1　固有値問題

与えられた行列 $\mathbf{A}$ について, 方程式 $\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$ を満たす λ と $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, 即ち固有値, 固有ベクトルを求める問題を**固有値問題**という. [1]

命題 1. λ が $\mathbf{A}$ の固有値である事と $|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}| = 0$ は同値。

Proof. λ が $\mathbf{A}$ の固有値である事が $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$ なる $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ が存在する事と同値であることに注意すれば良い. □

命題 2. 任意の正則行列 $\mathbf{B}$ について $\mathbf{C} := \mathbf{B}^{-1}\mathbf{AB}$ は $\mathbf{A}$ と同じ固有値を持つ

Proof. 特に正則性より $|\mathbf{B}| \neq 0$, $|\mathbf{B}^{-1}| \neq 0$ であるので

$$|\mathbf{C} - \lambda\mathbf{I}| = |\mathbf{B}^{-1}(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{B}| = |\mathbf{B}|^{-1}|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}||\mathbf{B}| = |\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}|$$

□

1.1　固有値を求める (ヤコビ法)

対角行列の固有値はその対角成分に等しい事に注意せよ. (実際 $\mathbf{e}_i$ を第 i 成分方向への単位ベクトルとすれば $\mathbf{De}_i = d_{ii}\mathbf{e}_i$) これと命題 2 を併せれば, 行列 $\mathbf{A}$ を対角化 $\mathbf{D} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{AB}$ する事ができれば $\mathbf{D}$ の成分を見る事によって固有値を得る事ができる.

ヤコビ法は反復法によって行列を対角化し, 固有値を求める実対称行列に対する古典的な方法である.

以下 $\mathbf{A}$ は実対称行列, 即ち $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$ で全ての成分が実数と仮定する.

$\mathbf{A}^{(0)} := \mathbf{A}$ とし, 帰納的に $\mathbf{A}^{(k)}$ に対し $\mathbf{A}^{(k+1)}$ を次の様に決める.

- $\mathbf{A}^{(k)}$ の非対角成分 $a_{i,j}^{(k)}$ の中で絶対値が最大になる $a_{p,q}^{(k)}$ $(p < q)$ を探す.
- $\theta^{(k)} := \dfrac{1}{2}\tan^{-1}\dfrac{-2a_{p,q}^{(k)}}{a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}}$ とおいて行列 $\mathbf{P}^{(k)} = (p_{i,j}^{(k)})$ を次で定める;

$$p_{i,j}^{(k)} := \begin{cases} \cos\theta^{(k)} & \text{if } i = j = p \\ \sin\theta^{(k)} & \text{if } i = p \text{ and } j = q \\ -\sin\theta^{(k)} & \text{if } i = q \text{ and } j = p \\ \cos\theta^{(k)} & \text{if } i = j = q \\ 1 & \text{if } i = j \text{ and } i \neq p, q \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- $\mathbf{A}^{(k+1)} := (\mathbf{P}^{(k)})^{-1}\mathbf{A}^{(k)}\mathbf{P}^{(k)}$

[1] 一般の特に高次の行列 $\mathbf{A}$ について固有値を求める事は難しい. $n \times n$ の行列の固有値を求める事は n 次の方程式を解くことに帰着できるが, 良く知られているように 5 次以上の方程式に一般的な解の公式は存在しない.

このとき各 $a_{i,i}^{(k)}$ が固有値に収束する.

命題 3. $\mathbf{A}^{(k)}$ *は次の意味で対角行列に収束する;*

$$\sum_{i\neq j}(a_{i,j}^{(k)})^2 \to 0.$$

特にある $r<1$*,* $C>0$ *があって*

$$\sum_{i\neq j}(a_{i,j}^{(k)})^2 \leq Cr^k.$$

相似変換 $\mathbf{A}^{(k+1)} := \mathbf{P}^{(k)\,-1}\mathbf{A}^{(k)}\mathbf{P}^{(k)}$ によって固有値が保存される事を考えれば, 次の命題により各 $a_{i,i}^{(k)}$ が固有値に収束する事が分る.

命題 4.

$$\sum_{i\neq j}|b_{i,j}| \leq \varepsilon$$

なる行列 $\mathbf{B}=(b_{i,j})$ *の固有値は* $\Delta_i := \{z \mid |z-b_{i,i}| \leq \varepsilon\}$ *なる集合の共通部分* $\Delta := \bigcup_i \Delta_i$ *に含まれる.*

Proof of Prop 3. $\mathbf{A}^{(k+1)}$ の各成分は定義により,

$$\begin{aligned}
a_{p,p}^{(k+1)} &= \cos\theta^{(k)}a_{p,p}^{(k)}\cos\theta^{(k)} - \cos\theta^{(k)}a_{p,q}^{(k)}\sin\theta^{(k)} - \sin\theta^{(k)}a_{q,p}^{(k)}\cos\theta^{(k)} + \sin\theta^{(k)}a_{q,q}^{(k)}\sin\theta^{(k)}\\
a_{p,q}^{(k+1)} &= \cos\theta^{(k)}a_{p,p}^{(k)}\sin\theta^{(k)} + \cos\theta^{(k)}a_{p,q}^{(k)}\cos\theta^{(k)} - \sin\theta^{(k)}a_{q,p}^{(k)}\sin\theta^{(k)} - \sin\theta^{(k)}a_{q,q}^{(k)}\cos\theta^{(k)}\\
a_{q,p}^{(k+1)} &= \sin\theta^{(k)}a_{p,p}^{(k)}\cos\theta^{(k)} - \sin\theta^{(k)}a_{p,q}^{(k)}\sin\theta^{(k)} + \cos\theta^{(k)}a_{q,p}^{(k)}\cos\theta^{(k)} - \cos\theta^{(k)}a_{q,q}^{(k)}\sin\theta^{(k)}\\
a_{q,q}^{(k+1)} &= \sin\theta^{(k)}a_{p,p}^{(k)}\sin\theta^{(k)} + \sin\theta^{(k)}a_{p,q}^{(k)}\cos\theta^{(k)} + \cos\theta^{(k)}a_{q,p}^{(k)}\sin\theta^{(k)} + \cos\theta^{(k)}a_{q,q}^{(k)}\cos\theta^{(k)}\\
a_{p,j}^{(k+1)} &= \cos\theta^{(k)}a_{p,j}^{(k)} - \sin\theta^{(k)}a_{q,j}^{(k)}\\
a_{q,j}^{(k+1)} &= \sin\theta^{(k)}a_{p,j}^{(k)} + \cos\theta^{(k)}a_{q,j}^{(k)}\\
a_{i,p}^{(k+1)} &= a_{i,p}^{(k)}\cos\theta^{(k)} - a_{i,q}^{(k)}\sin\theta^{(k)}\\
a_{i,q}^{(k+1)} &= a_{i,p}^{(k)}\sin\theta^{(k)} + a_{i,q}^{(k)}\cos\theta^{(k)}\\
a_{i,j}^{(k+1)} &= a_{i,j}^{(k)}
\end{aligned}$$

ただし $i,j \neq p,q$. $\mathbf{A}^{(k)}$ に対称性があると仮定すれば整理できて

$$\begin{aligned}
a_{p,p}^{(k+1)} &= a_{p,p}^{(k)}\cos^2\theta^{(k)} - a_{p,q}^{(k)}\sin 2\theta^{(k)} + a_{q,q}^{(k)}\sin^2\theta^{(k)}\\
a_{p,q}^{(k+1)} = a_{q,p}^{(k+1)} &= \frac{a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}}{2}\sin 2\theta^{(k)} + a_{p,q}^{(k)}\cos 2\theta^{(k)}\\
a_{q,q}^{(k+1)} &= a_{p,p}^{(k)}\sin^2\theta^{(k)} + a_{p,q}^{(k)}\sin 2\theta^{(k)} + a_{q,q}^{(k)}\cos^2\theta^{(k)}\\
a_{p,j}^{(k+1)} = a_{j,p}^{(k+1)} &= \cos\theta^{(k)}a_{p,j}^{(k)} - \sin\theta^{(k)}a_{q,j}^{(k)}\\
a_{q,j}^{(k+1)} = a_{j,q}^{(k+1)} &= \sin\theta^{(k)}a_{p,j}^{(k)} + \cos\theta^{(k)}a_{q,j}^{(k)}\\
a_{i,j}^{(k+1)} &= a_{i,j}^{(k)}
\end{aligned}$$

であり $\mathbf{A}^{(k+1)}$ も対称行列, $\mathbf{A}^{(0)}$ は対称行列なので帰納法により上の仮定は正しい．特に $\theta^{(k)}$ の取り方により $a_{p,q}^{(k+1)} = a_{q,p}^{(k+1)} = 0$ である．これにより

$$\sum_{i \neq j} (a_{i,j}^{(k+1)})^2 = \sum_{i \neq j} (a_{i,j}^{(k)})^2 - 2(a_{q,p}^{(k)})^2$$

$a_{q,p}^{(k)}$ の最大性より

$$\sum_{i \neq j} (a_{i,j}^{(k+1)})^2 \leq \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right) \sum_{i \neq j} (a_{i,j}^{(k)})^2$$

□

Proof of Prop 4. λ と $\mathbf{x}$ を $\mathbf{B}$ のある固有値とそれに対応する固有ベクトルとする．$\mathbf{x} = (x_i)$ の絶対値の最も大きい成分を $x_{i_{\max}}$ と置く．$(\lambda \mathbf{x})_{i_{\max}} = (\mathbf{B}\mathbf{x})_{i_{\max}}$ より

$$\lambda x_{i_{\max}} = \sum_j b_{i_{\max},j} x_j$$

よって

$$\begin{aligned} |\lambda - b_{i_{\max},i_{\max}}| &= |\sum_{j \neq i_{\max}} b_{i_{\max},j} \frac{x_j}{x_{i_{\max}}}| \\ &\leq \sum_{j \neq i_{\max}} |b_{i_{\max},j}| |\frac{x_j}{x_{i_{\max}}}| \\ &\leq \sum_{j \neq i_{\max}} |b_{i_{\max},j}| = \varepsilon \end{aligned}$$

□