2005年6月22日（水）

数値解析講義　前期水曜３限
３年（2005）

システム情報学研究院情報理学専攻
青柳　睦
aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp

研究室：情報基盤センター５階５０２

講義内容

{括弧}の項目はSkipまたは参考程度

１．超越方程式（非線形方程式）の解法

- １．１　2分法　→　演習
- １．２　{補間法}
- １．３　ニュートン法　→　演習

２．代数方程式の解法

- ２．１　グラフェの方法　→　（演習）
- ２．２　{ベルヌーイの方法}

３．連立一次方程式の解法

- ３．１　行列計算　→　演習
- ３．２　ガウスの消去法　→　演習
- ３．３　３重対角行列の場合の解法
- ３．４　LU分解法　→　演習

講義vs演習スケジュールに余裕がある日を見つけて，「数値解析」を必要とする理学工学社会学？分野で活用されている計算科学の概論を紹介する（予定）．

3．5　特異値分解法

3．6　共役勾配法　→演習

3．7　反復法　→演習　3.7.1 ヤコビ法

3．7．2　ガウス･ザイデル法　　3．7．3　SOR法（参考）

4．固有値と固有ベクトルの近似計算

{4．1　レバリエールの方法}→固有値問題の序

4．2　ヤコビの方法（対角行列への帰着）→演習

4．3　ギブンスの方法(3重対角行列への帰着)

4．4　ハウスホルダー法（3重対角行列への帰着）

4．5　バイセクション法(3重対角行列の固有値と固有ベクトルの計算)

5．ラグランジュの未定乗数法

6．勾配法

6．1　最急降下法

6．2　最急降下加速法

6．3　ステップ幅の決め方

成績評価，その他

- 出席点５割＋前期末試験５割
- 講義ノートは，毎回配りますが
  もし欠席したら各自でDLしてください
  server-500.cc.kyushu-u.ac.jp
  （講義ノートはその週の金曜日17時までには公開）
- 座席指定でお願いします
  30分後には座席表から出欠を取ります
- 研究室の電話は 092-642-3838
- メールは，aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp
  Subjectには，「数値解析」と記入
  してください

４．３　ギブンス法

対称行列の3重対角化の方法

ヤコビ法における相似変換の行列P

$$
P=\begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & \\
 & \ddots & & & & 0 & \\
 & & \cos\phi & \cdots & \sin\phi & & \\
 & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\
 & & -\sin\phi & \cdots & \cos\phi & & \\
 & 0 & & & & \ddots & \\
 & & & & & & 1
\end{pmatrix}
&
\begin{array}{c}
 \\
 \\
p \\
 \\
q \\
 \\
 \\
\end{array}
\\
\begin{array}{ccccccc}
 & & p & & q & &
\end{array}
&
\end{array}
$$

をP_{pq}と書くことにする

相似変換 $B = P_{pq}^{-1} A P_{pq}$ により

p、q 行目および p、q 列目が変更を受ける

$$B = P_{pq}^{-1} A P_{pq}$$

$$= \begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccccc} & & p & & q & & \end{array} \\ \begin{array}{c} \\ \\ p \\ \\ q \\ \\ \end{array} & \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & 0 & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & 0 & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \end{pmatrix} \end{array}$$

変換される部分

ヤコビ法ではここが0となるようにする

対称行列 A に対するヤコビ法では $\sin\phi$、$\cos\phi$ を変換後の b_{pq} が0になるように選んだ.

(A が対称なら B も対称なので $b_{pq} = 0$ とすれば b_{qp} も0になる)

ギブンスの方法では,

ここでb_{pq}ではなく$b_{q,p-1}$を0にすることを考える
(対称性から$b_{p-1,q}$も0になる)

$$B = P_{pq}^{-1} A P_{pq}$$

$$= \begin{array}{c c} & \begin{array}{ccccccc} & & p & & q & & \end{array} \\ \begin{array}{c} \\ \\ p \\ \\ q \\ \\ \\ \end{array} & \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & 0 & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ * & 0 & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * \end{pmatrix} \end{array}$$

変換される部分

ここが0となるようにする

変換後のq行目は

$$b_{qk} = a_{pk}\sin\phi + a_{qk}\cos\phi \quad k \neq p, q$$

となるから$b_{q,p-1} = 0$とするためには

$$b_{q,p-1} = a_{p,p-1}\sin\phi + a_{q,p-1}\cos\phi = 0$$

したがって

$$\tan\phi = -\frac{a_{q,p-1}}{a_{p,p-1}}$$

とすればよい

P_{23}によってこのような変換を行うと
(31)および(13)要素が0となる
(変換後の行列を$A^{(23)}$と書く)

$$
A^{(23)} = P_{23}^{-1} A P_{23} =
\begin{array}{c c}
 & \begin{array}{ccccccc} & 2 & 3 & & & & \end{array} \\
\begin{array}{c} \\ 2 \\ 3 \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} &
\begin{pmatrix}
* & * & 0 & * & * & * & * \\
* & * & * & * & * & * & * \\
0 & * & * & * & * & * & * \\
* & * & * & * & * & * & * \\
* & * & * & * & * & * & * \\
* & * & * & * & * & * & * \\
* & * & * & * & * & * & *
\end{pmatrix}
\end{array}
$$

変換される部分

ここが0となるようにする

続いてP_{24}で変換すると

$$
A^{(24)} = P_{24}^{-1} A^{(23)} P_{24} =
\begin{pmatrix}
* & * & 0 & 0 & * & * & * \\
* & * & * & * & * & * & * \\
0 & * & * & * & * & * & * \\
0 & * & * & * & * & * & * \\
* & * & * & * & * & * & * \\
* & * & * & * & * & * & * \\
* & * & * & * & * & * & *
\end{pmatrix}
$$

さらに$P_{25}, \cdots, P_{2n}$で変換すると(図では$n=7$)
1列目の3行目以下をすべて0にできる
(図はP_{2n}による変換後の状態)

$$
A^{(2n)} = P_{2n}^{-1} A^{(2,n-1)} P_{2n} =
\begin{array}{c}
 \\ 2 \\ \\ \\ \\ \\ n
\end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccccc} \ & 2 & \ & \ & \ & \ & n \end{array} \\
\begin{pmatrix}
* & * & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
* & * & * & * & * & * & * \\
0 & * & * & * & * & * & * \\
0 & * & * & * & * & * & * \\
0 & * & * & * & * & * & * \\
0 & * & * & * & * & * & * \\
0 & * & * & * & * & * & *
\end{pmatrix}
\end{array}
$$

P_{2n}の変換で
変換される部分

次にP_{34}で変換すると
(42)および(24)要素が0となる

この部分は
変換されても0のまま

P_{34}の変換で
変換される部分

$$A^{(34)} = P_{34}^{-1} A^{(2n)} P_{34} = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * & * \end{pmatrix}$$

このときすでに0にした$a_{31}^{(2n)}$、$a_{41}^{(2n)}$が

$$a_{31}^{(34)} = a_{31}^{(2n)} \cos\phi - a_{41}^{(2n)} \sin\phi$$

$$a_{41}^{(34)} = a_{31}^{(2n)} \sin\phi + a_{41}^{(2n)} \cos\phi$$

によって変更されるが$a_{31}^{(2n)} = a_{41}^{(2n)} = 0$なので変更後も0となる

対角化まではしないギブンス法では，有限回の演算で3重対角行列までは到達できる．　（c. f.　対角化まで行うヤコビの方法では，収束が保障されているだけで「有限回」を直接に行列次数と関係づけられない）

以下 $P_{35},\cdots,P_{3n}$ で変換すると
2列目の4行目以下をすべて0にできる

$$A^{(3n)}=P_{3n}^{-1}A^{(3,n-1)}P_{3n}=\begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * & * & * \end{pmatrix}$$

変換される部分

変換後も0

同様に $P_{45},\cdots,P_{4n};\ P_{56},\cdots,P_{5n};\cdots;\ P_{n-1,n}$ で変換すると

$$A^{(n-1,n)}=P_{n-1,n}^{-1}A^{(n-2,n)}P_{n-1,n}=\begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * & * & * & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}$$

上記の手続きにより，Aは三重対角行列に変換される

４．５　バイセクション法　（４．４と講義順番は入れ替え）

実対称な3重対角行列の固有値を求める

$$\tilde{A} = P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & 0 & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & \ddots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

固有値は固有方程式

$$
\left|\lambda I - \tilde{A}\right| = \begin{vmatrix}
\lambda - \alpha_1 & -\beta_1 & & & & \\
-\beta_1 & \lambda - \alpha_2 & -\beta_2 & & 0 & \\
& -\beta_2 & \lambda - \alpha_3 & -\beta_3 & & \\
& & \ddots & \ddots & \ddots & \\
& 0 & & -\beta_{n-2} & \lambda - \alpha_{n-1} & -\beta_{n-1} \\
& & & & -\beta_{n-1} & \lambda - \alpha_n
\end{vmatrix} = 0
$$

の解。

ここで行列$\lambda I - \tilde{A}$の一連の主小行列式を考える

主小行列式

$$p_1(\lambda) = \lambda - \alpha_1$$

$$p_2(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda - \alpha_1 & -\beta_1 \\ -\beta_1 & \lambda - \alpha_2 \end{vmatrix} = (\lambda - \alpha_1)(\lambda - \alpha_2) - \beta_1^2$$

$$\vdots$$

$$p_k(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda - \alpha_1 & -\beta_1 & & & & \\ -\beta_1 & \lambda - \alpha_2 & -\beta_2 & & \text{{\Large 0}} & \\ & -\beta_2 & \lambda - \alpha_3 & -\beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \text{{\Large 0}} & & \ddots & \lambda - \alpha_{k-1} & -\beta_{k-1} \\ & & & & -\beta_{k-1} & \lambda - \alpha_k \end{vmatrix}$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$p_n(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda-\alpha_1 & -\beta_1 & & & & \\ -\beta_1 & \lambda-\alpha_2 & -\beta_2 & & \text{\huge 0} & \\ & -\beta_2 & \lambda-\alpha_3 & -\beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \text{\huge 0} & & -\beta_{n-2} & \lambda-\alpha_{n-1} & -\beta_{n-1} \\ & & & & -\beta_{n-1} & \lambda-\alpha_n \end{vmatrix}$$

$$= \left| \lambda I - A \right|$$

固有方程式は$p_n(\lambda)=0$となる

$p_n(\lambda),\cdots,p_1(\lambda)$は以下で示すように漸化式

$$p_k(\lambda) = (\lambda-\alpha_k)p_{k-1}(\lambda) - \beta_{k-1}^2 p_{k-2}(\lambda), \quad k=2,\cdots,n$$

を満たす（ただし$p_0(\lambda)=1$）。

補足

行列式の展開

行列 A の行列式

$$
|A| = \begin{vmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & \boxed{a_{1j}} & \cdots & a_{1n} \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2j} & \cdots & a_{2n} \\
\vdots & \vdots & & & \vdots & & \vdots \\
a_{i1} & a_{i2} & \cdots & & & \cdots & a_{in} \\
\vdots & \vdots & & & & & \vdots \\
\vdots & \vdots & & & \vdots & & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & \cdots & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn}
\end{vmatrix}
$$

を i 行目または j 列目について展開する

補足

$$|A| = \sum_{q=1}^{n} (-1)^{i+q} a_{iq} D_{iq} \qquad |A| = \sum_{p=1}^{n} (-1)^{p+j} a_{pj} D_{pj}$$

i行目の展開　　　j列目の展開

D_{pq}はAのp行目とq列目を取り除いた小行列の行列式

$$D_{pq} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,q-1} & a_{1,q+1} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,q-1} & a_{2,q+1} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{p-1,1} & a_{p-1,2} & \cdots & a_{p-1,q-1} & a_{p-1,q+1} & \cdots & a_{p-1,n} \\ a_{p+1,1} & a_{p+1,2} & \cdots & a_{p+1,q-1} & a_{p+1,q+1} & \cdots & a_{p+1,n} \\ & & & & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,q-1} & a_{n,q+1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

$p_k(\lambda)$を最後の行について展開すると

$$
p_k(\lambda) = \begin{vmatrix}
\lambda-\alpha_1 & -\beta_1 & & & & & \\
-\beta_1 & \lambda-\alpha_2 & -\beta_2 & & & 0 & \\
 & -\beta_2 & \lambda-\alpha_3 & -\beta_3 & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & & & \ddots & \lambda-\alpha_{k-2} & -\beta_{k-2} & \\
 & 0 & & & -\beta_{k-2} & \lambda-\alpha_{k-1} & -\beta_{k-1} \\
 & & & & & -\beta_{k-1} & \lambda-\alpha_k
\end{vmatrix}
$$

$$
= (-1)^{k+k-1}\beta_{k-1}D_{k,k-1} + (-1)^{2k}(\lambda-\alpha_k)D_{kk}
$$

$$
= (\lambda-\alpha_k)D_{kk} - \beta_{k-1}D_{k,k-1}
$$

D_{kk} は

$$D_{kk} = \begin{vmatrix} \lambda - \alpha_1 & -\beta_1 & & & & 0 \\ -\beta_1 & \lambda - \alpha_2 & -\beta_2 & & & \\ & -\beta_2 & \lambda - \alpha_3 & -\beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \lambda - \alpha_{k-2} & -\beta_{k-2} \\ & 0 & & & -\beta_{k-2} & \lambda - \alpha_{k-1} \end{vmatrix} = p_{k-1}(\lambda)$$

$D_{k,k-1}$ は

$$D_{k,k-1} = \begin{vmatrix} \lambda - \alpha_1 & -\beta_1 & & & & \\ -\beta_1 & \lambda - \alpha_2 & -\beta_2 & & & \\ & -\beta_2 & \lambda - \alpha_3 & -\beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \lambda - \alpha_{k-2} & \\ & 0 & & & -\beta_{k-2} & -\beta_{k-1} \end{vmatrix}$$

これはさらに最後の列で展開すると

$$
= (-1)^{2(k-1)} \beta_{k-1} \begin{vmatrix} \lambda - \alpha_1 & -\beta_1 & & & \\ -\beta_1 & \lambda - \alpha_2 & -\beta_2 & & \\ & -\beta_2 & \lambda - \alpha_3 & -\beta_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \lambda - \alpha_{k-2} \end{vmatrix}
$$

$$
= \beta_{k-1} p_{k-2}(\lambda)
$$

以上から

$$
p_k(\lambda) = (\lambda - \alpha_k) p_{k-1}(\lambda) - \beta_{k-1}^2 p_{k-2}(\lambda)
$$

これが$k = 2$についても成立するように

$$
p_0(\lambda) = 1
$$

とする

「スツルム列とスツルムの定理」

スツルム列

実係数を持つ多項式 $f(x)$と区間$[a,b]$が与えられたとする。
このとき次の4条件を満足する実係数多項式の列

$$f(x),\ f_1(x),\ f_2(x),\cdots,\ f_l(x)$$

は区間$[a,b]$においてスツルム列をなすという。
ただし $f_0(x)=f(x)$

条件:

(1) 任意の点xにおいて $f_k(x)$と $f_{k-1}(x)$は同時に0にならない

(2) ある点x_0において $f_k(x_0)=0$ならば $f_{k-1}(x_0)\,f_{k+1}(x_0)<0$

(3) $f_l(x)$は定符号

(4) ある点x_0において $f(x_0)=0$ならば $f'(x_0)\,f_1(x_0)>0$

スツルムの定理

$f(x), f_1(x), f_2(x), \cdots, f_l(x)$が区間$[a,b]$で

スツルム列をなし、$f(a)f(b) \neq 0$とする

xを固定して$\{f(x), f_1(x), f_2(x), \cdots, f_l(x)\}$を左から右に

見ていったときの符号の変化の回数を$N(x)$とすると

$N(x)$はxより大きな固有値の数となる

したがって区間$[a,b]$に存在する$f(x)$の零点の個数n_0は

$$n_0 = N(a) - N(b)$$

$p_n(\lambda),\cdots,p_1(\lambda),p_0(\lambda)$は実軸上の閉区間において
スツルム列の条件を満たす
（前の $f(x),f_1(x),\cdots,f_l(x)$とは添え字の順序が逆）

区間$[a,b]$が与えられて$p_n(a)\neq 0$、$p_n(b)\neq 0$のとき

λを固定して$\left\{p_n(\lambda),p_{n-1}(\lambda),\cdots,p_1(\lambda),p_0(\lambda)\right\}$を左から右に
見ていったときの符号の変化の回数を$N(\lambda)$とすると

$N(\lambda)$はλより大きな固有値の数となる

補足

$p_n(\lambda),\cdots,p_1(\lambda),p_0(\lambda)$がスツルム列の条件を満たすことを示す

β_k はすべて0でないと仮定する

もしあるkに対して$\beta_k=0$とすると$\tilde{A}$は

$$
\tilde{A}=\left(\begin{array}{cccccc|cccccc}
\alpha_1 & \beta_1 & & & & & & & & & & \\
\beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & & & & & 0 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & & & & \\
 & & \beta_{k-1} & \alpha_{k-1} & \beta_{k-1} & & & & & & & \\
 & & & \beta_{k-1} & \alpha_k & & & & & & & \\
\hline
 & & & & & & \alpha_{k+1} & \beta_{k+1} & & & & \\
 & & & & & & \beta_{k+1} & \alpha_{k+2} & \beta_{k+2} & & & \\
 & & & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & 0 & & & & & & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & \\
 & & & & & & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n &
\end{array}\right)
$$

$$
=\begin{pmatrix}\tilde{A}_1 & 0 \\ 0 & \tilde{A}_2\end{pmatrix}
$$

のようにブロック対角の形となる

補足

このとき固有方程式$\left|\lambda I - \tilde{A}\right| = 0$は

より次元数の小さな二つの問題

$$\left|\lambda I - \tilde{A}_1\right| = \begin{pmatrix} \lambda - \alpha_1 & -\beta_1 & & & \\ -\beta_1 & \lambda - \alpha_2 & -\beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\beta_{k-1} & \lambda - \alpha_{k-1} & -\beta_{k-1} \\ & & & -\beta_{k-1} & \lambda - \alpha_k \end{pmatrix} = 0$$

$$\left|\lambda I - \tilde{A}_2\right| = \begin{pmatrix} \lambda - \alpha_{k+1} & -\beta_{k+1} & & & \\ -\beta_{k+1} & \lambda - \alpha_{k+2} & -\beta_{k+2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\beta_{n-2} & \lambda - \alpha_{n-1} & -\beta_{n-1} \\ & & & -\beta_{n-1} & \lambda - \alpha_n \end{pmatrix} = 0$$

を解くことに帰着する

補足　一般に$\beta_k = 0$となるkがm個ある場合$\tilde{A}$は

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} \tilde{A}_1 & & & \\ & \tilde{A}_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \tilde{A}_{m+1} \end{pmatrix}$$

の形となり、固有方程式$\left|\lambda I - \tilde{A}\right| = 0$は

βが0でないような$m+1$個の問題

$$\left|\lambda I - \tilde{A}_1\right| = 0$$

$$\vdots$$

$$\left|\lambda I - \tilde{A}_{m+1}\right| = 0$$

に帰着する。

以下ではこのような細分化が常に行われていると想定し、

βはすべて0でないと仮定する

補足

$p_n(\lambda), \cdots, p_1(\lambda), p_0(\lambda)$がスツルム列の4つの条件を満たすことを以下に示す

漸化式を

$$p_k(\lambda) = (\lambda - \alpha_k) p_{k-1}(\lambda) - \beta_{k-1}^2 p_{k-2}(\lambda) \qquad (a)$$

として

(1) 隣り合う$p_k(\lambda), p_{k-1}(\lambda)$は同時に0にならない

(a)において$p_k(\lambda) = p_{k-1}(\lambda) = 0$であるとすると

$\beta_k \neq 0$から$p_{k-2}(\lambda)$が0となり、以下同様にして

すべての$p_j(\lambda),\ j \leq k$が0になる。

しかしこれは$p_0(\lambda) = 1$に矛盾する

補足

(2) ある点λ_0において$p_k(\lambda_0)=0$ならば$p_{k-1}(\lambda_0)p_{k+1}(\lambda_0)<0$

(a)のkを一つ増やした式

$$p_{k+1}(\lambda)=(\lambda-\alpha_{k+1})p_k(\lambda)-\beta_k^2 p_{k-1}(\lambda)$$

において$p_k(\lambda_0)=0$とすると

$$p_{k+1}(\lambda_0)=-\beta_k^2 p_{k-1}(\lambda_0)$$

よって$\beta_k\neq 0$から$p_{k-1}(\lambda_0)p_{k+1}(\lambda_0)<0$

(3) $p_0(\lambda)$が定符号であることは$p_0(\lambda)=1$から明らか

(4) ある点λ_0において$p_n(\lambda_0)=0$ならば$p_n'(\lambda_0)p_{n-1}(\lambda_0)>0.$

$$p_k(\lambda)=(\lambda-\alpha_k)p_{k-1}(\lambda)-\beta_{k-1}^2 p_{k-2}(\lambda) \quad \text{(a)}$$

をλで微分すると

$$p_k'(\lambda)=p_{k-1}(\lambda)+(\lambda-\alpha_k)p_{k-1}'(\lambda)-\beta_{k-1}^2 p_{k-2}'(\lambda) \quad \text{(b)}$$

補足

(4)　(b)$\times p_{k-1}-$(a)$\times p'_{k-1}$を計算すると

$$p'_k(\lambda)p_{k-1}(\lambda)-p_k(\lambda)p'_{k-1}(\lambda)$$

$$=\beta_{k-1}^2\left\{p'_{k-1}(\lambda)p_{k-2}(\lambda)-p_{k-1}(\lambda)p'_{k-2}(\lambda)\right\}+p_{k-1}^2(\lambda).$$

ここで

$$q_k\equiv p'_k(\lambda)p_{k-1}(\lambda)-p_k(\lambda)p'_{k-1}(\lambda)$$

とおくと上式は

$$q_k(\lambda)=p_{k-1}^2(\lambda)+\beta_{k-1}^2q_{k-1}(\lambda),\quad k=2,3,\cdots,n\quad \text{(c)}.$$

ところが

$$q_1(\lambda)=p'_1(\lambda)p_0(\lambda)-p_1(\lambda)p'_0(\lambda)=p'_1(\lambda)=1>0$$

であるから(c)より

$$q_k(\lambda)>0,\quad k=2,3,\cdots,n$$

補足

(4)　特に$k=n$のとき

$$q_n(\lambda)=p_n'(\lambda)p_{n-1}(\lambda)-p_n(\lambda)p_{n-1}'(\lambda)>0$$

であるが,仮定より$p_n(\lambda_0)=0$であるから

$$q_n(\lambda_0)=p_n'(\lambda_0)p_{n-1}(\lambda_0)>0$$

大きいほうからk番目の固有値λ_kを

求めるバイセクション法の手順

出発の区間$[a_0, b_0]$を適切な方法によって選ぶ

(1) $c_j = \dfrac{a_{j-1} + b_{j-1}}{2}$ とする

(2) $N(c_j) \geq k$ならば$a_j = c_j,\ b_j = b_{j-1}$

(λ_kは$[c_j, b_{j-1}]$の中にある)

$N(c_j) < k$ならば$a_j = a_{j-1},\ b_j = c_j$

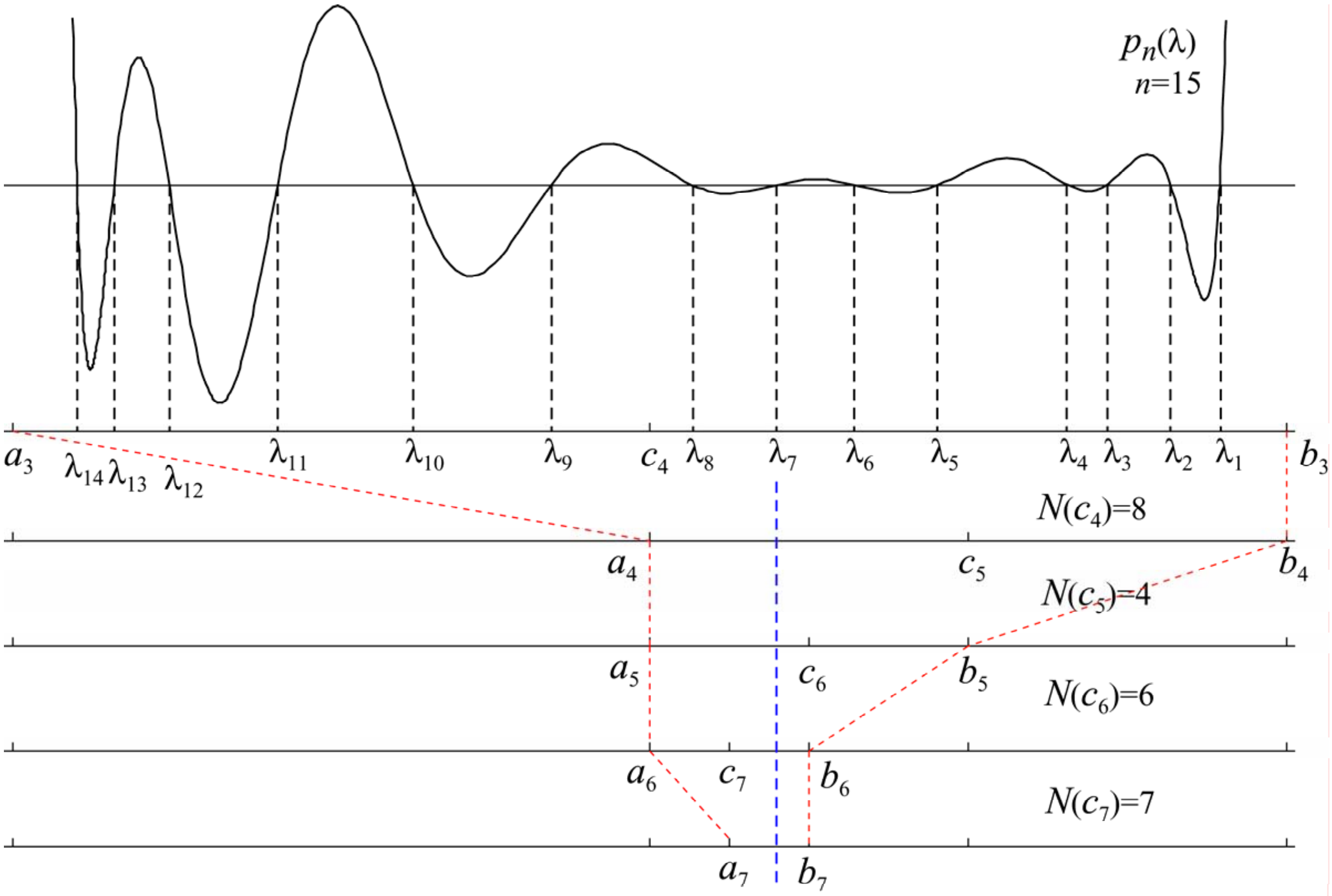
(λ_kは$[a_{j-1}, c_j]$の中にある)

(3) $\left|b_j - a_j\right|$が十分小さくなったら終了。

λ_kの近似値としてc_jを採用する

$j = 2, 3, \cdots,$について繰り返す

例　バイセクション法途中経過　$n=15$、λ_7 を求める
$[a_j, b_j]\ j=3,\cdots,7$ の図



出発の区間$[a_0, b_0]$の選び方

固有値の存在範囲について次が成り立つ

n次元ベクトル$\mathbf{x} = {}^t(x_1, \cdots, x_n)$、$n \times n$行列$A$に対して

$\|\mathbf{x}\|_1$ 、$\|A\|_1$ をそれぞれ次のように定義する

$$\|A\|_1 = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|A\mathbf{x}\|_1}{\|\mathbf{x}\|_1} \qquad \|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

次が成り立つ

(1) $$\|A\|_1 = \max_{1 \le k \le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ik}|$$

(2) $$\|A\|_1 \ge \max_{i} |\lambda_i|$$

(1)は次のように示される

$$\|A\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right| \le \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| |x_j|$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \left(|x_j| \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \right) \le \sum_{j=1}^{n} |x_j| \left(\max_{1 \le k \le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ik}| \right)$$

$$= \|\mathbf{x}\|_1 \max_{1 \le k \le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ik}|$$

したがって

$$\frac{\|A\mathbf{x}\|_1}{\|\mathbf{x}\|_1} \le \max_{1 \le k \le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ik}|$$

ここで

右辺が$k=m$で最大になったとすれば

$$\mathbf{x} = {}^t(0,\cdots,0,\overset{m\text{番目}}{1},0,\cdots,0)$$

とすると

$$\|A\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n}|a_{im}|\,,\quad \|\mathbf{x}\|_1 = 1$$

より

$$\frac{\|A\mathbf{x}\|_1}{\|\mathbf{x}\|_1} = \sum_{i=1}^{n}|a_{im}| = \max_{1\le k\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ik}|$$

となって等号が成立し、したがって

$$\|A\|_1 = \max_{\mathbf{x}\ne 0}\frac{\|A\mathbf{x}\|_1}{\|\mathbf{x}\|_1} = \max_{1\le k\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ik}|$$

(2)は次のように示される

λ_i をAの固有値、$\mathbf{x}_i$ をその固有値に属する固有ベクトルとすると

$$A\mathbf{x}_i = \lambda_i \mathbf{x}_i$$

から

$$\left\| A\mathbf{x}_i \right\|_1 = \left\| \lambda_i \mathbf{x}_i \right\|_1 = \sum_{j=1}^{n} \left| \lambda_i x_{ji} \right| = \left| \lambda_i \right| \sum_{i=1}^{n} \left| x_{ji} \right| = \left| \lambda_i \right| \left\| \mathbf{x}_i \right\|_1$$

したがって

$$\frac{\left\| A\mathbf{x}_i \right\|_1}{\left\| \mathbf{x}_i \right\|_1} = \left| \lambda_i \right|$$

よって

$$\left\| A \right\|_1 = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\left\| A\mathbf{x} \right\|_1}{\left\| \mathbf{x} \right\|_1} \geq \max_{i} \frac{\left\| A\mathbf{x}_i \right\|_1}{\left\| \mathbf{x}_i \right\|_1} = \max_{i} \left| \lambda_i \right|$$

$\|A\|_1 \geq \max_i |\lambda_i|$ であるから

出発の区間$[a_0, b_0]$に対しては $a_0 = -\|A\|_1$, $b_0 = \|A\|_1$ とすればよい

3重対角行列

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & 0 & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & \ddots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

に対しては

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq k \leq n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ik}| = \max_{1 \leq k \leq n} \left\{ |\beta_{k-1}| + |\alpha_k| + |\beta_k| \right\}, \quad \beta_0 = \beta_n = 0$$

と求められる