

# 数値解析 (塩田)

— 実対称行列の固有値・固有ベクトル (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  $R(i, j, \theta) := \begin{pmatrix} \vdots & \vdots \\ \cdots \cos \theta \cdots & -\sin \theta \cdots \\ \vdots & \vdots \\ \cdots \sin \theta \cdots & \cos \theta \cdots \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad \left( \begin{array}{l} i, j \text{ 行, } i, j \text{ 列以外} \\ \text{は単位行列に同じ} \end{array} \right)$
- 対称変換の行列  $\begin{pmatrix} \pm 1 & & \\ & \ddots & \\ & & \pm 1 \end{pmatrix}$

## 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

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

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) ;

$$\theta := \frac{1}{2} \arctan \left( \frac{2a_{pq}}{a_{pp} - a_{qq}} \right) ; \quad \left( a_{pp} = a_{qq} \text{ のときは } \theta := \frac{\pi}{4} \right)$$

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

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

$$A_{k+1} := {}^tR A_k R (= R^{-1} A_k R = P_{k+1}^{-1} A P_{k+1}) ;$$

$k = k + 1$  ;  
 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

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

$a_{pq}$  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  $a_{pq}$  を選んでゆく。

わいヤコビ法 :

しきい値  $\varepsilon$  を決めておき、上の順に  $a_{pq}$  を取って  $|a_{pq}| > \varepsilon$  のときのみ処理をする。  $\varepsilon$  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 round :

A :

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 :

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 round :

A :

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 :

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 round :

A :

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 :

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

4th round :

A :

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 :

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