

# 数値計算・講義資料 (QR法)

担当：緒方秀教 (e-mail) ogata@im.uec.ac.jp

2018年1月18日 (火)

3重対角行列

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

の固有値をQR法で計算した.

計算に用いたMATLABプログラムは, <http://www.uec-ogata-lab.jp> に載せてある.

シフトなしQR法 計算結果

```
A =
  4   -1    0    0    0
 -1    4   -1    0    0
  0   -1    4   -1    0
  0    0   -1    4   -1
  0    0    0   -1    4
```

epsilon = 1.000e-015

|A(n,n)| < epsilon となったら, QR法反復を止め deflation を行う.

step 50

```
A =
  5.7320  -0.0014  -0.0000  -0.0000  0.0000
 -0.0014   5.0000  -0.0000   0.0000 -0.0000
  0  -0.0000   4.0000  -0.0000  0.0000
  0    0  -0.0000   3.0000 -0.0000
  0    0    0  -0.0000  2.2679
```

step 100

```
A =
  5.7321  -0.0000  -0.0000  -0.0000  0.0000
 -0.0000   5.0000  -0.0000   0.0000 -0.0000
  0  -0.0000   4.0000  -0.0000  0.0000
  0    0  -0.0000   3.0000 -0.0000
  0    0    0  -0.0000  2.2679
```

step 125

deflation n=5 to 4

step 126

deflation n=4 to 3

step 130

```
A =
  5.7321  -0.0000  0.0000
```

```
-0.0000  5.0000  0.0000
          0  0.0000  4.0000
```

step 160

A =

```
  5.7321  -0.0000  0.0000
 -0.0000  5.0000  0.0000
          0  0.0000  4.0000
```

step 165

deflation n=3 to 2

step 170

A =

```
  5.7321  -0.0000
 -0.0000  5.0000
```

step 200

A =

```
  5.7321  -0.0000
 -0.0000  5.0000
```

step 250

A =

```
  5.7321  -0.0000
 -0.0000  5.0000
```

step 260

deflation n=2 to 1

固有値 (計算値)

```
5.732050807568872e+000 5.000000000000000e+000 3.999999999999990e+000
3.000000000000000e+000 2.267949192431125e+000
```

固有値 (厳密値)

```
2.267949192431123e+000 3.000000000000000e+000 4.000000000000000e+000
5.000000000000000e+000 5.732050807568877e+000
```

シフト付き QR 法 (1) シフトは右下行列成分を用いた.

計算結果

A =

```
  4  -1  0  0  0
 -1  4  -1  0  0
  0  -1  4  -1  0
  0  0  -1  4  -1
  0  0  0  -1  4
```

epsilon = 1.000e-015

|A(n,n)| < epsilon になったら, QR 法反復を止め deflation を行う.

step 1

shift = 4.000000

A =

4.0000	1.4142	0	0.0000	0
1.4142	4.0000	0.7071	0	0
0	0.7071	4.0000	1.2247	0.0000
0	0	1.2247	4.0000	0
0	0	0	0	4.0000

step 5

shift = 4.000000

A =

4.0000	1.7250	0	0.0000
1.7250	4.0000	0.1273	-0.0000
0	0.1273	4.0000	1.0041
0	0	1.0041	4.0000

step 6

shift = 4.000000

A =

4.0000	-1.7297	-0.0000	-0.0000
-1.7297	4.0000	-0.0739	0.0000
0	-0.0739	4.0000	1.0014
0	0	1.0014	4.0000

★ (4,3) 成分より先に (3,2) 成分が減衰し始めた !?

step 20

shift = 4.000000

A =

4.0000	-1.7321	-0.0000	-0.0000
-1.7321	4.0000	-0.0000	0.0000
0	-0.0000	4.0000	1.0000
0	0	1.0000	4.0000

★  $2 \times 2$  小行列を並べたブロック対角行列になってしまった.

step 34

shift = 3.993227

A =

4.0203	-1.7319	-0.0000	-0.0000
-1.7319	3.9797	-0.0000	0.0000
0	-0.0000	4.0203	0.9998
0	0	0.9998	3.9797

★ようやく (4,3) 成分が減衰し始めた.

step 35

shift = 3.979684

A =

4.0609	1.7310	-0.0000	0.0000
1.7310	3.9391	0.0000	-0.0000
0	0.0000	4.0609	0.9981
0	0	0.9981	3.9391

step 40

shift = 3.000103

A =

5.7284	-0.1129	-0.0000	-0.0000
-0.1129	2.2716	-0.0000	0.0000
0	-0.0000	5.0000	0.0000
0	0	0.0000	3.0000

step 41

shift = 3.000000

A =

5.7318	0.0303	-0.0000	0.0000
0.0303	2.2682	0.0000	0.0000
0	0.0000	5.0000	0.0000
0	0	0.0000	3.0000

step 42

deflation n=4 to 3

shift = 5.000000

A =

5.7284	-0.1129	0.0000
-0.1129	2.2716	0.0000
0	0.0000	5.0000

step 43

deflation n=3 to 2

shift = 2.271635

A =

5.7321	-0.0001
-0.0001	2.2679

step 44

shift = 2.267949

A =

5.7321	-0.0000
-0.0000	2.2679

step 45

shift = 2.267949

A =

5.7321	0.0000
-0.0000	2.2679

step 46

deflation n=2 to 1

固有値 (計算値)

5.732050807568882e+000 2.267949192431123e+000 5.000000000000000e+000  
3.000000000000000e+000 4.000000000000000e+000

固有値 (厳密値)

2.267949192431123e+000 3.000000000000000e+000 4.000000000000000e+000  
5.000000000000000e+000 5.732050807568877e+000

シフト付き QR 法 (2) シフトは Wilkinson シフトを用いた.

計算結果

A =

4	-1	0	0	0
-1	4	-1	0	0
0	-1	4	-1	0
0	0	-1	4	-1
0	0	0	-1	4

epsilon = 1.000e-015

|A(n,n)| < epsilon となったら, QR 法反復を止め deflation を行う.

step 1

shift = 5.000000

A =

3.0000	0.7071	0	-0.0000	-0.0000
0.7071	4.0000	1.2247	-0.0000	-0.0000
0	1.2247	4.3333	-0.9428	-0.0000
0	0	-0.9428	3.6667	-0.0000
0	0	0	0	5.0000

step 2

deflation n=5 to 4

shift = 3.000000

A =

4.0000	-1.4142	0.0000	0.0000
-1.4142	4.0000	-1.0000	-0.0000
0	-1.0000	4.0000	0.0000
0	0	0.0000	3.0000

step 3

```

deflation n=4 to 3
shift = 5.000000
A =
  2.6667    0.9428    0.0000
  0.9428    4.8333   -0.8660
    0   -0.8660    4.5000

```

```

step 7
shift = 4.000000
A =
  2.6385    1.0707    0.0000
  1.0707    5.3615    0.0000
    0    0.0000    4.0000

```

```

step 8
deflation n=3 to 2
shift = 5.732051
A =
  2.2679   -0.0000
 -0.0000    5.7321

```

```

step 9
deflation n=2 to 1

```

固有値 (計算値)

```

2.267949192431123e+000 5.732050807568878e+000 4.000000000000000e+000
3.000000000000000e+000 5.000000000000000e+000

```

固有値 (厳密値)

```

2.267949192431123e+000 3.000000000000000e+000 4.000000000000000e+000
5.000000000000000e+000 5.732050807568877e+000

```

要するに, QR 法はシフトの仕方によって収束の速さが歴然と変わるのである.