

数値解析 (塩田)

— 固有値・固有ベクトル (実対称行列の Jacobi 法) —

1. 予備知識

- (1) 実対称行列 (実数成分の対称行列) は直交行列によって対角化できる。(直交行列とは $P^{-1} = {}^tP$ となるような正方行列。)
- (2) 直交行列は次の形の行列いくつかの積として書ける:

- 回転の行列 $R(i, j, \theta) := \begin{pmatrix} \vdots & \vdots \\ \cdots \cos \theta \cdots & -\sin \theta \cdots \\ \vdots & \vdots \\ \cdots \sin \theta \cdots & \cos \theta \cdots \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix}$ (i, j 行, i, j 列以外は単位行列に同じ)
- 対称移動の行列 $\begin{pmatrix} \pm 1 & & \\ & \ddots & \\ & & \pm 1 \end{pmatrix}$

2. Jacobi 法

Jacobi 法は実対称行列に対して用いる。

方針

$A = A_0 = (a_{ij})$ を n 次実対称行列とすると、回転の行列 R_0, R_1, \dots をうまく取って

$$A_{k+1} := {}^tR_k A_k R_k \longrightarrow \text{対角行列} \quad (k \rightarrow \infty)$$

となるようにする。

Jacobi 法のアルゴリズム

$$A_0 := A ; P_0 := E ; k := 0 ;$$

repeat

$A_k = (a_{ij})$ の非対角成分 a_{pq} を上手に選ぶ (後述) ;

$$\theta := \begin{cases} \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2a_{pq}}{a_{pp} - a_{qq}} \right) & a_{pp} \neq a_{qq} \text{ のとき} \\ \pi/4 & a_{pp} = a_{qq} \text{ のとき} \end{cases} ;$$

$$R := R(p, q, \theta) ;$$

$$P_{k+1} := P_k R ;$$

$A_{k+1} := {}^t R A_k R \quad (= R^{-1} A_k R = P_{k+1}^{-1} A P_{k+1}) ;$
 $k := k + 1 ;$
 until (終了条件) ;
 A_k の対角成分と P_k の列ベクトルを出力 ;

終了条件 は

$\left\{ \begin{array}{l} \text{非対角成分が全て十分小さい} \quad \text{または} \\ \text{反復回数が十分大きい} \end{array} \right.$

a_{pq} の選び方

古典的ヤコビ法 :

絶対値が最大である非対角成分 a_{pq} を選ぶ。

シリアル・ヤコビ法 :

単純に

for $p := 1$ to n do

for $q := p + 1$ to n do

の順に選んでゆく。

わいヤコビ法 :

しきい値 ε を決めておき、上の順に p, q を取って $|a_{pq}| > \varepsilon$ のときのみ処理をする。 ε の取り方は例えば、

- 1 周目 : $\varepsilon := A$ の非対角成分の絶対値の平均
- 2 周目以降 : 新 $\varepsilon := \frac{1}{10} \varepsilon$

単精度なら 6 周ぐらいで充分。

メモリー・計算量の節約

- (1) A_k, P_k は直前のものだけを記憶しておけばよい。
- (2) A_k は第 p 行、第 q 行、第 p 列、第 q 列だけが、 P_k は第 p 列、第 q 列だけが変化するので、そこだけを計算する。
- (3) A_k は対称行列なので、上三角部分だけを記憶すると更にメモリーを節約できる。(ただし計算式は若干複雑になる。)

実行例

A :

6.00000	0.00000	1.00000	6.00000	1.00000
0.00000	2.00000	4.00000	4.00000	3.00000
1.00000	4.00000	7.00000	8.00000	5.00000
6.00000	4.00000	8.00000	3.00000	5.00000
1.00000	3.00000	5.00000	5.00000	8.00000

1st step :

A_1 :

5.67841	-1.96415	1.96608	-1.33491	-1.48453
-1.96415	0.32550	-0.65919	-0.10960	0.36852
1.96608	-0.65919	21.21323	0.50413	0.05047
-1.33491	-0.10960	0.50413	-5.07016	-0.00000
-1.48453	0.36852	0.05047	-0.00000	3.85303

P_1 :

0.80592	-0.21865	0.16557	-0.48174	-0.20782
0.00000	0.90044	0.34299	-0.23864	-0.12093
-0.49809	-0.36363	0.61612	-0.28431	-0.39905
0.31717	-0.00262	0.48062	0.78915	-0.21367
0.04250	-0.09575	0.49432	-0.08596	0.85865

2nd step :

A_2 :

6.92678	0.09577	0.03596	0.08614	-0.00295
0.09577	-0.26514	-0.03691	-0.00229	-0.00027
0.03596	-0.03691	21.50199	0.00138	-0.00003
0.08614	-0.00229	0.00138	-5.27911	0.00000
-0.00295	-0.00027	-0.00003	-0.00000	3.11547

P_2 :

0.85778	0.08630	0.27060	-0.38010	0.19764
-0.21141	0.87552	0.30121	-0.19235	-0.24708
-0.18776	-0.47211	0.56181	-0.39945	-0.51639
0.22242	0.00991	0.52812	0.80742	-0.13994
-0.36713	-0.05507	0.49143	-0.08386	0.78336

3rd step :

A_3 :

6.92858	0.00007	0.00001	0.00000	-0.00000
0.00007	-0.26647	-0.00000	0.00000	-0.00000
0.00001	-0.00000	21.50214	-0.00000	-0.00000
0.00000	0.00000	-0.00000	-5.27972	0.00000
-0.00000	-0.00000	0.00000	-0.00000	3.11547

P_3 :

0.85534	0.07562	0.27254	-0.38611	0.19830
-0.20163	0.87888	0.29920	-0.19034	-0.24730
-0.19780	-0.46837	0.56212	-0.39842	-0.51651
0.22705	0.00729	0.52870	0.80582	-0.13976
-0.37022	-0.04923	0.49061	-0.08132	0.78307

4-th step :

A_4 :

6.92858	0.00000	-0.00000	-0.00000	-0.00000
0.00000	-0.26647	-0.00000	-0.00000	-0.00000
0.00000	0.00000	21.50214	0.00000	-0.00000
0.00000	0.00000	-0.00000	-5.27972	0.00000
0.00000	-0.00000	0.00000	-0.00000	3.11547

P_4 :

0.85534	0.07562	0.27254	-0.38611	0.19830
-0.20162	0.87888	0.29920	-0.19034	-0.24730
-0.19781	-0.46837	0.56212	-0.39842	-0.51651
0.22705	0.00729	0.52870	0.80582	-0.13976
-0.37022	-0.04922	0.49061	-0.08132	0.78307

Check

$P^{-1} A P$:

6.92858	0.00000	-0.00000	-0.00000	0.00000
0.00000	-0.26647	-0.00000	-0.00000	0.00000
0.00000	-0.00000	21.50214	-0.00000	0.00000
-0.00000	-0.00000	0.00000	-5.27972	0.00000
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	3.11547

本講義の概観

- 目的：計算機を用いた、正確かつ高速な数値計算
- 計算機には誤差を生み出す危険がいっぱい
 - オーバーフロー、アンダーフロー、丸め誤差、積み残し、桁落ち ...
 - 十分な対策と検算を
- 扱った計算：
 - 非線形方程式
 - 補間法
 - 解析編：数値微分、数値積分、微分方程式
 - 線形代数編：連立一次方程式、固有値・固有ベクトル
- 手法は大きく分けて2通り：
 - 反復法
 - 直接法
- 精度の証明道具：
 - 解析編：テイラー展開
 - 線形代数編：ノルム
- 微積分と線形代数の絡み合いも色々：
 - 解析編の「ガウスの積分公式」に、線形代数の内積の概念が使われていたり、
 - 偏微分方程式が、差分を用いて連立一次方程式に書き直せたり、
 - 固有値計算に微分を使ったニュートン法が使えたり。... 学問の繋がりが大切