

第 8 章

行列の固有値・固有ベクトルと固有空間

行列の固有値・固有ベクトルの定義は既に述べたが、手計算で求めるには手数がかかることは容易にわかる。すべての固有値を求めるには、固有多項式を算出して解く必要があり、更に固有ベクトルは定義式からランク落ちの連立一次方程式を解かねばならない。また、5 次以上の正方行列になると固有多項式も 5 次となり、解の公式が存在しないため近似法を用いて固有値に近い近似値を求めるしか方法がなくなる。現在では、少なくとも対角化可能な行列については高速に固有値・固有ベクトルを解く方法が確立しているため、MATLAB でも簡単に求めることができる。本章ではその手法を通じて固有値と固有ベクトルの性質を MATLAB を動かしながら確認していく。

8.1 固有値・固有ベクトルの性質

前述したように、 n 次正方行列 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ の固有値 $\lambda_i \in \mathbb{C} (i = 1, 2, \dots, n)$ および対応する固有ベクトル $\mathbf{v}_i \in \mathbb{C}^n, \mathbf{v}_i \neq 0, (i = 1, 2, \dots, n)$ は

$$A\mathbf{v}_i = \lambda_i\mathbf{v}_i \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (8.1)$$

という関係式を満足するものである。特に固有値はゼロ以外と定義されているので、 $(A - \lambda_i I)\mathbf{v}_i = 0$ を満足することから、固有ベクトル \mathbf{v}_i を未知数とする連立一次方程式

$$(A - \lambda_i I)\mathbf{v}_i = 0$$

における係数行列 $A - \lambda_i I$ は正則行列にはならない。正則であれば両辺に $(A - \lambda_i I)^{-1}$ を左から乗じることで、 $\mathbf{v}_i = 0$ という解しか得られないからである。これは固有ベクトルの定義に反する。

従って、 $A - \lambda_i I$ が非正則行列であることから、必ず $\text{rank}(A - \lambda_i I) < n$ となる必要がある。それ故に

$$|A - \lambda I| = \lambda^n + c_{n-1}\lambda^{n-1} + \dots + c_1\lambda + c_0 = 0 \quad (8.2)$$

という固有多項式 (特性多項式, eigen polynomial) をゼロとする高々 n 個の $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n \in \mathbb{C}$ が固有値ということになる。

「高々 n 個」とは、重複する場合も重複分を含めて n 個とカウントする、という意味である。ここが重要なポイントとなるので、以下、 $n = 2$ の場合に限定して $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ の固有値が

1. $\lambda_1 \neq \lambda_2$ の場合
2. 重解 $\lambda_1 = \lambda_2$ になる場合

に分けて考えることにしよう。

8.1.1 $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ の例

今,

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$$

の固有多項式 $|A - \lambda I|$ が

$$|A - \lambda I| = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

を満足するものとしよう。これを

$$\lambda^2 + c_1\lambda + c_0 = 0 \tag{8.3}$$

と書くと, c_1, c_0 はそれぞれ A の要素から計算される定数となる。 A が実数行列であることから, c_1, c_0 も必ず実数になる。

さすれば判別式

$$d = c_1^2 - 4c_0 = 0$$

を計算することで, $d = 0$ の時は重解, $d \neq 0$ の時, 即ち $d > 0$ (実数解) もしくは $d < 0$ (複素数解) の時は異なる解を持つことが分かる。

■ $d \neq 0$ の場合 例えば

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

の時, $d = 1 > 0$ となり, 実数解 3, 2 を持つ。 $\lambda_1 = 3, \lambda_2 = 2$ とすると, それぞれの固有値に対応する固有ベクトル $\mathbf{v}_1 = [v_1^{(1)} \ v_2^{(1)}]^T, \mathbf{v}_2 = [v_1^{(2)} \ v_2^{(2)}]^T$ は

$$(A - \lambda_1 I)\mathbf{v}_1 = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{v}_1 = \alpha \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \alpha \text{ は非ゼロの定数}$$

$$(A - \lambda_2 I)\mathbf{v}_2 = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^{(2)} \\ v_2^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{v}_2 = \beta \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \beta \text{ は非ゼロの定数}$$

となる。ここで \mathbf{v}_1 の集合 \mathcal{V}_1 が

$$\mathcal{V}_1 = \{ \mathbf{v}_1 \mid (A - \lambda_1 I)\mathbf{v}_1 = 0 \} \subset \mathbb{R}^2$$

作れる。この \mathcal{V}_1 を固有値 $\lambda_1 = 3$ に対応する固有空間 (eigenspace) と呼ぶ。これはランク落ちの連立一次方程式がなす線型空間であることは既に見てきた。

同様に, 固有値 $\lambda_2 = 2$ に対応する固有空間 \mathcal{V}_2 は

$$\mathcal{V}_2 = \{ \mathbf{v}_2 \mid (A - \lambda_2 I)\mathbf{v}_2 = 0 \} \subset \mathbb{R}^2$$

となる。この場合, 明らかに

$$\mathcal{V}_1 \cap \mathcal{V}_2 = \{ 0 \}$$

であるので, それぞれの固有値に対応する固有ベクトルが一致することはない。つまり, $\mathbf{v}_1 \in \mathcal{V}_1$ と $\mathbf{v}_2 \in \mathcal{V}_2$ は一次独立となり, この二つの固有ベクトルを並べて作った 2 次の正方行列

$$V = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2] = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ \alpha & \beta \end{bmatrix}$$

は正則行列となる。一例として、 $\alpha = \beta = 1$ とおくと

$$V = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

とすると、

$$V^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

となる。この時、相似変換 (similar transformation) によって

$$V^{-1}AV = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \quad (8.4)$$

となることが分かる。このように、固有ベクトルを並べて作った行列を使って相似変換することによって、固有値が対角要素となる対角行列に変換できる行列を、対角化可能 (diagonalizable) な行列、と呼ぶ。つまり、異なる固有値を持つ行列の場合は、必ず対角化できる、ということになる。

■ $d = 0$ かつ対角化可能な場合 重解を持つときは対角化可能なケースと対角化不可能なケースに分かれる。まず、対角化可能なケースを見ていくことにしよう。

行列 $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ を

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$$

とする。この時、 $\lambda_1 = \lambda_2 = 3$ となる。この時 $A - \lambda_1 I = A - \lambda_2 I = O$ であるから、固有ベクトル $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ は任意の非ゼロベクトルであれば何でも良いということになる。つまり

$$\mathcal{V}_1 = \mathcal{V}_2 = \mathbb{R}^2$$

であるから、一時独立なベクトルを二つ \mathbb{R}^2 から選ぶことができ、例えば

$$V = I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

とすれば、相似変換によって対角化可能であることが分かる。

■ $d = 0$ かつ対角化不可能な場合 行列 $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ を

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$$

とする。この時、 $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda = 3$ となるが

$$(A - \lambda I)\mathbf{v} = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow v_2 = 0$$

となることから、固有空間 \mathcal{V} は

$$\mathcal{V} = \{ \mathbf{v} \mid v_2 = 0 \}$$

となり、二つの一次独立な固有ベクトルを取ることは出来ない。

しかし

$$(A - \lambda I)^2 = O$$

となることから、一般化固有空間

$$\mathcal{U}_2 = \{ \mathbf{u}_2 \mid (A - \lambda I)^2 \mathbf{u}_2 = 0 \}$$

からもう一つ、 \mathbf{v} と一次独立なベクトル \mathbf{u}_2 を持ってくるのが可能となる。例えば $\mathbf{v} = [1 \ 0]^T$ とすれば、 $\mathbf{u}_2 = [0 \ 1]^T$ として

$$V = [\mathbf{v} \ \mathbf{u}_2] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I$$

とすれば、 V は正則行列となり、少なくとも

$$V^{-1}AV = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$$

という形式にはなる。これを2次の Jordan ブロック (Jordan 標準形) と呼ぶ。

■まとめ 以上をまとめると、 $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ の時は次の (1)~(3) のケースに分類できる。

(1) 二つの異なる固有値を持つ場合 …… 対応する固有ベクトルを並べてできる行列 V を用いた相似変換によって対角化可能。

同じ固有値 $\lambda = \lambda_1 = \lambda_2$ を持つ場合

(2) 対角化可能な場合 …… 固有空間 $\mathcal{V} = \mathbb{R}^2$ の時、即ち、二つの一次独立な固有ベクトルが取れる時、対角化可能。

(3) 対角化不可能な場合 …… 固有空間 $\mathcal{V} \subset \mathbb{R}^2$ の時、一般化固有空間 \mathcal{U}_2 からもう一つの一次独立なベクトル \mathbf{u}_2 を取り、 $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$ と合わせて $V = [\mathbf{v} \ \mathbf{u}_2]$ を作り、相似変換によって二次の Jordan ブロック

$$V^{-1}AV = \begin{bmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix}$$

を作ることができる。

問題 8.1

- (8.3) の係数 c_1, c_0 を A の要素を使って表わせ。
- 上の関係式を用いて、固有多項式において判別式 d が $d = 0, d > 0, d < 0$ となる行列 A を一つ以上、それぞれ作れ。
- $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ がそれぞれ

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

である時、対角化可能か不可能かを答えよ。対角化不可能な場合は Jordan 標準形を求めよ。

8.1.2 対角化可能な行列と Jordan 標準形

一般の n 次正方行列、 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ に対しては大きく二つのケースに分類される。

(A) 対角化可能な場合 …… すべての固有値に対応する固有空間の次元数 (=自由度) を合計すると次元数 n と一致する場合。例えば下記のケースが該当する。

(A-1) すべての異なる固有値 λ_i を持つ場合 …… 対応する固有空間 \mathcal{V}_i から固有ベクトル $\mathbf{v}_i \in \mathcal{V}_i$ を持ってくる と一次独立となり、この固有ベクトルを並べてできる正則行列 $V = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \dots \ \mathbf{v}_n] \in \mathbb{C}^{n \times n}$ を用いて

$$V^{-1}AV = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{bmatrix} = \Lambda \quad (8.5)$$

と対角化できる。

(A-2) 重複固有値の重複度と固有空間の次元数 (=自由度) が一致する場合 …… 例えば n 個の固有値がすべて重複していても ($\lambda = \lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n$), $\mathcal{V} = \mathbb{C}^n$ であれば, n 個の一次独立な固有ベクトル $\mathbf{v}_i \in \mathbb{C}^n$ が取れ, (8.5) 同様の対角化が可能である。

(B) 対角化不可能な場合 …… 重複度が 2 以上の固有値に対応する固有空間が一つでも重複度未満の次元数であれば, その部分が Jordan ブロックとなり, 対角化は不可能になる。この場合は例えば $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ に該当する固有空間の次元数が 1 だとすると, $\mathbf{u}_2 \in \mathcal{U}_2 = \{ \mathbf{u}_2 \mid (A - \lambda I)^2 \mathbf{u}_2 = 0 \}$ から一般化固有ベクトル $\mathbf{u}_2 \in \mathcal{U}_2$ を取り, 固有ベクトル $\mathbf{v}_1 \in \mathcal{V}_1$ と合わせて $V = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \mathbf{v}_3 \ \dots \ \mathbf{v}_n]$ を作り

$$V^{-1}AV = \left[\begin{array}{cc|ccc} \lambda & 1 & & & \\ 0 & \lambda & & & \\ \hline & & \lambda_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \lambda_n \end{array} \right] = J \tag{8.6}$$

となる。

一般に, 重複度と固有空間の次元数 (=自由度) が一致しない固有値を持つ場合は対角化不可能となる。この場合は一般化固有空間の次元数と同じ次数の Jordan ブロックを持つ。

問題 8.2

$A \in \mathbb{C}^{3 \times 3}$ の時, A の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ と固有空間の次元数によってどのような Jordan 標準形 $J = V^{-1}AV$ になるか, 整理せよ。

固有値の状態	固有空間の次元数	Jordan 標準形 $J = V^{-1}AV$	対角化可能?
$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$	3	$\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1 \end{bmatrix}$	○ (可能)
	2	$\begin{bmatrix} \lambda_1 & 1 & 0 \\ 0 & \lambda_1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1 \end{bmatrix}$	× (不可能)
	1		×
$\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$	2 (\mathcal{V}_1 の次元数)	$\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}$	○
	1 (\mathcal{V}_1 の次元数)		×
$\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \lambda_3$	1 ($\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2, \mathcal{V}_3$ の次元数)	$\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}$	○

8.2 MATLAB で固有値・固有ベクトルを求める方法

MATLAB で正方行列の固有値と, それに対応する固有ベクトルを求めるには, eig 関数を使えばよい。

8.2.1 固有値のみを求める場合: eigvalue.m

eig 関数を用いて固有値のみを求める場合は

```
lambda = eig(行列)
```

とすればよい。さすれば、lambda に固有値がベクトルの形式で格納される。

```
1: % 次元数: n
2: str = ' 正方行列の次数 (行数 = 列数) n を入力してください : n = ';
3: n = input(str);
4: fprintf("次数 (n) = %d\n", n);
5:
6: % 係数行列 A(実対称行列)
7: A = [];
8: for i = 1:n
9:     for j = 1:n
10:         A(i, j) = n - max(i, j) + 1;
11:     end
12: end
13:
14: % 計算時間 tic -> toc
15: tic;
16: % 固有値計算
17: lambda = eig(A);
18: time_spec = toc;
19:
20: % 計算時間出力
21: disp( "固有値計算 (秒) = ")
22: disp(time_spec);
23:
24: % 固有値出力
25: disp('eig(A) = '); disp(lambda);
```

このスクリプトを実行すると次のような結果を得る。

正方行列の次数 (行数 = 列数) n を入力してください : n = 5

次数 (n) = 5

固有値計算 (秒) =

1.0357e-04

eig(A) =

0.2716

```

0.3533
0.5830
1.4487
12.3435

```

8.2.2 固有値と対応する固有ベクトルを求める場合 : eigpair.m

前述の eig 関数を用いる際,

```
[V, lambda] = eig(A);
```

と呼び出すと, V に固有値に対応した固有ベクトルが格納される。前述の eigvalue.m スクリプトを例えば 16 行目から 30 行目を下記のように書き直し, eigpair.m として別名保存して実行すると

```

16: % 固有値 (lambda), 固有ベクトル (V) 計算
17: [V, lambda] = eig(A);
18:
19: % 計算時間取得
20: time_spec = toc;
21: fprintf( "固有値・固有ベクトル計算 (秒) = %f\n", time_spec);
22:
23: % 固有値出力 (対角行列形式)
24: disp("lambda(A) = "); disp(lambda);
25:
26: % 固有ベクトル出力 (行列形式)
27: disp("V = "); disp(V);
28:
29: % 検算: || V^(-1) * A * V - lambda(A) ||_2 / || lambda(A) ||_1 = 0 ?
30: fprintf(' || V^(-1) * A * V - lambda(A) ||_2 / || lambda(A) ||_2 = %e\n',
    norm(V^(-1) * A * V - lambda) / norm(lambda));

```

以下のような結果を得る。

正方行列の次数 (行数 = 列数) n を入力してください : $n = 5$

次数 (n) = 5

固有値・固有ベクトル計算 (秒) = 0.000226

lambda(A) =

```

0.2716      0      0      0      0
      0  0.3533      0      0      0
      0      0  0.5830      0      0
      0      0      0  1.4487      0
      0      0      0      0  12.3435

```

V =

```

-0.1699    0.3260    0.4557   -0.5485    0.5969
 0.4557   -0.5969   -0.3260   -0.1699    0.5485
-0.5969    0.1699   -0.5485    0.3260    0.4557
 0.5485    0.4557    0.1699    0.5969    0.3260
-0.3260   -0.5485    0.5969    0.4557    0.1699

```

```
|| V^(-1) * A * V - lambda(A) ||_2 / || lambda(A) ||_2 = 5.428073e-16
```

8.3 固有値・固有ベクトルが既知の問題の作り方

実験的に、固有値と固有ベクトル、あるいは Jordan 標準形が既知の問題を使って、本当にプログラムが正確な固有値・固有ベクトルを求めることができているか、確認したいことがある。そのような場合は (8.5) や (8.6) の関係式を使って、あらかじめ対角行列 Λ や Jordan 標準形 J を与えておき、適当な正則行列 V を使って

$$A = V\Lambda V^{-1} \text{ または } VJV^{-1} \quad (8.7)$$

として行列 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ を生成すればよい。

では、実際に固有値・固有ベクトルが既知の問題を作り、それを eig 関数で解いてみよう。ここで正則行列 V は

$$V = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -3 & -2 & -2 \\ 3 & 4 & 5 \end{bmatrix}$$

とする。この時、逆行列 V^{-1} は

$$V^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -9/2 & 2 & 7/2 \\ 3 & -1 & -2 \end{bmatrix}$$

である。

8.3.1 対角化可能なケース

次の対角行列 Λ_1 , Λ_2 のケースを考える。

それを MATLAB の eig 関数で

$$\Lambda_1 = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (8.8)$$

```
>> Lambda_1 = diag([3, 2, 1])
```

```
Lambda_1 =
```

```

3    0    0
0    2    0
0    0    1

```

```
>> A = V * Lambda_1 * inv_V
```

A =

```
-6    2    5
 3    3   -1
-12   2    9
```

```
>> eig(A)
```

ans =

```
1.0000
2.0000
3.0000
```

固有値だけではハッキリしないので，固有ベクトルと対角行列も求めてみる。

```
>> [v, lambda] = eig(A)
```

v =

```
-0.4867  -0.4082  -0.2294
 0.3244   0.4082   0.6882
-0.8111  -0.8165  -0.6882
```

lambda =

```
1.0000    0    0
 0    2.0000    0
 0    0    3.0000
```

```
>>
```

となって，正しく求められていることが分かる。

同様に，重複固有値を持つが，対角化可能であるケースを計算してみよう，

$$\Lambda_2 = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (8.9)$$

同様に， $A = V\Lambda_2V^{-1}$ を求めて対角化してみる。

```
>> Lambda_2 = diag([3, 3, 1])
```

```
Lambda_2 =
```

```

3    0    0
0    3    0
0    0    1
```

```
>> A = V * Lambda_2 * inv_V
```

```
A =
```

```

-15    6    12
12    -1   -8
-30   10   23
```

```
>> [v, lambda] = eig(A)
```

```
v =
```

```

-0.4867  -0.4438   0.5816
 0.3244   0.3328   0.1435
-0.8111  -0.8321   0.8007
```

```
lambda =
```

```

1.0000    0    0
 0    3.0000    0
 0    0    3.0000
```

従って、正しく対角化できていることが分かる。

8.3.2 対角化不可能なケース

2次以上の Jordan ブロックを含む Jordan 標準形のケースを計算してみよう。

$$J_1 = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \quad (8.10)$$

```
>> [v, lambda] = eig(A)
```

```
>> J = [3, 1, 0; 0, 3, 0; 0, 0, 3]
```

```
J =
```

```

3     1     0
0     3     0
0     0     3

```

```
>> A = V * J * inv_V
```

```
A =
```

```

-1.5000    2.0000    3.5000
13.5000   -3.0000  -10.5000
-13.5000    6.0000   13.5000

```

この場合、特にエラーもなく計算はできるが・・・

```
>> [v, lambda] = eig(A)
```

```
v =
```

```

0.2294    0.2294   -0.4910
-0.6882   -0.6882    0.3159
0.6882    0.6882   -0.8118

```

```
lambda =
```

```

3.0000         0         0
         0    3.0000         0
         0         0    3.0000

```

対角化できてしまい、しかも1番目と2番目の固有ベクトルが同じものになっていることが分かる。

問題 8.3

上記の V と V^{-1} を用いて次の Λ と J の場合に $A = V\Lambda V^{-1}$ と $B = VJV^{-1}$ を作り、それぞれ `eig` 関数でどのような結果が得られるか、その理由も答えよ。

$$\Lambda = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}, J = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

8.4 べき乗法と逆べき乗法

べき乗法は最も単純な、絶対値最大固有値 $\lambda_1 = \lambda_1(A)$ とそれに属する固有ベクトル \mathbf{v}_1 を同時に求める方法である。これを正則行列に適用すると、絶対値最小固有値と固有ベクトルを求めることもできる。以下、全ての固有値が相異なる

るケースを想定して、本手法を解説する。

8.4.1 べき乗法

もし全ての固有値が相異なる ($i < j$ の時, $\lambda_i \neq \lambda_j$, かつ, $|\lambda_i| > |\lambda_j|$) ならば, 各固有値 $\lambda_i = \lambda_i(A)$ に属する固有ベクトル \mathbf{v}_i は n 次元線型空間の基底となるため, 任意のベクトル \mathbf{x}_0 は

$$\mathbf{x}_0 = c_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \mathbf{v}_2 + \cdots + c_n \mathbf{v}_n$$

と表現できる。従って $\mathbf{x}_k := A^k \mathbf{x}_0$ とすれば

$$\mathbf{x}_k = (\lambda_1)^k \left\{ c_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_2 + \cdots + c_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_n \right\}$$

であるから,

$$\mathbf{x}_k = (\lambda_1)^k c_1 \mathbf{v}_1 + O\left(\left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}\right)^k\right)$$

となり, 固有ベクトル \mathbf{v}_1 へ収束する。さすれば固有値 λ_1 は Reiley 商

$$\lambda_1 \approx \frac{(A\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{x}_k)}{(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_k)}$$

を計算することで得られる。実際には overflow を防ぐため, 反復一回ごとに $\|\mathbf{x}_k\| = 1$ となるように正規化する。

1. 初期ベクトル \mathbf{x}_0 (ここで $\|\mathbf{x}_0\| = 1$) を決める。
2. for $k = 0, 1, 2, \dots$
 - (a) $\mathbf{y}_{k+1} := A\mathbf{x}_k$
 - (b) $\gamma_{k+1} := (\mathbf{y}_{k+1}, \mathbf{x}_k) / (\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_k) = (\mathbf{y}_{k+1}, \mathbf{x}_k)$
 - (c) 収束判定
 - (d) $\mathbf{x}_{k+1} := \mathbf{y}_{k+1} / \|\mathbf{y}_{k+1}\|$

このアルゴリズムに従うと, γ_k が $\lambda_1(A)$ へ, \mathbf{x}_k はそれに属する固有ベクトルへと収束する。収束判定は固有値の近似値 γ_k , あるいは固有ベクトルの近似値 \mathbf{x}_k を見て判断する

■べき乗法の計算例: eig_power.m 実対称行列 A を

$$A = \begin{bmatrix} 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 4 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (8.11)$$

とする。この時, MATLAB でべき乗法を実行してみよう。

```
1: % べき乗法 : eig_power.m
2:
3: % 行列 A
4: A = [
5:     5, 4, 3, 2, 1;
6:     4, 4, 3, 2, 1;
7:     3, 3, 3, 2, 1;
```

```
8:     2, 2, 2, 2, 1;
9:     1, 1, 1, 1, 1
10: ];
11:
12: % 絶対値最大固有値の近似値
13: %absmax_eig = 0.0;
14:
15: % 絶対値最大固有値に対応する固有ベクトルの近似値
16: [row_dim, col_dim] = size(A);
17: absmax_vec = ones(col_dim, 1);
18:
19: % 停止即で使用する絶対相対許容度と相対許容度
20: abs_tol = 1.0e-50;
21: rel_tol = 1.0e-10;
22:
23: % 最大反復回数
24: max_times = max(size(A)) * 10;
25:
26: % メインループ
27: old_eig = 0;
28: absmax_eig = 0;
29: absmax_vec = absmax_vec / norm(absmax_vec);
30: for times = 1:max_times
31:     y = A * absmax_vec;
32:     absmax_eig = absmax_vec.' * y;
33:     if abs(old_eig - absmax_eig) <= rel_tol * abs(old_eig) + abs_tol
34:         break;
35:     end
36:     absmax_vec = y / norm(y);
37:     old_eig = absmax_eig;
38: end
39:
40: % 表示
41: fprintf("Maximum Eigenvalue(%d times): %25.17e\n", times, absmax_eig);
42:
43: fprintf(" i      eigenvector[i]      (A * eivenvector)[i] / eigenvector[i]\n");
44: y = A * absmax_vec;
45: for i = 1:row_dim
46:     fprintf("%2d %25.17e %25.17e\n", i, absmax_vec(i), y(i) / absmax_vec(i));
47: end
```

これを実行すると、以下のような結果を得る。 $\lambda_1(A)$ の近似値が

Maximum Eigenvalue: 1.23435375196795842e+01

になっている時の固有ベクトルの近似値 \mathbf{x} , 及び $A\mathbf{x}$ の各要素の \mathbf{x} との比をそれぞれ出力すると

i	eigenvector[i]	(A * eivenvector)[i] / eigenvector[i]
1	2.23606797749978981e+00	1.23435375196795842e+01
2	2.05491504837138317e+00	1.23435375196779056e+01
3	1.70728512307438196e+00	1.23435375196750883e+01
4	1.22134111072129303e+00	1.23435375196720223e+01
5	6.36451305172487269e-01	1.23435375196696810e+01

となる。

8.4.2 逆べき乗法

逆べき乗法は A の代わりに A^{-1} を用いることで, A の絶対値最小固有値とそれに対応する固有ベクトルを求める方法である。正則行列 A の固有値と対応する固有ベクトルが $\lambda_i \mathbf{v}_i$ である時,

$$A\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i \Rightarrow A^{-1}\mathbf{v}_i = \frac{1}{\lambda_i} \mathbf{v}_i$$

であることから, A^{-1} の固有値は A の固有値の逆数 $1/\lambda_i$ であることが分かる。また, 固有ベクトルは変化しない。

実際に計算するには A^{-1} を直接求めるのではなく, \mathbf{z}_{k+1} を未知数とする連立一次方程式

$$A\mathbf{z}_{k+1} = \mathbf{z}_k$$

を解くことで得る。

■逆べき乗法の計算例 先の例で使った実対称行列 A ((8.11) 式) の最小固有値を逆べき乗法で求めてみる。前述のべき乗法のスクリプト `eig.power.m` を 2 行 (31 行目と 41 行目) だけ変更して絶対値最小固有値を求めてみると下記のようになる。

Minimum Eigenvalue(45 times): 2.71554129365498276e-01

i	eigenvector[i]	(A * eivenvector)[i] / eigenvector[i]
1	1.69884404803643779e-01	2.71550898002053009e-01
2	-4.55721838828032411e-01	2.71551923956332986e-01
3	5.96881286102514452e-01	2.71553650073526498e-01
4	-5.48538124495066115e-01	2.7155528275313485e-01
5	3.26029984657473293e-01	2.71556962263911017e-01

べき乗法の時より, 反復回数が増え, 精度も落ちていることが分かる。

問題 8.4

Hilbert 行列 H_5

$$H_5 = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 \\ 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 \\ 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 & 1/9 \end{bmatrix}$$

の絶対値最大固有値 λ_1 と絶対値最小固有値 λ_5 を、ベキ乗法、逆ベキ乗法で求めよ。なお、MATLAB では H_5 を `hilb(5)` で得ることができる。

