

数値解析 (塩田)

— 実対称行列の対角化 (ヤコビ法) —

1. 実対称行列

転置行列

行列 $A = (a_{ij})$ に対し、 a_{ij} を (j, i) -成分とする行列を「 A の転置行列」と言い、 tA と表す。(t の記号は「 t 乗」と間違わないように左肩に書くことが多い。)

$${}^t\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad {}^t\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \\ 3 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{etc.}$$

命題

積の転置は、転置を逆順に掛けたものになる：

$${}^t(AB) = ({}^tB)({}^tA), \quad {}^t(ABC) = ({}^tC)({}^tB)({}^tA), \quad {}^t(A\mathbf{v}) = ({}^t\mathbf{v})({}^tA) \quad \text{etc.}$$

定義

${}^tA = A$ を満たす行列を対称行列と呼ぶ。2 次、3 次の対称行列はそれぞれ次の形をしている：

$$\begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a & b & c \\ b & d & e \\ c & e & f \end{pmatrix}$$

特に実数成分の対称行列を実対称行列と呼ぶ。

これは特殊な形であると思うかもしれないが、実対称行列で表わされる現象も多い。たとえば方程式

$$ax^2 + 2bxy + cy^2 = r^2$$

は、実対称行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ を用いて

$$\begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = r^2$$

と書き表すことができ、その方程式が表す図形の形状は A の固有システムでわかる (後述)。また、多変数関数の極値を調べるためのヘッセ行列や、統計データの相関行列なども実対称行列になる。

以下、実対称行列の対角化を数値計算する方法について述べる。

2. 2 次の場合

回転の行列

角 θ に対し、次の 2 次正方行列を **回転の行列** と呼ぶ：

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

命題

xy -平面内の縦ベクトル \mathbf{v} を、原点中心、反時計回りに角 θ だけ回転させたベクトルは $R(\theta)\mathbf{v}$ となる。

命題

回転の行列 $R(\theta)$ の逆行列は角 $-\theta$ の回転の行列 $R(-\theta)$ であり、それは $R(\theta)$ の転置行列に等しい。

$$R(\theta)^{-1} = R(-\theta) = {}^t R(\theta)$$

定理

2 次の実対称行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix}$ に対して

$$P = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \theta = \begin{cases} \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{2b}{a-d}\right) & \text{if } a \neq d \\ \frac{\pi}{4} & \text{if } a = d \end{cases}$$

とおくと、 A は P によって対角化できて

$$P^{-1}AP = {}^t P A P = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}.$$

例題 $6x^2 + 4xy + 3y^2 = 1$ はどんな図形か？

解 $A = \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$ とおくと方程式は

$$(x \ y)A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$$

と書くことができる。

$$P = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad \theta = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{2 \times 2}{6 - 3}\right)$$

とおくと

$$P^{-1}AP = {}^t P A P = \begin{pmatrix} 7 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

となるので、 xy -座標を $(-\theta)$ 回転させた座標を XY -座標とすると、 XY -座標では

$$7X^2 + 2Y^2 = 1$$

という楕円であることがわかる。

3. 3 次の場合

3 次の回転の行列

xyz -座標の 3 次元空間では、 xy -座標、 xz -座標、 yz -座標のそれぞれに関する角度 θ の回転を表す行列を考えよう：

$$R_{xy}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$R_{xz}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & -\sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix},$$

$$R_{yz}(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

3 次の実対称行列

$$A = \begin{pmatrix} a & b & c \\ b & d & e \\ c & e & f \end{pmatrix}$$

が与えられたとき、2 次の場合の定理より、適切な角度 θ_1 を選べば

$$A_1 = {}^t R_{xy}(\theta_1) A R_{xy}(\theta_1)$$

は (1,2)-成分が 0 になる。 (A_1) は対称行列なので (1,2)-成分も 0 になる。) 同様に適切な角度 θ_2, θ_3 を選べば

$$A_2 = {}^t R_{xz}(\theta_2) A_1 R_{xz}(\theta_2)$$

は (1,3)-成分, (3,1)-成分が 0 になり、

$$A_3 = {}^t R_{yz}(\theta_3) A_2 R_{yz}(\theta_3)$$

は (2,3)-成分, (3,2)-成分が 0 になる。すなわち

$$P = R_{xy}(\theta_1) R_{xz}(\theta_2) R_{yz}(\theta_3)$$

を用いれば

$$\begin{aligned} A_3 &= P^{-1} A P \\ &= \left(R_{xy}(\theta_1) R_{xz}(\theta_2) R_{yz}(\theta_3) \right)^{-1} A \left(R_{xy}(\theta_1) R_{xz}(\theta_2) R_{yz}(\theta_3) \right) \\ &= {}^t R_{yz}(\theta_3) {}^t R_{xz}(\theta_2) {}^t R_{xy}(\theta_1) A R_{xy}(\theta_1) R_{xz}(\theta_2) R_{yz}(\theta_3) \end{aligned}$$

は対角行列になりそうに思われる。

例 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 4 \\ 3 & 4 & 7 \end{pmatrix}$ に対して上の作戦を実行してみる。

まず (1,2)-成分をターゲットにして

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2a_{12}}{a_{11} - a_{22}} \right) \\ &= \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2 \times 2}{1 - 5} \right) = -0.3926990817, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R_1 &= R_{xy}(\theta_1) \\
&= \begin{pmatrix} 0.9238795325 & 0.3826834324 & 0 \\ -0.3826834324 & 0.9238795325 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

とおく。すると

$$\begin{aligned}
A_1 &= {}^t R_1 A R_1 \\
&= \begin{pmatrix} 0.1715728753 & -0.0000000000 & 1.2409048681 \\ -0.0000000000 & 5.8284271247 & 4.8435684271 \\ 1.2409048681 & 4.8435684271 & 7.0000000000 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

は (1,2)-成分が 0 になる。

次は (1,3)-成分をターゲットにして

$$\begin{aligned}
\theta_2 &= \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2a'_{13}}{a'_{11} - a'_{33}} \right) \\
&= \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2 \times 1.2409048681}{0.1715728753 - 7} \right) = -0.1743043552,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R_2 &= R_{xz}(\theta_2) \\
&= \begin{pmatrix} 0.9848474180 & 0 & 0.17342307564 \\ 0 & 1 & 0 \\ -0.17342307564 & 0 & 0.9848474180 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

とおく。すると

$$\begin{aligned}
A_2 &= {}^t R_2 A_1 R_2 \\
&= \begin{pmatrix} -0.0469396931 & -0.8399865337 & 0.0000000000 \\ -0.8399865337 & 5.8284271247 & 4.7701758596 \\ 0.0000000000 & 4.7701758596 & 7.2185125684 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

となる。確かに (1,3)-成分は 0 になった が、せっかく 0 にした (1,2)-成分が 0 でなくなっ
てしまった。

問題点

一度 0 にした非対角成分が 0 でなくなってしまう。こちらを叩けばあちらが顔を出
す、いわゆる **モグラ叩き状態** になっている。

しかし、めげずにこの作戦を続けてみよう。次は (2,3)-成分をターゲットにして、再び
(1,2)-成分、(1,3)-成分、… と続けて、3 周回してみる：

$$A = \begin{pmatrix} 1.0000000000 & 2.0000000000 & 3.0000000000 \\ 2.0000000000 & 5.0000000000 & 4.0000000000 \\ 3.0000000000 & 4.0000000000 & 7.0000000000 \end{pmatrix}$$

— round 1 —

$$\begin{aligned}
R_1 &= R_{xy}(-0.3926990817) \\
A_1 &= {}^t R_1 A R_1 \\
&= \begin{pmatrix} 0.1715728753 & -0.0000000000 & 1.2409048681 \\ -0.0000000000 & 5.8284271247 & 4.8435684271 \\ 1.2409048681 & 4.8435684271 & 7.0000000000 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

$$R_2 = R_{xz}(-0.1743043552)$$

$$\begin{aligned} A_2 &= {}^t R_2 A_1 R_2 \\ &= \begin{pmatrix} -0.0469396931 & -0.8399865337 & 0.0000000000 \\ -0.8399865337 & 5.8284271247 & 4.7701758596 \\ 0.0000000000 & 4.7701758596 & 7.2185125684 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$R_3 = R_{yz}(-0.7130543098)$$

$$\begin{aligned} A_3 &= {}^t R_3 A_2 R_3 \\ &= \begin{pmatrix} -0.0469396931 & -0.6353384637 & -0.5494746703 \\ -0.6353384637 & 1.7029240147 & 0.0000000000 \\ -0.5494746703 & -0.0000000000 & 11.3440156784 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

round 2

$$R_4 = R_{xy}(0.3140332911)$$

$$\begin{aligned} A_4 &= {}^t R_4 A_3 R_4 \\ &= \begin{pmatrix} -0.2532851914 & 0.0000000000 & -0.5226028516 \\ 0.0000000000 & 1.9092695130 & 0.1697311779 \\ -0.5226028516 & 0.1697311779 & 11.3440156784 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$R_5 = R_{xz}(0.0449410398)$$

$$\begin{aligned} A_5 &= {}^t R_5 A_4 R_5 \\ &= \begin{pmatrix} -0.2767873315 & 0.0076253282 & 0.0000000000 \\ 0.0076253282 & 1.9092695130 & 0.1695598040 \\ 0.0000000000 & 0.1695598040 & 11.3675178185 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$R_6 = R_{yz}(-0.0179195128)$$

$$\begin{aligned} A_6 &= {}^t R_6 A_5 R_6 \\ &= \begin{pmatrix} -0.2767873315 & 0.0076241040 & 0.0001366349 \\ 0.0076241040 & 1.9062307587 & -0.0000000000 \\ 0.0001366349 & -0.0000000000 & 11.3705565729 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

round 3

$$R_7 = R_{xy}(-0.0034924035)$$

$$\begin{aligned} A_7 &= {}^t R_7 A_6 R_7 \\ &= \begin{pmatrix} -0.2768139581 & 0.0000000000 & 0.0001366340 \\ 0.0000000000 & 1.9062573852 & 0.0000004772 \\ 0.0001366340 & 0.0000004772 & 11.3705565729 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$R_8 = R_{xz}(-0.0000117309)$$

$$\begin{aligned} A_8 &= {}^t R_8 A_7 R_8 \\ &= \begin{pmatrix} -0.2768139597 & -0.0000000000 & -0.0000000000 \\ -0.0000000000 & 1.9062573852 & 0.0000004772 \\ 0.0000000000 & 0.0000004772 & 11.3705565745 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$R_9 = R_{yz}(-0.0000000504)$$

$$\begin{aligned} A_9 &= {}^t R_9 A_8 R_9 \\ &= \begin{pmatrix} -0.2768139597 & -0.0000000000 & -0.0000000000 \\ -0.0000000000 & 1.9062573852 & 0.0000000000 \\ 0.0000000000 & -0.0000000000 & 11.3705565745 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

すなわち

$$\begin{aligned} P &= R_1 R_2 R_3 R_4 R_5 R_6 R_7 R_8 R_9 \\ &= \begin{pmatrix} 0.9385567220 & -0.1080624304 & 0.3277709425 \\ -0.1070043104 & 0.8118025918 & 0.5740441007 \\ -0.3281179013 & -0.5738458531 & 0.7503596336 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

を用いれば

$$\begin{aligned} P^{-1} A P &= {}^t P A P \\ &= \begin{pmatrix} -0.2768139597 & -0.0000000000 & -0.0000000000 \\ -0.0000000000 & 1.9062573852 & 0.0000000000 \\ 0.0000000000 & -0.0000000000 & 11.3705565745 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と対角化することに成功した。

4. ヤコビ法

一般のサイズの実対称行列についても、このように非対角要素をターゲットにして回転の行列で挟んでゆき対角化する方法を **ヤコビ法** と呼ぶ。どの順番で非対角要素をターゲットにするかで、いくつかの方式がある。

- シリアルヤコビ法… 添え字の順番通りに非対角要素をターゲットにする
- 古典的ヤコビ法… 絶対値が最大の非対角要素を次のターゲットにする
- 閾値ヤコビ法… 閾値を決めておいて、添え字の順番通りに非対角要素をみて絶対値が閾値以上のときだけターゲットにする

いずれの方法でも、非対角要素がすべて 0 に収束することが示せる。

5. 実対称行列の基礎知識

直交行列

$P^{-1} = {}^t P$ を満たす正方行列を直交行列と呼ぶ。

定理

回転の行列、対称変換の行列、直交行列の積はいずれも直交行列である。

定理

逆に、任意の直交行列は、いくつかの回転の行列と対称変換の行列の積として表すことができる。

定理

実対称行列は直交行列によって対角化できる。