数値解析　(塩田)

— 固有値・固有ベクトルの数値計算 —

<u>**状況設定**</u>　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

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

(以後、「固有システム」と呼ぶ) を求めたい。

1. 手計算と同じ方法

アルゴリズム

1° A の固有多項式 $\varphi_A(x) = \det(xE - A)$ を求める。(E は n 次の単位行列)

2° $\varphi_A(x) = 0$ 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。

2° 例えばニュートン法を用いる。

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。

Faddeev-Leverrier 法 (Frame 法 とも呼んでいた)

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

<u>**Faddeev-Leverrier 法の実行例**</u>

```
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

A の固有値が条件

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

を満たせば、λ_1, $\boldsymbol{v}_1$ は次の単純なループで求まる。ただし、$\langle\ ,\ \rangle$ は標準内積 $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i\, y_i$ を表す。

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 $\boldsymbol{v}$) $\fallingdotseq \pm$ (旧 $\boldsymbol{v}$)
$\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{v}$
$\lambda_1 = \langle \boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v} \rangle / \langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{v} \rangle$

<u>**原理**</u>　最初の $\boldsymbol{v}$ を $\boldsymbol{v}_0$ とおく。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、

$$\boldsymbol{v}_0 = c_1 \boldsymbol{v}_1 + \cdots + c_n \boldsymbol{v}_n$$

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

$$A^k \boldsymbol{v}_0 = c_1\, \lambda_1^k\, \boldsymbol{v}_1 + \cdots + c_n\, \lambda_n^k\, \boldsymbol{v}_n \qquad (k = 1, 2, \cdots)$$

が成り立ち、条件 $(*)$ から $A^k \boldsymbol{v}_0 \fallingdotseq c_1\, \lambda_1^k\, \boldsymbol{v}_1$ (k : 十分大) となって $\boldsymbol{v}$ は $\boldsymbol{v}_1$ の方向に安定してゆく。

3. デフレーション

上の仮定 $(*)$ のもと、次の補助命題を用いれば 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>補助命題</u>　次のアルゴリズムにより行列 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。

デフレーション

1° A の転置行列 ${}^tA$ にも累乗法を実行して、${}^tA$ の λ_1 に対する固有ベクトル $\boldsymbol{w}$ を求める。(A と ${}^tA$ は同じ固有値を持つことに注意。)

2° $\boldsymbol{u} = \frac{1}{{}^t\boldsymbol{w}\,\boldsymbol{v}_1}\boldsymbol{w}$ とおく。(分母はスカラーであることに注意。)

3° $B = A - \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 {}^t\boldsymbol{u}$ とおく。($\boldsymbol{v}_1 {}^t\boldsymbol{u}$ は n 次行列であることに注意。)

<u>証明</u>　${}^tA\boldsymbol{u} = \lambda_1 \boldsymbol{u}$ の転置 † を取ると

$${}^t\boldsymbol{u}A = \lambda_1 {}^t\boldsymbol{u}$$

となるので $j \geqq 2$ に対しては

$$(\lambda_1 {}^t\boldsymbol{u})\,\boldsymbol{v}_j = ({}^t\boldsymbol{u}A)\boldsymbol{v}_j = {}^t\boldsymbol{u}(A\boldsymbol{v}_j) = {}^t\boldsymbol{u}(\lambda_j\,\boldsymbol{v}_j) = \lambda_j {}^t\boldsymbol{u}\,\boldsymbol{v}_j$$

が成り立ち、

$$(\lambda_1 - \lambda_j)^t\boldsymbol{u}\,\boldsymbol{v}_j = 0$$

となる。条件 $(*)$ から $\lambda_1 \neq \lambda_j$ ゆえ

$${}^t\boldsymbol{u}\,\boldsymbol{v}_j = 0$$

が言え、従って $j \geqq 2$ に対しては

$$B\boldsymbol{v}_j = (A - \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 {}^t\boldsymbol{u})\boldsymbol{v}_j = A\boldsymbol{v}_j - \lambda_1 \boldsymbol{v}_1({}^t\boldsymbol{u}\,\boldsymbol{v}_j) = \lambda_j \boldsymbol{v}_j - \lambda_1 \boldsymbol{v}_1\,0 = \lambda_j \boldsymbol{v}_j$$

が成り立つ。また

$${}^t\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}_1 = \frac{1}{{}^t\boldsymbol{w}\,\boldsymbol{v}_1}{}^t\boldsymbol{w}\,\boldsymbol{v}_1 = 1$$

ゆえ

$$B\boldsymbol{v}_1 = (A - \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 {}^t\boldsymbol{u})\boldsymbol{v}_1 = A\boldsymbol{v}_j - \lambda_1 \boldsymbol{v}_1({}^t\boldsymbol{u}\,\boldsymbol{v}_1) = \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 - \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{0}$$

となる。(証明終)

† ${}^t(AB) = ({}^tB)({}^tA)$ が成り立ち、縦ベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ について内積は $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = {}^t\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}$ と書ける。

デフレーションの実行例　　前回ネズミの絵で説明した $A = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ の場合

0° A の最大固有値は $\lambda_1 = 4$ で、$\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

1° A は対称行列ゆえ $\boldsymbol{w}$ は $\boldsymbol{v}_1$ と同じで $\boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

2° ${}^t\boldsymbol{w}\,\boldsymbol{v}_1 = (1\ \ 1)\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 + 1 = 2$ ゆえ $\boldsymbol{u} = \dfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$.

$$3^\circ\ \ B = A - \lambda_1 \boldsymbol{v}_1 {}^t\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} - 4\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}(1/2\ \ 1/2)$$
$$= \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

すると、B に累乗法を適用して得られる固有値・固有ベクトルは

$$\lambda_2 = 2,\ \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

定理

A の n 個の固有値の絶対値が

$$|\,\lambda_1\,| > |\,\lambda_2\,| > \cdots > |\,\lambda_n\,| > 0 \qquad \cdots\cdots\ (\sharp)$$

のように全て異なっていると仮定する。このとき、累乗法とデフレーションを繰り返し行うことにより $(\lambda_1, \boldsymbol{v}_1)$, $(\lambda_2, \boldsymbol{v}_2)$, $\cdots$, $(\lambda_n, \boldsymbol{v}_n)$ を全て求めることができる。

4. 累乗法に関する注意

- 複素行列を扱うときは次の 3 点を修正する
  - 標準内積の定義には片方に複素共役を付ける：
  $$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \sum_{i=1}^{n} \overline{x_i} \times y_i$$
  - 累乗法の終了条件は「 新 $\boldsymbol{v}$ $\fallingdotseq$ (旧 $\boldsymbol{v}$ のあるスカラー倍) 」 とする。
  (複素成分の単位ベクトルは、$\pm$ 倍だけでなく $e^{i\theta}$ 倍してもそれと並行だから。)
  - 最初のランダムな $\boldsymbol{v}$ も複素数成分にする。
- A に絶対値の等しい固有値が存在する場合は、複素数の乱数 α を用いて
  $$B = \alpha E + A$$
  を考える。A の固有値に重複がなければ、たいてい B の固有値 μ_j たちは条件 $(\sharp)$ を満たすので、定理により B の固有システム
  $$(\mu_j, \boldsymbol{w}_j) \qquad j = 1, \cdots, n$$
  を求めることができる。このとき
  $$(\mu_j - \alpha, \boldsymbol{w}_j) \qquad j = 1, \cdots, n$$
  として A の固有システムが得られる。