行列固有値の数値解法1・Jacobi法

<一般的注意>

1) $\det(\lambda I - A) = 0$ を解かない。
2) 対称行列／非対称行列で難易度が格段に違う
3) 数値計算の原理を知って、既存のライブラリを使う（無理して自作しない）。

* Jacobi法 … プログラムを自作する。

Givens変換 $A = [a_{ij}]$: $n \times n$ 対称行列

$$A \mapsto G^{-1} A G = G^T A G, \quad G = G(p, q, \theta) = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} \quad\quad p & \quad\quad\quad q \end{array} \\ & \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & \cos\theta & \cdots & \sin\theta & & \\ & & \vdots & 1 & \vdots & & \\ & & & \ddots 1 & & & \\ & & -\sin\theta & \cdots & \cos\theta & & \\ & & & & & 1 & \\ & & & & & & \ddots 1 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ p \\ \\ \\ q \\ \\ \\ \end{array} \end{array}$$

（$p < q$ の場合）

$\tilde{A} = G^{-1} A G$ の行列要素 $\tilde{a}_{ij}$ の計算：

$$(AG)_{ip} = a_{ip}\cos\theta - a_{iq}\sin\theta,$$
$$(AG)_{iq} = a_{ip}\sin\theta + a_{iq}\cos\theta,$$
$$(AG)_{ij} = a_{ij} \qquad (j \neq p, q).$$

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{pp} &= \cos\theta (AG)_{pp} - \sin\theta (AG)_{qp} \\ &= \cos\theta (a_{pp}\cos\theta - a_{pq}\sin\theta) - \sin\theta (a_{qp}\cos\theta - a_{qq}\sin\theta) \\ &\quad [\, a_{ij} = a_{ji} \text{ に注意して} \,] \\ &= a_{pp}\cos^2\theta - 2a_{pq}\cos\theta\sin\theta + a_{qq}\sin^2\theta, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{qq} &= \sin\theta (AG)_{pq} + \cos\theta (AG)_{qq} \\ &= \sin\theta (a_{pp}\sin\theta + a_{pq}\cos\theta) + \cos\theta (a_{qp}\sin\theta + a_{qq}\cos\theta) \\ &= a_{qq}\sin^2\theta + 2a_{pq}\cos\theta\sin\theta + a_{pp}\cos^2\theta, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{pq} &= \tilde{a}_{qp} \qquad (\text{注 } \tilde{A} \text{ は対称行列}) \\ &= \cos\theta (AG)_{pq} - \sin\theta (AG)_{qq} \\ &= \cos\theta (a_{pp}\sin\theta + a_{pq}\cos\theta) - \sin\theta (a_{qp}\sin\theta + a_{qq}\cos\theta) \\ &= (a_{pp} - a_{qq})\cos\theta\sin\theta + a_{pq}(\cos^2\theta - \sin^2\theta), \end{aligned}$$

$k \notin \{p, q\}$ として、

$$\tilde{a}_{kp} = \tilde{a}_{pk} = (AG)_{kp} = a_{kp}\cos\theta - a_{kq}\sin\theta,$$
$$\tilde{a}_{kq} = \tilde{a}_{qk} = (AG)_{kq} = a_{kp}\sin\theta + a_{kq}\cos\theta,$$

$$\tilde{a}_{ij} = a_{ij} \quad (i, j \notin \{p, q\}).$$

$\tilde{a}_{pq} = \tilde{a}_{qp} = 0$ となるよう θ を選ぶと、

$$\tilde{a}_{pq} = \frac{1}{2}(a_{pp} - a_{qq})\sin 2\theta + a_{pq}\cos 2\theta = 0$$

$$\therefore \tan 2\theta = \frac{2a_{pq}}{a_{qq} - a_{pp}}.$$

注 A が対角行列に近いとき $\theta \simeq 0$ となるよう、θ は $|\theta| \leq \frac{\pi}{4}$ の範囲で選ぶ。

A の適当な非対角成分 a_{pq} が 0 となるよう θ をとって Givens 変換を行う。
これを繰り返すと、

$$\cdots G_k^{-1} \cdots G_2^{-1} G_1^{-1} A G_1 G_2 \cdots G_k \cdots$$
$$= (G_1 G_2 \cdots)^{-1} A (G_1 G_2 \cdots)$$
$$= \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{bmatrix},$$

$\lambda_1, \cdots, \lambda_n$: A の固有値、
$(G_1 G_2 \cdots)$ の第 j 列 : λ_j に対応する固有ベクトル。

$G_\ell^{-1} \cdots G_1^{-1} A G_1 \cdots G_\ell$ は $\ell \to \infty$ でほんとうに対角行列に近づくのか？

$$F = \sum_{i \neq j} a_{ij}^2, \quad \tilde{F} = \sum_{i \neq j} \tilde{a}_{ij}^2$$

とおくと、

$$F - \tilde{F} = 2(a_{pq}^2 - \tilde{a}_{pq}^2)$$

$\Big(\because$ $j \notin \{p, q\}$ とすると、
$$\tilde{a}_{pj}^2 + \tilde{a}_{qj}^2 = (a_{jp}\cos\theta - a_{jq}\sin\theta)^2 + (a_{jp}\sin\theta - a_{jq}\cos\theta)^2 = a_{pj}^2 + a_{qj}^2. \quad \boxtimes \Big)$$

いま, $\tilde{a}_{pq} = 0$ としているから,

$$\tilde{F} = F - 2a_{pq}^2 < F \quad \cdots\cdots \ F \text{ は単調減少.}$$

とくに (p, q) を $|a_{pq}| = \max_{i \neq j} |a_{ij}|$ ととれば,

$$F \leqq 2N a_{pq}^2, \qquad \tilde{F} \leqq \left(1 - \frac{1}{N}\right) F.$$

Givens 変換を k 回行った後の非対角成分の二乗和を $F^{(k)}$ と記せば

$$F^{(k)} \leqq \left(1 - \frac{1}{N}\right)^k F \longrightarrow 0 \quad (k \to \infty)$$

∴ 確かに $G_k^{-1} \cdots G_1^{-1} A G_1 \cdots G_k$ は $k \to \infty$ で対角行列に近づく.

Givens 変換のプログラム (Rutishauser の計算式)

$$z = \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}} \quad (= \cot 2\theta),$$

$$t = \frac{\mathrm{sgn}(z)}{|z| + \sqrt{1 + z^2}} \quad (= \tan\theta),$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{1 + t^2}} \quad (= \cos\theta),$$

$$s = ct \quad (= \sin\theta),$$

$$u = \frac{s}{1 + c} \quad \left(= \tan\frac{\theta}{2}\right),$$

$$\tilde{a}_{pp} = a_{pp} - t a_{pq},$$
$$\tilde{a}_{qq} = a_{qq} + t a_{pq},$$
$$\tilde{a}_{pq} = \tilde{a}_{qp} = 0,$$
$$\tilde{a}_{pk} = \tilde{a}_{kp} = a_{pk} - s(a_{qk} + u a_{pk}),$$
$$\tilde{a}_{qk} = \tilde{a}_{kq} = a_{qk} + s(a_{pk} - u a_{qk}),$$

固有ベクトルの計算　$\tilde{G}_k = G_1 \cdots G_k = [\tilde{g}_{ij}^{(k)}]$ とおくと,

$$\begin{cases} \tilde{g}_{ip}^{(k+1)} = \tilde{g}_{ip}^{(k)} \cos\theta - \tilde{g}_{iq}^{(k)} \sin\theta, \\ \tilde{g}_{iq}^{(k+1)} = \tilde{g}_{ip}^{(k)} \sin\theta + \tilde{g}_{iq}^{(k)} \cos\theta, \\ \tilde{g}_{ij}^{(k+1)} = \tilde{g}_{ij}^{(k)} \quad (j \notin \{p, q\}) \end{cases}$$

行列固有値問題の解法2（べき乗法〜QR法） ＊概略＊

A : $m \times m$（複素）行列

A の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_m$ $(|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_m|)$

A の（単位）固有ベクトル $u_1, u_2, \cdots, u_m$

〈べき乗法〉

$x_0 \neq 0$ 任意のベクトル $\longrightarrow$ $x_0 = c_1 u_1 + \cdots + c_m u_m$ と分解.

$$A^k x_0 = c_1 \lambda_1^k u_1 + \cdots + c_m \lambda_m^k u_m$$

$$= \lambda_1^k \left\{ c_1 u_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k u_2 + \cdots + c_m \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_1}\right)^k u_m \right\} \to c\, u_1 \quad (k \to \infty)$$

$x_k = A^k x_0$ とおくと、k が大きいとき $\lambda_1 \simeq \dfrac{(x_k, A x_k)}{\|x_k\|^2}$ （Rayleigh商）

〈同時反復法〉

複数のベクトル $x_1^{(0)}, \cdots, x_m^{(0)}$ に同時にべき乗法を適用する.

$X^{(0)} = (x_1^{(0)} | \cdots | x_m^{(0)})$ （$m \times m$ 行列）

— 行列 $X = (x_1 | \cdots | x_m)$ の QR分解 —

$\{x_1, \cdots, x_m\}$ を Gram-Schmidt 直交化 ← ＊数値計算では"修正 Gram-Schmidt 直交化"を用いる（参考文献参照）

$q_1 = x_1 / \|x_1\|$;

$j = 2, \cdots, m$ に対し、 （q_i^H : q_i ($1 \times n$ 行列) の Hermite 行列）

$$\left[\ \tilde{q}_j = x_j - \sum_{i=1}^{j-1} (q_i^H x_j)\, q_i; \quad q_j = \frac{\tilde{q}_j}{\|\tilde{q}_j\|};\right.$$

$\longrightarrow$ $\{q_1, \cdots, q_m\}$ は正規直交系をなす.

これを行列の形にすると

$$\underbrace{(x_1 | \cdots | x_m)}_{X} = \underbrace{(q_1 | \cdots | q_m)}_{Q} \underbrace{\begin{bmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1m} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & r_{mm} \end{bmatrix}}_{R} \qquad r_{ii} = \|\tilde{q}_i\|, \quad r_{ij} = q_i^H x_j \ (i < j)$$

$$\Updownarrow$$

$X = QR$, Q : ユニタリー行列 $(Q^{-1} = Q^H)$

$k = 0, 1, 2, \cdots$ に対し、

$$\left[\begin{array}{l} Y^{(k)} = A X^{(k)}; \\ Y^{(k)} = X^{(k+1)} R^{(k)} \text{ と QR分解する;} \end{array}\right.$$

$$\Downarrow$$

$X^{(k)} = (x_1^{(k)} | \cdots | x_m^{(k)})$ とおくと、k が大きいとき

$x_1^{(k)} \approx u_1, \cdots, x_m^{(k)} \approx u_m$.

$$\therefore\quad A^{(k)} \equiv (X^{(k)})^H A X^{(k)} \approx \begin{pmatrix} \lambda_1 & & * \\ & \ddots & \\ & & \lambda_m \end{pmatrix}.$$

<QR法>

$A^{(k)}$ に対する漸化式を求める。

$$A^{(k+1)} = (X^{(k+1)})^H A X^{(k+1)} = (X^{(k+1)})^H X^{(k)} A^{(k)} (X^{(k)})^H X^{(k+1)}$$

$Q^{(k)} \equiv (X^{(k)})^H X^{(k+1)}$ はユニタリー行列であり

$$A^{(k+1)} = (Q^{(k)})^H A^{(k)} Q^{(k)}$$

$A X^{(k)} = X^{(k+1)} R^{(k)}$ であったから、

$$A^{(k)} = (X^{(k)})^H X^{(k+1)} R^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)}$$ … これは $A^{(k)}$ のQR分解

$$A^{(k+1)} = (Q^{(k)})^H Q^{(k)} R^{(k)} Q^{(k)} = R^{(k)} Q^{(k)}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} k = 0, 1, 2, \cdots \text{ に対し} \quad (* A^{(0)} = A \text{ とおく}) \\ \left[\begin{array}{l} X^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)} \text{ とQR分解する;} \\ A^{(k+1)} = R^{(k)} Q^{(k)}; \end{array}\right. \end{array}}$$

$$\downarrow$$

$$A^{(k)} \approx \begin{pmatrix} \lambda_1 & & * \\ 0 & \ddots & \\ & & \lambda_m \end{pmatrix} \quad (k\text{が大})$$

実際は"シフト"の技法を使って収束を速くする。

参考文献

杉原正顯，室田一雄「線形計算の数理」(岩波数学叢書，2009年)