1 固有値問題 (べき乗法)

ベキ乗法は主に最大固有値とその固有ベクトルを求める方法である．また, $n \times n$ の行列は基本的に行列 A のみしか扱わず, 変更もしないので行列の次数が大きいときに有用である．

以下 $\mathbf{A}$ をその固有値で絶対値が一番大きいものが唯一つである行列とする．即ち, $|\lambda_1| > |\lambda_j|$ $(j \neq 1)$ とする．[1]

命題 1. $\mathbf{u}_1$ を λ_1 の単位固有ベクトルとする, $(\mathbf{u}_1, \mathbf{x}^{(0)}) \neq 0$, $|\mathbf{x}^{(0)}| = 1$ なる $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ から

$$\mathbf{y}^{(k)} := \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}, \qquad \mathbf{x}^{(k+1)} := \frac{\mathbf{y}^{(k)}}{\|\mathbf{y}^{(k)}\|}$$

とおけば

$$(\mathbf{y}^{(k)}, \mathbf{x}^{(k)}) \to \lambda_1.$$

Proof. 簡単の為に固有値がすべて単根で n 個ある場合のみ示す．

$\mathbf{u}_i$ を各 λ_i に対応する単位固有ベクトルとすると上記の仮定より $\mathbf{u}_i$ は一次独立で任意の $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ が $\mathbf{x}^{(0)} = \alpha_1\mathbf{u}_1 + \alpha_2\mathbf{u}_2 + \cdots + \alpha_n\mathbf{u}_n$ と書ける．仮定より $\alpha_1 = (\mathbf{u}_1, \mathbf{x}^{(0)}) \neq 0$.

この時 $\mathbf{x}^{(2)} = \mathbf{y}^{(1)}/\|\mathbf{y}^{(1)}\|$ は

$$\mathbf{x}^{(2)} = \frac{\mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)}}{\|\mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)}\|} = \frac{\mathbf{A}\dfrac{\mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}}{\|\mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}\|}}{\|\mathbf{A}\dfrac{\mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}}{\|\mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}\|}\|} = \frac{\mathbf{A}^2\mathbf{x}^{(0)}}{\|\mathbf{A}^2\mathbf{x}^{(0)}\|}$$

以下同様にして $\mathbf{x}^{(k)} = \dfrac{\mathbf{A}^k\mathbf{x}^{(0)}}{\|\mathbf{A}^k\mathbf{x}^{(0)}\|}$ であるから

$$\alpha_i^{(k)} := \frac{\alpha_i\lambda_i^k}{\|\mathbf{A}^k\mathbf{x}^{(0)}\|}$$

とおけば

$$\mathbf{x}^{(k)} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^{(k)}\mathbf{u}_i$$

更に $1 = \|\mathbf{x}^{(k)}\| = |\alpha_1^{(k)}| + \cdots + |\alpha_n^{(k)}|$, また $i \neq 1$ で $|\lambda_i| < |\lambda_1|$ と仮定されているので

$$|\alpha_i^{(k)}| \leq \frac{|\alpha_i^{(k)}|}{|\alpha_1^{(k)}|} = \frac{|\alpha_i|}{|\alpha_1|}\Big(\frac{|\lambda_i|}{|\lambda_1|}\Big)^k \to 0 \quad (k \to \infty)$$

よって

$$(\mathbf{y}^{(k)}, \mathbf{x}^{(k)}) \to \lambda_1.$$

□

特に $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$ を満たすとき, $\mathbf{x}^{'(0)} := \alpha_2\mathbf{u}_2 + \cdots + \alpha_n\mathbf{u}_n$ (即ち $(\mathbf{u}_1, \mathbf{x}^{'(0)}) = 0$ かつ $(\mathbf{u}_2, \mathbf{x}^{'(0)}) \neq 0$) とすれば λ_2 を求める事ができる．理論的にはこの方法で任意の固有値と固有ベクトルを求める事が可能であるが, 実はこれはあまり実際的ではない．誤差を完全に排除する事は不可能であるから $\mathbf{x}^{'(0)}$ は

$$\mathbf{x}^{'(0)} = \varepsilon\mathbf{u}_1 + \alpha_2\mathbf{u}_2 + \cdots + \alpha_n\mathbf{u}_n$$

しか望めない, しかもこのときの誤差は k 段目では $(\dfrac{\lambda_1}{\lambda_2})^k\varepsilon$ となり, $|\frac{\lambda_1}{\lambda_2}| > 1$ であるから指数的に増幅されてしまう．

[1] この時, 特に $\mathbf{A}$ が実行列ならば λ_1 も実数である．(λ_1 は実係数代数方程式の解なので複素解とすれば共役も解であるので $|\lambda_1| = |\bar{\lambda}_1| = |\lambda_j|$, $1 \neq j$ なるものがある)

2　逆反復法

固有値 λ_s のある近似値が与えられているとき, ベキ乗法を応用する事によって更に良い精度の値を求める事ができる.

また, この方法によって他のアルゴリズムによって得た固有値から固有ベクトルを求める事もできる.

命題 2. μ が他のどの固有値よりも λ_s に近いとき, 即ち $|\lambda_s - \mu| < |\lambda_j - \mu| (j \neq s)$ ならば $(\mathbf{u}_s, \mathbf{x}^{(0)}) \neq 0$, $|\mathbf{x}^{(0)}| = 1$ なる $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ から

$$(\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})\mathbf{y}^{(k)} := \mathbf{x}^{(k)}, \qquad \mathbf{x}^{(k)} := \frac{\mathbf{y}^{(k)}}{\|\mathbf{y}^{(k)}\|}$$

とおけば

$$(\mathbf{y}^{(k)}, \mathbf{x}^{(k)}) \to \frac{1}{\lambda_s - \mu}.$$

Proof. $\mathbf{B} := (\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})^{-1}$ とおけば, 上の方法は $\mathbf{B}$ に対する反復法とみなせる. よって $\frac{1}{\lambda_s - \mu}$ が $\mathbf{B}$ の最大の固有値である事を示せばよい.

$$\mathbf{u}_j = \frac{1}{\lambda_j - \mu}(\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})\mathbf{u}_j$$

より

$$\mathbf{B}\mathbf{u}_j = \frac{1}{\lambda_j - \mu}\mathbf{u}_j$$

であるから $\dfrac{1}{\lambda_j - \mu}$ は $\mathbf{B}$ の固有値で対応する固有ベクトルは $\mathbf{u}_j$ である. 後はベキ乗法と同じ. □

k 段目の $\mathbf{x}^{(k)}$ の値を求めるには連立方程式を解かなければならない.