

1 固有値問題

与えられた行列 A について, 方程式 $Ax = \lambda x$ を満たす λ と $x \neq 0$, 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 A の固有値である事と $|A - \lambda I| = 0$ は同値。

Proof. λ が A の固有値である事が $(A - \lambda I)x = 0$ なる $x \neq 0$ 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 B について $C := B^{-1}AB$ は A と同じ固有値を持つ

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

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

□

1.1 固有値を求める (ヤコビ法)

対角行列 D の固有値はその対角成分に等しい事に注意せよ。(実際 e_i を第 i 成分方向への単位ベクトルとすれば $De_i = d_{ii}e_i$) これと命題 2 を併せれば, 行列 A を対角化 $D = B^{-1}AB$ する事ができれば 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 A は実対称行列, 即ち $A = A^T$ で全ての成分が実数と仮定する。

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

- $A^{(k)}$ 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。
- $\theta^{(k)} := \frac{1}{2} \arctan \frac{-2a_{p,q}^{(k)}}{a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}}$ において行列 $B^{(k)} = (B_{i,j}^{(k)})$ を次で定める;

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

- $A^{(k+1)} := (B^{(k)})^{-1}A^{(k)}B^{(k)}$

このとき各 $a_{i,i}^{(k)}$ が固有値に収束する。

命題 3. $A^{(k)}$ は次の意味で対角行列に収束する;

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

特にある $r < 1$, $C > 0$ があって

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

¹一般の特に高次の行列 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。

相似変換 $A^{(k+1)} := P^{(k)-1} A^{(k)} P^{(k)}$ 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.

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

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

Proof of Prop 3. $A^{(k+1)}$ 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 $i, j \neq p, q$. $A^{(k)}$ 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 $A^{(k+1)}$ も対称行列, $A^{(0)}$ 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. また

$$(a_{p,j}^{(k+1)})^2 + (a_{q,j}^{(k+1)})^2 = (a_{p,j}^{(k)})^2 + (a_{q,j}^{(k)})^2$$

であるから,

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

$a_{q,p}^{(k)}$ 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 x を A のある固有値とそれに対応する固有ベクトルとする. $x = (x_i)$ の絶対値の最も大きい成分を $x_{i_{\max}}$ と置く.

固有値と固有ベクトルであるから $(\lambda x)_{i_{\max}} = (Ax)_{i_{\max}}$ であって, 即ち $\lambda x_{i_{\max}} = \sum_j a_{i_{\max},j} x_j$.
よって

$$|\lambda - a_{i_{\max},i_{\max}}| = \left| \sum_{j \neq i_{\max}} a_{i_{\max},j} \frac{x_j}{x_{i_{\max}}} \right| \leq \sum_{j \neq i_{\max}} |a_{i_{\max},j}| \left| \frac{x_j}{x_{i_{\max}}} \right| \leq \sum_{j \neq i_{\max}} |a_{i_{\max},j}| \leq \varepsilon$$

□

1.2 アルゴリズムについて

ヤコビ法の $B^{(k)}$ は明示的に $\theta^{(k)}$ を求めなくても計算できる.

まず $\arctan$ より $-\frac{\pi}{2} \leq 2\theta^{(k)} \leq \frac{\pi}{2}$ であったので $\cos 2\theta^{(k)} \geq 0$ で

$$\cos^2 \theta^{(k)} = \frac{1}{2}(\cos 2\theta^{(k)} + 1) = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{1}{\tan^2 2\theta^{(k)} + 1}} + 1\right) = \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{(a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)})^2}{(-2a_{p,q}^{(k)})^2 + (a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)})^2}} + 1\right)$$

$$|2 \sin \theta^{(k)} \cos \theta^{(k)}| = |\sin 2\theta^{(k)}| = \sqrt{\frac{1}{\tan^{-2} 2\theta^{(k)} + 1}} = \sqrt{\frac{(-2a_{p,q}^{(k)})^2}{(-2a_{p,q}^{(k)})^2 + (a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)})^2}}$$

ところで収束に必要であったのは

$$0 = \frac{a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}}{2} \sin 2\theta^{(k)} + a_{p,q}^{(k)} \cos 2\theta^{(k)}$$

であったので $2\theta^{(k)}$ に $+2\pi$ の任意性があり, $\cos \theta^{(k)} < 0$ のときは $\tilde{\theta}^{(k)} := \theta^{(k)} + \pi$ を採用してもよく,

$$\cos \tilde{\theta}^{(k)} = \cos(\theta^{(k)} + \pi) = -\cos \theta^{(k)} > 0$$

つまり, $B_{pp}^{(k)} = B_{qq}^{(k)}$ を非負に固定しても収束は保証できて $\sin \tilde{\theta}^{(k)} \cos \tilde{\theta}^{(k)}$ の符号は $\sin \theta^{(k)} \cos \theta^{(k)}$ の符号, $\sin 2\theta^{(k)}$ の符号, 結局 $\frac{-2a_{p,q}^{(k)}}{a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}}$ の符号に等しいので

$$\begin{aligned} r &:= \sqrt{(-2a_{p,q}^{(k)})^2 + (a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)})^2} \\ B_{pp}^{(k)} = B_{qq}^{(k)} &:= \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{|a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}|}{r} + 1\right)} \\ B_{pq}^{(k)} = -B_{qp}^{(k)} &:= \frac{|a_{p,q}^{(k)}|}{r} / B_{pp} \operatorname{sign} \frac{-2a_{p,q}^{(k)}}{a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}} \end{aligned}$$

としても良い. ここで sign は正負の符合を表す. 積でも符号は同じであるので $-a_{p,q}^{(k)}(a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)})$ の正負を判定すれば十分である.