数値解析　（塩田）

— 固有値・固有ベクトルの数値計算 —

状況設定

n 次正方行列 A の固有値・固有ベクトルの組 $(\lambda_j, \boldsymbol{v}_j)$ （ $j = 1, 2, \cdots, n$ ）を求めたい。

1. 手計算と同じ方法

1° A の固有多項式 $\varphi(x) = \det(xE - A)$ を求める。

2° ニュートン法等を用いて $\varphi(x) = \det(xE - A)$ を解く。

3° 各固有値 λ に対して

$$(\lambda E - A)\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$$

の非零解 $\boldsymbol{v}$ を求める。ただし $(\lambda E - A)$ は正則ではないので、例えば $\boldsymbol{v}$ の第 1 成分に乱数を入れて残る $(n-1)$ 個の成分についての方程式を立ててガウスの消去法等を用いる。

Frame 法 固有多項式 $\varphi(x) = \det(xE - A) = x^n + c_1 x^{n-1} + \cdots + c_n$ は次のアルゴリズムを用いれば数式処理ソフトを使わずに計算できる：

アルゴリズム

$X := E$;
for $k := 1$ **to** n **do begin**
　$X := AX$;
　$c_k := -(X$ の対角成分和 $)\,/\,k$;
　$X := X + c_k E$;
end;

実行例

```
A:
 -4  6 -9 -6 -8
  4 -9  5  4  4
  4 -2  8  3 -1
  1  0  9 -1  2
 -2 -7  1  1  6

k = 1
X:
 -4  6 -9 -6 -8
  4 -9  5  4  4
  4 -2  8  3 -1
  1  0  9 -1  2
 -2 -7  1  1  6
c[1] = 0
```

```
k = 2
X:
  14  -4 -68  19   5
 -36  67  -1 -45 -41
  13  33  44 -12 -48
  27 -26  56  24  -7
 -27   7   6  -8  25
c[2] = -87

k = 3
X:
   13 -301  269  204  704
   97  253 -230  137 -127
   -8  203 -452 -111 -241
  -37  333 -499  -42 -544
  276  197  192  154 -150
c[3] = 126

k = 4
X:
 -1888 -1923  1936  -731  2047
   599 -1480   288   -20   482
   -89   464 -2761  -248  -466
   656  1587 -1782  -571  -969
   654  -333  1399  -470 -1448
c[4] = 2037

k = 5
X:
 -5369     0     0     0     0
     0 -5369     0     0     0
     0     0 -5369     0     0
     0     0     0 -5369     0
     0     0     0     0 -5369
c[5] = 5369
```

2. 累乗法

絶対値最大の固有値を λ_1 とするとき、$(\lambda_1, \boldsymbol{v}_1)$ の組は次の単純なループで求まる：

アルゴリズム

$\boldsymbol{v} =$ (ランダムな単位ベクトル) ;
do
  新 $\boldsymbol{v} :=$ ($A\boldsymbol{v}$ 方向の単位ベクトル) ;
while not (新 $\boldsymbol{v}$) $\pm$ (旧 $\boldsymbol{v}$) ;
$\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{v}$;
$\lambda_1 =$ ($A\boldsymbol{v}$ と $\boldsymbol{v}$ の比) ;

累乗法の原理

A が対角化可能な状況では固有ベクトルたちは一次独立なので

$$(\text{ 最初の } \boldsymbol{v}\,) = c_1\boldsymbol{v}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{v}_n$$

と書くことができる。$A\boldsymbol{v}_j = \lambda_j\boldsymbol{v}_j$ を繰り返し用いることにより

$$A^k\boldsymbol{v} = c_1\lambda_1^k\boldsymbol{v}_1 + \cdots + c_n\lambda_n^k\boldsymbol{v}_n \qquad (k = 1, 2, \cdots)$$

が成り立つが、

$$|\,\lambda_1\,| > |\,\lambda_2\,| > \cdots$$

の条件下では、k を十分大きくすれば λ_1^k 以外は取るに足らなくなり

$$A^k\boldsymbol{v} \qquad c_1\lambda_1^k\boldsymbol{v}_1$$

となる。

3. ヤコビ法

実対称行列限定の方法。A の両側から回転の行列を上手に掛けてゆくと対角行列に収束し、その対角成分が固有値、回転の行列たちの積が対角化の行列 $P = (\boldsymbol{v}_1 \cdots \boldsymbol{v}_n)$ になる。

参考：`http://lupus.is.kochi-u.ac.jp/shiota/na2016/Jacobi.pdf`

固有値は大切なのでその他にも様々な計算方法が開発されている。