2005年6月15 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

先週の続きから‥　$a_{ij}=a_{ij}$ を用いると結局

$$
\begin{cases}
b_{ij}=a_{ij} & i,j\neq p,q \\
b_{pk}=b_{kp}=a_{pk}\cos\phi-a_{qk}\sin\phi & k\neq p,q \\
b_{qk}=b_{kq}=a_{pk}\sin\phi+a_{qk}\cos\phi & k\neq p,q \\
b_{pp}=\dfrac{a_{pp}+a_{qq}}{2}+\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\cos 2\phi-a_{pq}\sin 2\phi & \\
b_{qq}=\dfrac{a_{pp}+a_{qq}}{2}-\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\cos 2\phi+a_{pq}\sin 2\phi & \\
b_{pq}=\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\sin 2\phi+a_{pq}\cos 2\phi &
\end{cases}
$$

$b_{pq}=0$ とするためには $\tan 2\phi=\dfrac{-2a_{pq}}{a_{pp}-a_{qq}}$ とすればよい.

（注）もし、 $a_{pp} = a_{qq}$ ならば、

$$\varphi = sign(a_{pq})\frac{\pi}{4}$$

と選ぶ。

p, q の選び方

絶対値が最大の非対角要素が0となるように選ぶ

一度0になった要素が後の変換で0でなくなることもありうる（次に「収束」の保証について考察する）

「ヤコビ法の収束について」

相似変換 $B = P^{-1}AP$ において次が成り立つ

(a) $\boxed{\sum_{i,j} a_{ij}^2 = \sum_{i,j} b_{ij}^2}$

(全要素の2乗の和は変わらない)

P は直交行列 $(P^{-1} = {}^tP)$ だから

$${}^tBB = {}^t(P^{-1}AP)(P^{-1}AP) = {}^tPA\,{}^t(P^{-1})P^{-1}AP = P^{-1}\,{}^tAAP$$

対角和は相似変換によって不変だから

$$\mathrm{tr}\,A^TA = \mathrm{tr}\,B^TB$$

成分ごとに書くと

$$\sum_{i,j} a_{ij}^2 = \sum_{i,j} b_{ij}^2$$

補足

対角和(トレース)

$$\mathrm{tr}\, X = \sum_{i=1}^{n} x_{ii}$$

XY の対角和 $= YX$ の対角和

$$\mathrm{tr}\, XY = \sum_{i=1}^{n} \left(XY \right)_{ii} = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{n} x_{ij} y_{ji} \right) = \sum_{j=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{n} y_{ji} x_{ij} \right) = \mathrm{tr}\, YX$$

相似変換によって変わらない

$$\mathrm{tr}\, Y^{-1} XY = \mathrm{tr}\, Y^{-1} \left(XY \right) = \mathrm{tr} \left(XY \right) Y^{-1} = \mathrm{tr}\, X \left(YY^{-1} \right) = \mathrm{tr}\, X$$

(b) $\boxed{b_{pp}^2+b_{qq}^2=a_{pp}^2+2a_{pq}^2+a_{qq}^2}$ の証明.

まず $b_{pp}^2+2b_{pq}^2+b_{qq}^2=a_{pp}^2+2a_{pq}^2+a_{qq}^2$ を示す

$$\begin{cases} b_{pp}=\dfrac{a_{pp}+a_{qq}}{2}+\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\cos 2\phi-a_{pq}\sin 2\phi \\ b_{qq}=\dfrac{a_{pp}+a_{qq}}{2}-\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\cos 2\phi+a_{pq}\sin 2\phi \\ b_{pq}=\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\sin 2\phi+a_{pq}\cos 2\phi \end{cases}$$

において $F=\dfrac{a_{pp}+a_{qq}}{2}$, $G=\dfrac{a_{pp}-a_{qq}}{2}$, $H=a_{pq}$ とおくと

$$\begin{cases} b_{pp}=F+G\cos 2\phi-H\sin 2\phi \\ b_{qq}=F-G\cos 2\phi+H\sin 2\phi \\ b_{pq}=G\sin 2\phi+H\cos 2\phi \end{cases}$$

$$(x+y)^2+(x-y)^2=2x^2+2y^2$$

$$\begin{aligned}
b_{pp}^2+2b_{pq}^2+b_{qq}^2 &= \left\{F+\left(G\cos 2\phi-H\sin 2\phi\right)\right\}^2+\left(F-\left(G\cos 2\phi-H\sin 2\phi\right)\right)^2 \\
&\quad +2\left(G\sin 2\phi+H\cos 2\phi\right)^2 \\
&= 2F^2+2\left(G\cos 2\phi-H\sin 2\phi\right)^2+2\left(G\sin 2\phi+H\cos 2\phi\right)^2 \\
&= 2F^2+2\left\{G^2\cos^2 2\phi+H^2\sin^2 2\phi-2GH\cos 2\phi\sin 2\phi\right\} \\
&\quad +2\left\{G^2\sin^2 2\phi+H^2\cos^2 2\phi+2GH\cos 2\phi\sin 2\phi\right\} \\
&= 2\left(F^2+G^2+H^2\right) \\
&= 2\left\{\left(\frac{a_{pp}+a_{qq}}{2}\right)^2+\left(\frac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\right)^2+a_{pq}^2\right\} \\
&= 2\left\{\frac{a_{pp}^2+a_{qq}^2}{2}+a_{pq}^2\right\} \\
&= a_{pp}^2+2a_{pq}^2+a_{qq}^2
\end{aligned}$$

$$b_{pp}^2 + 2b_{pq}^2 + b_{qq}^2 = a_{pp}^2 + 2a_{pq}^2 + a_{qq}^2$$

において P は $b_{pq} = 0$ となるように選んだから

$$b_{pp}^2 + b_{qq}^2 = a_{pp}^2 + 2a_{pq}^2 + a_{qq}^2$$

以上(a)、(b)から*B*の非対角要素の2乗の和は

(b)より

$$\sum_{i \neq j} b_{ij}^2 = \sum_{i,j} b_{ij}^2 - \left(\sum_{i \neq p,q} b_{ii}^2 + b_{pp}^2 + b_{qq}^2 \right)$$

(a)より　(*)

$$= \sum_{i,j} a_{ij}^2 - \left(\sum_{i \neq p,q} a_{ii}^2 + a_{pp}^2 + 2a_{pq}^2 + a_{qq}^2 \right)$$

$$= \sum_{i \neq j} a_{ij}^2 - 2a_{pq}^2$$

となる

$$\sum_{i \neq j} b_{ij}^2 = \sum_{i \neq j} a_{ij}^2 - 2a_{pq}^2$$

において p, q は $a_{pq}^2 = \max_{i \neq j} a_{ij}^2$ となるように選んだから

全ての $i \neq j$ について

$$a_{ij}^2 \leq a_{pq}^2$$

和をとると $\sum_{i \neq j}$ の項数は $n^2 - n$ だから

$$\sum_{i \neq j} a_{ij}^2 \leq n(n-1) a_{pq}^2 \quad \Longrightarrow \quad \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i \neq j} a_{ij}^2 \leq 2a_{pq}^2$$

よって

$$\sum_{i \neq j} b_{ij}^2 = \sum_{i \neq j} a_{ij}^2 - 2a_{pq}^2 \leq \left\{ 1 - \frac{2}{n(n-1)} \right\} \sum_{i \neq j} a_{ij}^2$$

$$\sum_{i\neq j} b_{ij}^2 \le \left\{1-\frac{2}{n(n-1)}\right\}\sum_{i\neq j} a_{ij}^2$$

$k-1$回相似変換を行った後の行列A_kの要素を $a_{ij}^{(k)}$と書くと

$$\sum_{i\neq j}\left(a_{ij}^{(k)}\right)^2 \le \left\{1-\frac{2}{n(n-1)}\right\}^k \sum_{i\neq j} a_{ij}^2$$

$n\ge 3$に対しては $0<1-2/n(n-1)<1$ だから

$k\to\infty$ のとき $\sum_{i\neq j}\left(a_{ij}^{(k)}\right)^2 \to 0$

よって・・(上のPによる) 相似変換の繰り返しで
非対角成分は全体として0に収束する

「固有値と固有ベクトル」

k回目の相似変換の行列をP_kと書く

$$A_{k+1} = P_k^{-1} A_k P_k, \quad k = 1, 2, \cdots$$

$$T = \lim_{k \to \infty} P_1 P_2 \cdots P_k$$

を作ると、以上の結果から

$$\Lambda = T^{-1} A T$$

ここでΛは対角行列

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & 0 \\ 0 & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

λ_i: Aの固有値

$$\Lambda = T^{-1}AT$$

から

$$AT = T\Lambda$$

T の第i列からなる列ベクトルをt_i とすると

$$T = (t_1, t_2, \cdots, t_n)$$

$$At_k = \lambda_k t_k$$

t_i がAの固有値λ_i に属する固有ベクトルとなる

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

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

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

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

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

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sinϕ、cosϕ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)

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

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

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

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

P_{34}の変換で
変換される部分

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

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

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

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

上記の手続きにより，Aは三重対角行列に変換される