第 9 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。

9.1　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 $\lambda_i \in \mathbb{C}(i = 1, 2, ..., n)$ および対応する固有ベクトル $\mathbf{v}_i \in \mathbb{C}^n, \mathbf{v}_i \neq 0,$ $(i = 1, 2, ..., n)$ は

$$A\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i \ (i = 1, 2, ..., n) \tag{9.1}$$

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，$(A - \lambda_i)\mathbf{v}_i = 0$ 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 $\mathrm{rank}(A - \lambda_i I) < n$ となる必要がある (定理 4.3)。それ故に

$$|A - \lambda I| = \lambda^n + c_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + c_1\lambda + c_0 = 0 \tag{9.2}$$

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 $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n \in \mathbb{C}$ が固有値ということになる。

問題 9.1
下記の行列 A の固有値と固有ベクトルを全て求めよ。

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

9.2　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 関数を使う。

9.2.1　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。

```
% 次元数: n
str = '正方行列の次数（行数 = 列数）n を入力してください：n = ';
n = input(str);
fprintf("次数（n) = %d\n", n);

% 係数行列 A(実対称行列)
A = [];
for i = 1:n
    for j = 1:n
        A(i, j) = n - max(i, j) + 1;
    end
end

% 計算時間 tic -> tac
tic;
% 固有値計算
lambda = eig(A);
time_spec = toc;

% 計算時間出力
disp( "固有値計算（秒) = ")
disp(time_spec);

% 固有値出力
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
```

9.2.2　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，lambda に固有値を対角成分に並べた行列 (対角行列) が格納され，V には固有値に対応した固有ベクトルが格納される。つまり，固有値 $\lambda_i (i = 1, 2, ..., n)$ に対応した固有ベクトルを $\mathbf{v}_i$ とすると，

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{bmatrix}, \ V = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ ... \ \mathbf{v}_n] \in \mathbb{C}^{n \times n} \tag{9.3}$$

という対角行列 Λ とベクトルから成る行列 V が計算され，それぞれ lambda と V に格納されるということになる。従って，この Λ と V は

$$AV = V\Lambda \Leftrightarrow V^{-1}AV = \Lambda \tag{9.4}$$

という関係にあることが分かる。

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) ||_2 = 0 ?
30: fprintf('|| V^(-1) * A * V - lambda(A) ||_2 / || lambda(A) ||_2 = %e\n',
 norm(V^(-1) * A * V - lambda) / norm(lambda));
```

以下のように Λ と V を求めて出力し，(9.4) 式が成立していることを確認するために相対残差 $\|V^{-1}AV - \Lambda\|_2/\|A\|_2$ を求めて出力する。

```
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
```

問題 9.2

上記のスクリプトを用いて，全ての固有値・固有ベクトルを求めるのに 1 秒以上を要する最も小さい次元数 n を求めよ。またその時の $\|V^{-1}AV - \Lambda\|_2/\|\Lambda\|_2$ の値を求めよ。

9.3 2 次正方行列の Jordan 標準形

$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ における固有値が「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。

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

$$\lambda^2 + c_1\lambda + c_0 = 0 \tag{9.5}$$

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

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

$$(A - \lambda_1 I)\mathbf{v}_1 = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{v}_2 = \beta\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},\ \beta\text{は非ゼロの定数}$$

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，相似変換によって

$$V^{-1}AV = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \tag{9.6}$$

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 $\mathbf{u}_2$ を持ってくることが可能となる。例えば $\mathbf{v} = [1\ 0]^T$ とすれば，

$$(A - \lambda I)\mathbf{u}_2 = \mathbf{v} \tag{9.7}$$

となる $\mathbf{u}_2 = [u_1^{(2)}\ u_2^{(2)}]^T$ は $\mathbf{u}_2 \in \mathcal{U}_2$ となることを利用し，

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1^{(2)} \\ u_2^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

という連立一次方程式を $\mathbf{u}_2 = [u_1^{(2)}\ u_2^{(2)}]^T$ について解けば，$\mathbf{u}_2$ は $\mathbf{v}(\neq 0)$ と一次独立なベクトルとなる。

よって，例えば $\mathbf{u}_2 = [0\ 1]^T$ と決めることができる。これを使うことで，相似変換のための V は

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

とすることで V は正則行列となり，対角化は不可能だが，少なくとも

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

という形式にはなる。この J を 2 次の Jordan ブロック (Jordan block) と呼び，この場合は行列 J がこの Jordan ブロックになるので，J を A の Jordan 標準形 (Jordan canonical form) 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 9.3

1. (9.5) の係数 c_1, c_0 を A の要素を使って表わせ。
2. 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。
3. (9.7) 式で解いた $\mathbf{u}_2(\neq 0)$ が $\mathbf{v}(\neq 0)$ と一次独立であることを示せ。
4. $A_1, A_2 \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ がそれぞれ

$$A_1 = \begin{bmatrix} 3 & -2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix},\ A_2 = \begin{bmatrix} 4 & 1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

である時，それぞれの行列が対角化可能か不可能かを明確に答えよ。また，対角化可能な場合は対角行列 Λ と導出のために必要となる V を，対角化不可能な場合は Jordan 標準形 J と導出に必要となる V をそれぞれ求めよ。