数値解析 (塩田)

— 固有値・固有ベクトルの数値計算 —

状況設定 対角化可能な n 次正方行列 A に対し、A の固有値・固有ベクトルの組

$$(\lambda_j, \boldsymbol{v}_j) \qquad j = 1, 2, \cdots, n$$

を求めたい。

$\boxed{1}$ 手計算と同じ方法

Alg.1

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

2° ニュートン法等を用いて $\varphi_A(x) = 0$ の解を求め、$\lambda_1, \cdots, \lambda_n$ とする。

3° 各固有値 λ_j に対して $(\lambda_j E - A)\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$ の非零解を求め、$\boldsymbol{v}_j$ とする。

ただし、

1° $\varphi_A(x) = x^n + c_1 x^{n-1} + \cdots + c_n$ の係数は次の **Alg.2** (Frame 法) を用いれば数式処理ソフトを使わずに計算できる。

3° $(\lambda_j E - A)$ は正則ではないので、このままではガウスの消去法等が使えない。そこで、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。

Alg.2 (Frame 法)

$X := E_n$
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
```

$\boxed{2}$ 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：

Alg.3 (累乗法)

$\boldsymbol{v} :=$ (ランダムな単位ベクトル)
repeat
  新 $\boldsymbol{v} :=$ ($A\boldsymbol{v}$ 方向の単位ベクトル)
until (新 $\boldsymbol{v}$) $\pm$ (旧 $\boldsymbol{v}$)
$\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{v}$
$\lambda_1 = \langle \boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v} \rangle / \langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{v} \rangle$

原理　A が対角化可能であることを仮定しているので固有ベクトルたちは一次独立であり、

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

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

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

が成り立ち、

$$|\, \lambda_1 \,| > \max(|\, \lambda_2 \,|, \cdots, |\, \lambda_n \,|)$$

の条件下では $A^k\boldsymbol{v} \quad c_1\lambda_1^k\boldsymbol{v}_1$（ k : 十分大 ）となり、$\boldsymbol{v}$ は $\boldsymbol{v}_1$ の方向に安定してゆく。

次の定理を用いれば、2 番目に絶対値の大きい固有値についても固有値・固有ベクトルを求めることができる：

<u>**Th.4**</u>　次の **Alg.5** により行列 B を作ると、

$$\begin{cases} B\boldsymbol{v}_1 = 0\boldsymbol{v}_1 \\ B\boldsymbol{v}_j = \lambda_j \boldsymbol{v}_j \quad (\ j \geqq 2\ ) \end{cases}$$

が成り立つ。すなわち B は A と同じ固有ベクトル $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n$ を持つが、$\boldsymbol{v}_1$ に対する固有値だけが 0 に置き換わっている。

<u>**Alg.5 (デフレーション)**</u>

1° A の転置行列 ${}^tA$ の、λ_1 に対する固有ベクトル $\boldsymbol{u}$ を求める。(A と ${}^tA$ は同じ固有値を持つので、${}^tA$ に対して **Alg.3** を実行すれば良い。)

2° 新$\boldsymbol{u} = \frac{1}{{}^t\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}_1}\boldsymbol{u}$ とおく。($\langle$ 新$\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_1 \rangle = {}^t($新$\boldsymbol{u})\boldsymbol{v}_1 = 1$ となる。)

3° $B = A - \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 {}^t\boldsymbol{u}$ とおく。

☆　A の n 個の固有値の絶対値が

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

のように全て異なっていると仮定する。すると B では λ_2 が絶対値最大の固有値になるので、B に **Alg.3** を適用することによって $(\lambda_2, \boldsymbol{v}_2)$ が求まる。さらに、B と λ_2 に対してデフレーションを行うと $(\lambda_3, \boldsymbol{v}_3)$ が、というように、全ての固有値・固有ベクトルを求めることができる。

<u>**Rem.6**</u>

- 複素行列を扱うときは次の 2 点を修正する
  - 標準内積には共役を付ける：$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \sum_i \overline{x_i}\, y_i$
  - **Alg.3** の終了条件は「新 $\boldsymbol{v}$ と 旧 $\boldsymbol{v}$ の成分比がほぼ等しいこと」
- 絶対値の等しい固有値が存在する場合は、(複素数の) 乱数 r を用いて $B = rE + A$ で累乗法を実行すれば良い。B と A の固有ベクトルは等しく、B の固有値から r を引いた数値が A の固有値になる。

$\boxed{3}$ ヤコビ法

予備知識

(1) 行列 A の各 (i,j) 成分を (j,i) 成分と入れ替えた行列を「A の転置行列」と呼び、${}^tA$ と表す。

(2) ${}^tA = A$ を満たす正方行列を「対称行列」と呼ぶ。

(3) 実数成分の対称行列を「実対称行列」と呼ぶ。

(4) $P^{-1} = {}^tP$ を満たす正方行列を「直交行列」と呼ぶ。P の列ベクトルたちは正規直交基底をなす。また、P の行ベクトルたちも正規直交基底をなす。

(5) 次の形の行列を「回転の行列」と呼ぶ。

$$
\begin{array}{cc}
R(i,j,\theta) := \begin{pmatrix} & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & \cos\theta & \cdots & -\sin\theta & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & \sin\theta & \cdots & \cos\theta & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} & \begin{array}{l} \text{第 } i \text{ 行} \\ \\ \text{第 } j \text{ 行} \end{array} \\
\begin{array}{cc} \text{第 } i \text{ 列} & \qquad \text{第 } j \text{ 列} \end{array} &
\end{array}
\qquad \begin{pmatrix} \text{この 4 個の成分以外} \\ \text{は単位行列に同じ} \end{pmatrix}
$$

(6) 回転の行列は直交行列である。

(7) 直交行列はいくつかの回転の行列と、対称変換の行列 $\begin{pmatrix} \pm 1 & & \\ & \ddots & \\ & & \pm 1 \end{pmatrix}$ の積として表すことができる。

(8) 任意の実対称行列 A はある直交行列 P によって対角化することができる。すなわち、$P^{-1}AP = {}^tPAP$ が対角行列となるようなる直交行列 P が必ず存在する。

ヤコビ法の発想　$A = A_0$ を n 次実対称行列とするとき、回転の行列 $R_0, R_1, \cdots$ をうまく取って

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

となるようにしよう。すると $P = R_0 R_1 \cdots R_k$ が A を (ほぼ) 対角化する直交行列となる。

Alg.7 (ヤコビ法)

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

repeat

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

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

$R := R(p, q, \theta)$
$P_{k+1} := P_k R$
$A_{k+1} := {}^t R A_k R \ (= R^{-1} A_k R = P_{k+1}^{-1} A P_{k+1} \ )$
$k := k + 1$
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

- 非対角成分が全て十分小さい　または
- 反復回数が十分大きい

非対角成分 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 ε を決めておき、上の順に a_{pq} を見て $|a_{pq}| > \varepsilon$ 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。

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
```