \cdots + |a_{iN}|$
  の円の内部および境界

Gershgorin の定理 (2)$\star\star\star$

- 行列 $A = [a_{ij}] \in \mathbb{C}^{N\times N}$ に対して

$$\sigma(A) \subseteq S_C = \bigcup_{j=1}^{N} C_j, \quad C_j := \left\{ z \in \mathbb{C} : |z - a_{jj}| \le \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^{N} |a_{ij}| \right\}$$

- C_j: 中心 a_{jj},
半径 $|a_{1j}| + \cdots + |a_{(j-1)j}| + |a_{(j+1)j}| + \cdots + |a_{Nj}|$
の円の内部および境界

Gershgorin の定理 (3)$\star\star\star$

- Gershgorin の定理 (1) と (2) をまとめると...
- 行列 $A \in \mathbb{C}^{N\times N}$ に対して,

$$\sigma(A) \subseteq S_R \cap S_C$$

が成り立つ.すなわち,行列Aの固有値はすべて領域$S_R \cap S_C$に含まれる.

例題⋆⋆⋆

- 行列Aを

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -2 & 3 \end{bmatrix}$$

とする.

- この行列に対するGershgorinの円を求め,固有値の存在領域を図示する.
- 二つの円 R_1 と R_2 を求める

$$R_1 = \{z \in \mathbb{C} : |z| \leq 1\}, \quad R_2 = \{z \in \mathbb{C} : |z - 3| \leq 2\}$$

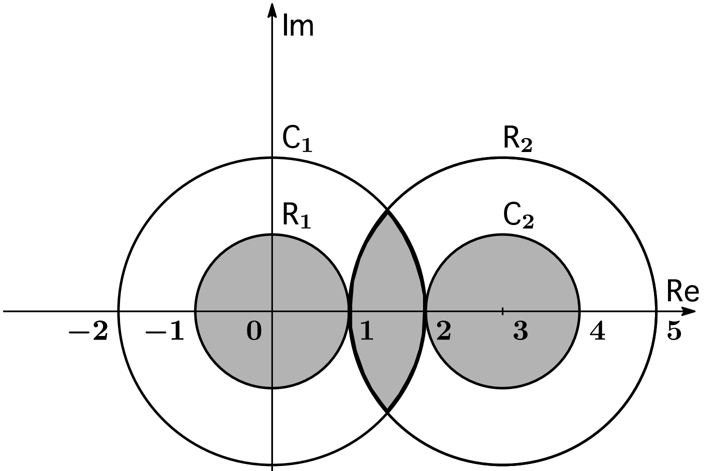
- 二つの円 C_1 と C_2 を求める

$$C_1 = \{z \in \mathbb{C} : |z| \leq 2\}, \quad C_2 = \{z \in \mathbb{C} : |z - 3| \leq 1\},$$

例題$\star\star\star$

$\mathrm{S_R} \cap \mathrm{S_C} = (\mathrm{R_1} \cup \mathrm{R_2}) \cap (\mathrm{C_1} \cup \mathrm{C_2})$

$\boldsymbol{\lambda = 1,\ 2}$



Gershgorin の定理 (1) の証明

- 複素数 λ を A の固有値とする.すなわち,$\lambda \in \sigma(A)$.
- $\lambda \in S_R = \bigcup_{i=1}^{N} \left\{ z \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \le \sum_{\substack{j=1 \\ j \ne i}}^{N} |a_{ij}| \right\}$を示す.
- 行列 A の固有値 λ が対角成分 $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{NN}$ のどれかと等しい場合, 明らかに $\lambda \in S_R$ である.
- λ は A の対角成分のどれとも等しくないとする.すなわち, $\lambda \ne a_{ii}$ $(i = 1, \dots, N)$.

Gershgorin の定理 (1) の証明

- 行列 A を対角成分と非対角成分に次のように分解する.

$$A = D + E$$

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & a_{NN} \end{bmatrix}, \ E = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \dots & a_{1N} \\ a_{21} & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{N-1,N} \\ a_{N1} & \dots & a_{N,N-1} & 0 \end{bmatrix}$$

- 行列 $B_\lambda = A - \lambda I = (D - \lambda I) + E$ を考える.
- 複素数 λ は A の固有値だから,$B_\lambda = A - \lambda I$ は正則ではない.

Gershgorin の定理 (1) の証明

- $B_\lambda = A - \lambda I = (D - \lambda I) + E$ は正則ではない.
- したがって,ある $\mathbf{0}$ でないベクトル $x \in \mathbb{C}^N$ が存在して,

$$B_\lambda x = \mathbf{0}$$

- これより,

$$\{(D - \lambda I) + E\}x = \mathbf{0}$$

- また, $\lambda \neq a_{ii}$ $(i = 1, \ldots, N)$ より,$D - \lambda I$ は正則.
- したがって,

$$x = -(D - \lambda I)^{-1}Ex$$

Gershgorin の定理 (1) の証明

- $x = -(D - \lambda I)^{-1}Ex$ より

$$\begin{aligned}\|x\|_\infty &= \|(D - \lambda I)^{-1}Ex\|_\infty \\ &\leq \|(D - \lambda I)^{-1}E\|_\infty \|x\|_\infty.\end{aligned}$$

- ここでベクトル $x = [x_1, \ldots, x_N]^\top \in \mathbb{R}^N$ に対して

$$\|x\|_\infty = \max_{i=1,\ldots,N} |x_i|$$

であり,また行列 $M = [m_{ij}] \in \mathbb{R}^{N \times N}$ に対して

$$\|M\|_\infty = \sup_{x \in \mathbb{R}^N, x \neq 0} \frac{\|Mx\|_\infty}{\|x\|_\infty} = \max_{i=1,\ldots,N} \sum_{j=1}^{N} |m_{ij}|$$

Gershgorin の定理 (1) の証明

- 不等式 $\|x\|_\infty \le \|(D-\lambda I)^{-1}E\|_\infty \|x\|_\infty$ より

$$1 \le \|(D-\lambda I)^{-1}E\|_\infty = \max_{i=1,\dots,N} \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} \frac{1}{|a_{ii}-\lambda|} |a_{ij}|$$

- これよりある番号 $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ が存在して,

$$1 \le \frac{1}{|a_{ii}-\lambda|} \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} |a_{ij}|, \quad \therefore\ |a_{ii}-\lambda| \le \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} |a_{ij}|$$

- これは $\lambda \in R_i$ であることを示している.ゆえに $\lambda \in S_R$.

Gershgorin の定理 (2) の証明

- A の固有値と$A^\top$の固有値は等しいので,$A^\top$ に対して, Gershgorin の定理 (1) を使うと, Gershgorin の定理 (2) が成り立つことがわかる.

練習問題

- Gershgorin の定理を用いて,次の行列Aの固有値の存在する領域を図示せよ.

$$\mathsf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{2} \\ \mathbf{3} & \mathbf{4} \end{bmatrix}$$

解答例

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$$

- この行列に対するGershgorinの円を求め,固有値の存在領域を図示する.
- 二つの円 R_1 と R_2 を求める

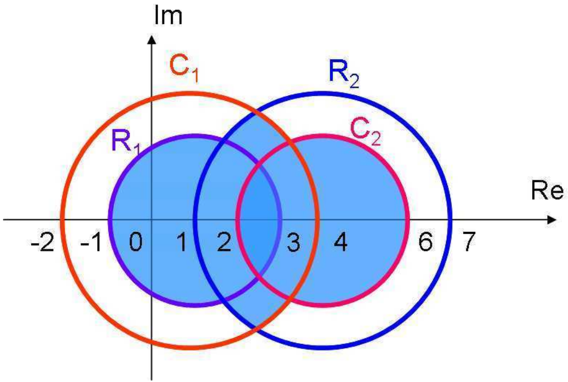
$$R_1 = \{z \in \mathbb{C} : |z - 1| \leq 2\}, \quad R_2 = \{z \in \mathbb{C} : |z - 4| \leq 3\}$$

- 二つの円 C_1 と C_2 を求める

$$C_1 = \{z \in \mathbb{C} : |z - 1| \leq 3\}, \quad C_2 = \{z \in \mathbb{C} : |z - 4| \leq 2\},$$

解答例

$$S_R \cap S_C = (R_1 \cup R_2) \cap (C_1 \cup C_2)$$



$$\lambda_{\pm} = \frac{5 \pm \sqrt{33}}{2} \approx 5.372, \ -0.372$$

固有値の数値計算

- 行列 $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ の固有値を全て求める.
- N が 5以上の場合,一般に厳密解を求めることは不可能.
- 現実的な問題を解く場合,固有値を求めるためには数値計算を必要とする.
- 固有値を求めるアルゴリズム: QR分解法

QR分解

- 行列 $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ を正則とする.このとき,次のような分解が一意的に可能である.
$$A = QR$$
ここで Q はユニタリ行列(すなわち,$Q^*Q = QQ^* = I$ が成り立つ行列), R は対角成分が正である右上三角行列である.

QR 分解法のアルゴリズム

正則行列Aの固有値を求めるQR分解法のアルゴリズム:

1. $A_1 := A$
2. $n = 1, 2, \ldots$ に対して,

$$A_n := Q_n R_n \quad \text{(QR 分解)}$$
$$A_{n+1} := R_n Q_n \quad \text{(掛け算の入れ替え)}$$

この QR 分解法により行列 A の固有値の近似値が得られる.

固有値の QR 分解法

行列 $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ を正則行列とし,その固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ は全て相異なり,

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_N| > 0$$

を満足しているとする. このとき $A_1 = A$ からはじめる QR 分解法のアルゴリズムによって作られる行列 A_n は, $n \to \infty$ で次の行列に収束する.

$$A_\infty = \begin{bmatrix} \lambda_1 & * & \dots & * \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & * \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_N \end{bmatrix}.$$

Scilabによる実験

```
A=rand(5,5); A=A'*A; eig=gsort(spec(A));
An=A;
N=20;
err=[];
for n=1:N
[Q,R]=qr(An); //QR
An=R*Q; //
err=[err,norm(eig-gsort(diag(An)))];//
end

figure;plot(log10(err))//
```

Scilabによる実験