

数値計算講義ノート6

固有値問題の解法

大石進一

May 12, 2003

§1 固有値問題

行列の固有値問題

$$Ax = \lambda x$$

を考える。まず，固有値と固有関数の近似計算法を学ぶ。ただし， A は $n \times n$ 行列， x は n 次元ベクトルである。

計算法の概要

固有値は固有方程式 (characteristic equation)

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

の解となる。これから，固有方程式を解くことによって固有値を求めることが考えられる。これを直接解法という。行列 A の次元が大きくなると，固有方程式は高次元の λ に関する多項式方程式となり，その係数を計算するのに手間がかかる，と同時に，係数の計算誤差が解の大きな変動を生む（悪条件方程式となる）ので解きに

くいことが知られている。よって，固有方程式を解いて固有値を求めることは通常行われない。

固有値問題を解くには反復解法が普通用いられる。その基礎はシュール(Schur)分解と呼ばれるつぎの事実である。シュール分解を説明するために，簡単に用語を復習する。 $n \times n$ 複素行列 A の共役行列とは

$$A^* = \overline{A}^t \quad (1)$$

で定義される行列とする。ただし， $\overline{A}$ は行列 A の複素共役で， A^t は行列 A の転置行列とする。すなわち，共役行列は，複素共役をとって転置した行列である。

$$A^* = A \quad (2)$$

をみたす行列をエルミート行列 (Hermitian matrix) という。 A が実行列のときはエルミート行列は対称行列 (symmetric matrix)

$$A^t = A \quad (3)$$

となる。また，

$$AA^* = I \quad (4)$$

を満たす複素行列をユニタリ行列 (unitary matrix) という。実行列 A が

$$AA^t = I \quad (5)$$

を満たすとき, A は直行列 (orthogonal matrix) と呼ばれる。

n 次元複素ベクトル x, y の内積を

$$(x, y) = \sum_{i=1}^n x_i \overline{y_i} \quad (6)$$

と定義する。

定理 (シュール分解)

$n \times n$ 複素行列 A は

$$A = SUS^* \quad (7)$$

と3つの行列の積に分解される。ただし, S はユニタリ行列で U は上三角行列である。尚, この分解は一意的ではない。

行列 S を

$$S = [s_1, s_2, \dots, s_n], \quad s_i \in \mathbf{R}^n, \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (8)$$

と書く。このとき,

1. 行列 U の対角成分が A の固有値で $\{s_1, s_2, \dots, s_m\}$ は任意の m , $(1 \leq m \leq n)$, に対して A の不変部分空間となる。
2. A がエルミート行列のときは, $s_1, s_2, \dots, s_n$ は固有ベクトルとなり, 互いに直行する。また, U は対角行列となる。
3. A が実行列の場合には, 実シュール分解

$$A = QUQ^t \quad (9)$$

が存在する。ただし, U は対角ブロックの大きさが1か2のブロック対角行列となる。 U の各対角ブロックの固有値が A の固有値となる。

こうして，シュール分解が求められれば，固有値問題が解かれたことになるが，一般にシュール分解は有限回の四則演算と開平操作では求められないことが知られている。反復解法は近似的にシュール分解が求める手法である。

反復解法の基礎は相似変換 (similarity transformation) である。相似変換は，正則な行列 C によって

$$C^{-1}AC$$

と定義される。

$$Ax = \lambda x \Leftrightarrow (C^{-1}AC)C^{-1}x = \lambda C^{-1}x$$

あるいは

$$\det(A - \lambda I) = \det[C^{-1}(A - \lambda I)C] = \det(C^{-1}AC - \lambda I)$$

からわかるように A と $C^{-1}AC$ は同じ固有値をもつ。

反復解法で固有値問題を解く方法の概要はつぎのようになる。用語の定義は後に述べるので，ここでは大まかにつかんで欲しい。

(1) 特定の行列に相似変換する

相似変換によって，固有値が変わらないことは先に述べた。そこで，固有値が計算しやすい行列へ，有限回の相似変換で，変換する。

1. 実対称行列は実対称 3 重対角行列へ
2. エルミート行列はエルミート 3 重対角行列へ
3. 一般の行列はヘッセンベルグ (Hessenberg) 行列へ

と変換されるのが通常である。相似変換には，ハウスホルダー (Householder) 変換などが用いられる。

(2) 変換された行列の固有値を反復解法により求める

反復解法により(1)で変換した行列の固有値と固有ベクトルを(近似的に)求める。すべての固有値と固有ベクトルを求める反復解法としてはヤコビ法, QR法, LR法などがある。

ヤコビ法はプログラム化が比較的容易であることなどで親しまれてきた。また, 最近の研究により, ヤコビ法は正値対称行列などに対し, その相対誤差評価のよい固有値計算法としての特長も兼ね備えていることが明らかにされている。

QR法は対称行列, 非対称行列のすべての固有値を求める反復解法として, 中規模の行列を扱うための標準的な方法である。

もっと次元が大きくなる場合には, **Lanzos法**を用いたり, すべての固有値ではなく最大固有値や最小固有値など幾つか特別なもののみ求めることで満足することが多い。その場合には, **べき乗法**や**逆反復法**などが用いられる。

§2 ベキ乗法

まず，行列の固有値と固有ベクトルを求める基本的手法である，ベキ乗法と逆反復法の概要をまとめよう。

$n \times n$ 行列 A が与えられたとしよう。行列 A の最大固有値と固有ベクトルを求めるための方法として，ベキ乗法が知られている。これは， $u \neq 0$ を n 次元ベクトルとして

$$y_0 = \frac{u}{\|u\|}, y_{k+1} = \frac{Ay_k}{\|Ay_k\|}, k = 0, 1, 2, \dots \quad (10)$$

とする方法である。

定理

A の絶対値最大の固有値 λ_1 が

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n| \quad (11)$$

を満たすとする。このとき、 λ_1 の固有ベクトル v に対して、 $(u, v) \neq 0$ で、 λ_j , ($j = 1, 2, \dots, n$)、に対する固有ベクトルが一次独立であれば、 $y_k \rightarrow v$, ($k \rightarrow \infty$) となる。さらに、 $y_k^* A y_k \rightarrow \lambda_1$, ($k \rightarrow \infty$) となる。

証明

簡単のため A の固有値が

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > \dots > |\lambda_n| \quad (12)$$

の場合を考える。この場合には、各固有値 λ_i に対する固有ベクトル x_i , ($i = 1, 2, \dots, n$) は R^n の基底をなす。いま、 $\|x_i\| = 1$ と規格化してあるものとする。初期ベクトル y_0 は

$$y_0 = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n \quad (13)$$

と展開される。 $A x_i = \lambda_i x_i$ となるから α_j を適当な定数として

$$y_j = \alpha_j (c_1 \lambda_1^j x_1 + c_2 \lambda_2^j x_2 + \dots + c_n \lambda_n^j x_n) \quad (14)$$

となる。よって , $c_1 \neq 0$ であれば

$$y_j = \alpha_j c_1 \lambda_1^j \left\{ x_1 + \sum_{i=2}^n \frac{c_i}{c_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^j x_i \right\} \quad (15)$$

となる。 $|\lambda_i/\lambda_1| < 1$, $(i = 1, 2, \dots, n)$ であるので式 15 の右辺の $\{ \quad \}$ の中は $j \rightarrow \infty$ で x_1 に収束する。また , $\alpha_j c_1 \lambda_1^j \rightarrow 1$ となる。また

$$y_i^* A y_i \rightarrow \lambda_1 , (i \rightarrow \infty) \quad (16)$$

となる。(証明終わり)

べき乗法は基本的には行列 A をベクトルにかけていくアルゴリズムであるから , 次元が大きくなっても適用性がある。また , $c_1 \neq 0$ という条件は , 例え初期ベクトルが満たしていなくても , 丸め誤差により反復の途中で y_i が x_1 成分をもつようになるので , どんな非零の初期ベクトルから反復を開始してもよいと理解してよい。

§3 逆反復法

$n \times n$ 行列 A の固有値 λ とその固有ベクトル v を考える。

$$Ax = \lambda x \quad (17)$$

A が逆行列をもつとする。 A^{-1} の両辺に A^{-1} をかけると

$$x = \lambda A^{-1}x \iff A^{-1}x = \frac{1}{\lambda}x \quad (18)$$

が成立する。すなわち、 A^{-1} は固有値 $1/\lambda$ と固有ベクトル x をもつことがわかる。したがって、 A^{-1} にべき乗法を適用すると、 A の絶対値最小の固有値とその固有ベクトルが求められることになる。

さて、いま、 $n \times n$ 行列 A の最大でも最小でもない固有値 λ が求めたいとする。 σ を λ の十分よい近似値とする。このとき、行列 $A - \sigma I$ は

$$(A - \sigma I)v = Av - \sigma v = (\lambda - \sigma)v \quad (19)$$

より，固有値 λ と固有ベクトル v をもつ。したがって， σ が固有値 λ の十分よい近似であれば， $|\lambda - \sigma|$ が行列 $A - \sigma I$ の絶対値最小の固有値であることが期待できる。したがって， $(A - \sigma I)^{-1}$ にべき乗法を適用すれば λ に対する固有ベクトルが計算できることが期待される。これを逆反復法という。

逆反復法を変形したレイリー商反復法は逆反復法の収束性を改良したものと見なせる。これはつぎのような解法である。

$$y_0 = \frac{u}{\|u\|}, \rho_0 = \frac{u^* A u}{u^* u}$$

$$(A - \rho_{k-1} I) z_k = y_{k-1}, y_k = \frac{z_k}{\|z_k\|}, \rho_k = \frac{z_k^* A z_k}{z_k^* z_k}, \quad (k \geq 1) \quad (20)$$