行列の固有値問題

- ・ヤコビ法
- ・ハウスホルダー法
- ・累乗法

固有値問題

【定義】n次正方行列Aに対し，$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$
となる実数λとベクトル$\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$が存在するとき，
λをAの固有値とよび，$\mathbf{x}$を固有ベクトルとよぶ．

$(A - \lambda I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$

Aが固有値λをもつ$\Leftrightarrow \det(A - \lambda I) = 0$

【行列の固有値問題】
入力：n次正方行列A.
出力：Aのすべての固有値λ,
　　およびλに関する固有ベクトル$\mathbf{x}$.

固有値を変えない変換

Mを任意のn次正方行列とし，
$\mathbf{y} = M\mathbf{x}, A' = MAM^{-1}$とする．

$$
\begin{aligned}
& A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \\
\Leftrightarrow\ & MA\mathbf{x} = \lambda M\mathbf{x} \\
\Leftrightarrow\ & (MAM^{-1})M\mathbf{x} = \lambda M\mathbf{x} \\
\Leftrightarrow\ & A'\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}
\end{aligned}
$$

AをMAM^{-1}に替えても
固有値は変わらない．

実対称行列に対する固有値問題

- 実対称行列の固有値問題は解きやすい．
  - 固有値が実数になる．
  - 固有ベクトルが互いに直交する．
- 実対称行列に対して固有値問題を解く際の，代表的な解法．
  - ヤコビ法．
  - ハウスホルダー法．
- いずれも固有値を変えない変換を繰り返し適用．
  - ヤコビ法：$MM^T=I$,すなわち$M^{-1}=M^T$
  - ハウスホルダー法：$MM=I$,すなわち$M^{-1}=M$

ヤコビ法で用いるM

$$
\begin{array}{c}
M = \left[\begin{array}{ccccccccccc}
1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & \cos\theta & & & & \sin\theta & & & \\
 & & & & 1 & & & & & & \\
 & & & & & \ddots & & & & & \\
 & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & -\sin\theta & & & & \cos\theta & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & & & & & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
\\ \\ \\ \leftarrow p \\ \\ \\ \\ \leftarrow q \\ \\ \\ \\
\end{array}
\\
\begin{array}{ccccccccccc}
 & & & \uparrow & & & & \uparrow & & & \\
 & & & p & & & & q & & &
\end{array}
\end{array}
$$

ヤコビ法のアルゴリズム

(1) $|a_{p,q}| = \max_{i \neq j} |a_{i,j}|$となる$p, q\ (p \neq q)$を選ぶ.

(2) $\theta = \dfrac{1}{2}\arctan\dfrac{2a_{p,q}}{a_{p,p} - a_{q,q}}$とし，直交行列$M$を作る.

(3) $A' = MAM^{\mathrm{T}}$を計算する.

(4) A'の対角線要素以外の要素が十分小さくなるまで(1)〜(3)を繰り返す.

ハウスホルダー法で用いるM

$M = I - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}}$
ここに，$\mathbf{u}$は単位ベクトル.

$$
\mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} [u_1, u_2, \cdots, u_n] = \begin{bmatrix} u_1u_1 & u_1u_2 & \cdots & u_1u_n \\ u_2u_1 & u_2u_2 & \cdots & u_2u_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_nu_1 & u_nu_2 & \cdots & u_nu_n \end{bmatrix}
$$

$m_{i,j} = \delta_{i,j} - 2u_iu_j$

クロネッカーのδ

$$
\delta_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{if } i = j \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}
$$

ハウスホルダー法で用いるM (続き)

$\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\mathbf{u} = u_1u_1 + u_2u_2 + \cdots + u_nu_n = 1$ $(\because \mathbf{u}$は単位ベクトル$)$

$$
\begin{aligned}
MM &= (I - \mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}})(I - \mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}}) \\
&= I - 4\mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}} + 4\mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}} \\
&= I - 4\mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}} + 4\mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}} \\
&= I
\end{aligned}
$$

具体的計算法については文献を参照のこと.

累乗法（べき乗法）

- 一般の（対称行列に限らない）行列に対する固有値問題を解く．
- 収束はあまり速くないが，行列の疎性を活用できるので，高次元の問題に適す．
- 最大固有値から順に1つずつ計算．

計算手順

(1) n次元ベクトル$\mathbf{x}_0$を適当に選ぶ．

(2) $k=1,2,\cdots$に対して以下を実行．

$$\mathbf{u}_k=\frac{\mathbf{x}_k}{|\mathbf{x}_k|}$$

単位ベクトルに正規化

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

(3) 収束したら，$\lambda=(\mathbf{u}_k,\mathbf{x}_{k+1})$によって固有値を算出．

補足

累乗法は，基本的には，$\mathbf{x}_{k+1}=A\mathbf{x}_k$を繰り返せばよいのだが，$k$が増大すると，

$|\lambda|>1$ならば$|\mathbf{x}_k|$が増大して桁溢れを起こし

$|\lambda|<1$ならば$|\mathbf{x}_k|$が減少して桁落ちを起こす．

これを避けるために，

$$\mathbf{u}_k=\frac{\mathbf{x}_k}{|\mathbf{x}_k|}$$

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

のように，単位ベクトル化してから計算を行う．

アルゴリズムの根拠

n次正方行列Aの相異なる固有値を絶対値の大きい順に$\lambda_1,\cdots,\lambda_m$とし，対応する固有ベクトルを$\mathbf{v}_1,\cdots,\mathbf{v}_m$とする．いま，ベクトル$\mathbf{x}_0$を$\mathbf{x}_0=c_1\mathbf{v}_1+\cdots+c_m\mathbf{v}_m$とする．このとき，

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_k&=A^k\mathbf{x}_0\\&=c_1\lambda_1{}^k\mathbf{v}_1+\cdots+c_m\lambda_m{}^k\mathbf{v}_m\\&=\lambda_1{}^k\left(c_1\mathbf{v}_1+c_2\left(\lambda_2/\lambda_1\right)^k\mathbf{v}_2+\cdots+c_m\left(\lambda_m/\lambda_1\right)^k\mathbf{v}_m\right)\end{aligned}$$

$$\frac{\mathbf{x}_k}{\lambda_1{}^k c_1}\to\mathbf{v}_1\quad(k\to\infty)$$

前提となる条件

(1) ベクトル$\mathbf{x}_0$が

$$\mathbf{x}_0 = c_1\mathbf{v}_1 + \cdots + c_m\mathbf{v}_m, \quad c_1 \neq 0$$

と書けること.

(2) 各$i = 2, \ldots, m$について$\left|\lambda_i / \lambda_1\right| < 1$であること.

(1)は必ずしも保証されないので，
多数回繰り返して収束しない場合は
出発値を取り替える.