数値計算講義ノート７
固有値問題の解法(2)

大石進一

May 12, 2003

§1 固有値の存在範囲

大まかに固有値の存在範囲などを評価する方法を論じる。

排除定理

まず，固有値が含まれない λ の (複素平面内の) 領域を示す定理を述べよう。

これは**排除定理** (exclusion theorem) と呼ばれる。排除定理から逆にすべての固有値が含まれる領域がわかるので，排除定理がすべての固有値が含まれる領域を示す形で述べられることもある。つぎの結果もその形である。

定理

行列ノルムがベクトルのノルムからつぎのように定義されるとする。

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \tag{1}$$

このとき，行列Aのすべての固有値λは

$$|\lambda| \leq \|A\| \tag{2}$$

をみたす。

証明　xが行列Aの固有値λに対する固有ベクトルであるとすると

$$Ax = \lambda x,\ x \neq 0 \tag{3}$$

である。これから

$$\|\lambda x\| = |\lambda|\|x\| \leq \|A\|\|x\| \tag{4}$$

を得る。よって，行列Aのすべての固有値λは

$$|\lambda| \leq \|A\| \tag{5}$$

をみたす。

もう少し精度のよい評価を考えよう。

ゲルシュゴリン(Gershgorin)の定理

行列Aの固有値は複素λ平面の中のつぎの集合の中に存在する。

$$K = \bigcup_{i=1}^{n} \left\{ \mu \in C \,\middle|\, |\mu - a_{ii}| \leq \sum_{k=1,k\neq i}^{n} |a_{ik}| \right\} \tag{6}$$

右辺の和集合の中の各集合は中心をa_{ii}とする半径

$$r = \sum_{k=1,k\neq i}^{n} |a_{ik}| \tag{7}$$

の複素平面内の閉円板である。

証明

xが行列Aの固有値λに対する固有ベクトルであるとする。いま，$n \times n$行列Bを任意に選び，λはBの固有値でないとする。このとき

$$(A - B)x = (\lambda I - B)x \tag{8}$$

となる。λ が B の固有値でないことから $(\lambda I - B)^{-1}$ が存在することがわかる。よって

$$x = (\lambda I - B)^{-1}(A - B)x \tag{9}$$

となる。これから

$$\|(\lambda I - B)^{-1}(A - B)\| \geq 1 \tag{10}$$

を得る。

ここで，特に，行列 A の対角成分以外をすべて零とした行列を A_D とし，$B = A_D$ の場合を考える。ノルムとして最大値ノルムを考えると

$$\|(\lambda I - A_D)^{-1}(A - A_D)\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \frac{1}{|\lambda - a_{ii}|} \sum_{k=1, k \neq i}^{n} |a_{ik}| \geq 1 \tag{11}$$

を得る。これから，ある j が存在して

$$|\lambda - a_{jj}| \leq \sum_{k=1, k \neq j}^{n} |a_{jk}| \tag{12}$$

が成立する。こうして，ゲルシュゴリンの定理を得る。

§2 対称行列に対するハウスホルダー・ギブンス法(２分法)

実対称行列をハウスホルダー法により実対称３重対角行列に相似変換し，２分法によりすべての固有値を求める方法を学ぶ。固有値が求められた後は，逆反復法で固有ベクトルを求める。

ハウスホルダー法

まず，実対称行列を実対称３重対角行列に変換するハウスホルダー法の概要を述べる。

ハウスホルダー法とは，鏡影変換を$n-2$回適用することにより，実対称行列Aを実対称３重対角行列Tに相似変換する方法である。

数学的には，Q_iを適切な鏡影変換とすると，TはAから

$$T = Q^t A Q,\ Q = Q_1 Q_2 \cdots Q_{n-2} \tag{13}$$

と導かれる。3重対角行列

$$T = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \cdots & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & \cdots & & \\ 0 & b_2 & a_3 & \cdots & & \\ & & & \cdots & & \\ & & & \cdots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & \cdots & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix} \tag{14}$$

は対角成分 $\{a_i\}_{i=1}^{n}$ と副対角成分 $\{b_i\}_{i=1}^{n-1}$ によって決まるので，$T = T(\{a_i\}_{i=1}^{n}, \{b_i\}_{i=1}^{n-1})$ と書くことにする。また，行列 A の第 ij 成分を a_{ij} と書くことにする。

二分法

つぎに3重対角対称行列 $T = T(\{a_i\}_{i=0}^{n}, \{b_i\}_{i=0}^{n-1})$ の固有値を求める方法を示そう。

まず，大ざっぱに固有値がどの範囲に存在するかをゲルシュゴリンの定理により調べる。実対称行列のすべての固有値は実数であるからこの定理より区間

$$[\min_{1\le k\le n} a_k - (|b_{k-1}| + |b_k|), \max_{1\le k\le n} a_k + (|b_{k-1}| + |b_k|)] \tag{15}$$

の中に行列Tのすべての固有値があることがわかる。以下，この区間を$[a,b]$と書く。

ある$1 \leq k \leq n-1$で$b_k = 0$となるときは

$$\begin{aligned} & \det(T(\{a_i - \lambda\}_{i=0}^{n}, \{b_i\}_{i=1}^{n-1})) \\ = \ & \det(T(\{a_i - \lambda\}_{i=0}^{k}, \{b_i\}_{i=1}^{k-1})) \det(T(\{a_i - \lambda\}_{i=k+1}^{n}, \{b_i\}_{i=k}^{n-1})) \end{aligned}$$

となるので，$T(\{a_i\}_{i=0}^{k}, \{b_i\}_{i=1}^{k-1})$の固有値と$T(\{a_i\}_{i=k+1}^{n}, \{b_i\}_{i=k}^{n-1})$の固有値を求める問題に帰着することがわかる。そこで，$b_i \neq 0, \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$を仮定する。

$$f_k(\lambda) = \det(T(\{a_i - \lambda\}_{i=0}^{k}, \{b_i\}_{i=1}^{k-1})) \tag{16}$$

とする。右辺の行列式を最後の行について展開すると

$$f_k(\lambda) = (a_k - \lambda) f_{k-1}(\lambda) - b_{k-1}^2 f_{k-2}(\lambda) \tag{17}$$

を得る。$f_0(\lambda) = 1$ と置く。$f_1(\lambda) = \lambda - a_1$ である。これらを初期関数として漸化式 17 は $k = 2, 3, \cdots, n$ について成立し，$f_k(\lambda)$ が計算できることになる。λ の実関数列

$$f_0(\lambda), f_1(\lambda), \cdots, f_n(\lambda) \tag{18}$$

は任意の $\lambda \in [a, b]$ に対してつぎの性質をみたす。

1. $f_0(\lambda)$ は一定符号である。

2. $f_n(\lambda) = 0$ の根はすべて単根である。

3. $f_k(\lambda) = 0$ ならば $f_{k-1}(\lambda) f_{k+1}(\lambda) < 0$ となる。ただし，$1 \leq k \leq n - 1$

4. ξ が $f_n(\lambda) = 0$ の根のとき $\mathrm{sign}\ f_{n-1}(\xi) = -\mathrm{sign}\ f'_n(\xi)$

これをこの関数列は**スツルム** (Sturm) 列をなすという (その証明は省略する)。このとき，つぎのことが成立する。

スツルムの定理

$c \le d, \quad c, d \in \boldsymbol{R}$ とする。区間 [c,d) 内に存在する $f_n(\lambda) = 0$ の実根の数 p は $p = w(d) - w(c)$ となる。ただし，$w(\lambda)$ はスツルム列

$$f_n(\lambda), f_{n-1}(\lambda), \cdots, f_0(\lambda) \tag{19}$$

の符号の変化の数である。

スツルムの定理の証明は省略する。スツルムの定理に基づき，固有値の大きいほうから i 番目のもの ξ_i を求めるための２分法を示そう。ゲルシュゴリンの定理によりすべての固有値が含まれる区間 $[a, b]$ を評価する。まず

$$a_0 = a, \ b_0 = b$$

とする。つぎに $j = 0, 1, 2, \cdots$ についてつぎを繰り返す。

$$\mu_j = \frac{a_j + b_j}{2}$$

$$a_{j+1} = \begin{cases} a_j & (w(\mu_j) \geq n + 1 - i \text{のとき}) \\ \mu_j & (w(\mu_j) < n + 1 - i \text{のとき}) \end{cases}$$

$$b_{j+1} = \begin{cases} \mu_j & (w(\mu_j) \geq n + 1 - i \text{のとき}) \\ b_j & (w(\mu_j) < n + 1 - i \text{のとき}) \end{cases}$$

この反復の途中でつぎの評価が成立する。

$$\begin{aligned} &[a_{j+1}, b_{j+1}] \subset [a_j, b_j] \\ &|a_{j+1} - b_{j+1}| = \frac{|a_j - b_j|}{2} \\ &\xi_i \in [a_{j+1}, b_{j+1}] \end{aligned} \tag{20}$$

2分法で実対称行列の固有値をすべて求めるのに要した計算時間の例を表に示す(CPUはPentium II 200MHz)。

次元 n	全固有値
10	0.01
50	0.17
100	0.90

なお，２分法はGivensにより提案された(J.W.Givens: Numerical computation of the characteristic values of a real symmetric matrix, Oak Ridge National Laboratory Report, ORNL-1574 (1954))。また，漸化式17による計算はオーバーフローを起こしやすい欠点が指摘されている。この欠点は，漸化式17に簡単な変数変換を施して別の漸化式を導く方法が知られている。これについては，後に少し違う立場から導出する。

§3 固有ベクトルの計算

実対称行列 A を実対称３重対角行列に相似変換し，その固有値を２分法で計算する方法を示した。では，固有ベクトルはどうやって計算すればよいか。一つの方法は

逆反復法の利用である。2分法で計算したTの固有値σに対して，$x_0 \in \boldsymbol{R}^n$を適当な初期ベクトルとして

$$(A-\sigma I)x_{k+1} = \sigma x_k,\ (k=0,1,\cdots) \tag{21}$$

を解いていくと，x_kは$k \to \infty$で固有値σの固有ベクトルに収束していくことが適当な条件下で期待される。

しかし，この方法より効率的なのは，Tの3重対角性を利用するつぎの方法である。TはAからハウスホルダー変換によって得られているので

$$T = Q^t AQ,\ Q = Q_1 Q_2 \cdots Q_{n-2} \tag{22}$$

と書ける。ただし，Q_iは鏡影変換である。$y \in \boldsymbol{R}^n$がTの固有値σの固有ベクトルとすると

$$Ty = Q^t AQy = \sigma y \tag{23}$$

が成立する。Qは直交行列であるから，$QQ^t = I$となるので，上式の両辺に左からQをかけると

$$QQ^t AQy = A(Qy) = \sigma(Qy) \tag{24}$$

となることがわかる。すなわち，$x = Qy$ が A の固有値 σ に対する固有ベクトルとなることがわかる。

$Q_i = I - 2u_iu_i^t$ の形をしているので

$$
\begin{aligned}
&v = y; \\
&\mathrm{for}(i = 0; i < n - 2; + + i) \\
&v = v - 2(u_i^t v)u_i
\end{aligned}
$$

と計算すればよい。これは u_i を記憶しておくだけで，効率よく計算できる。

ここで，実対称３重対角行列 T に対して逆反復法を適用してその固有値 σ に対する固有ベクトル y を求める問題を考えよう。$y_0 \in \boldsymbol{R}^n$ を適当な初期ベクトルとして

$$(T - \sigma I)y_{k+1} = \sigma y_k,\ (k = 0, 1, \cdots) \tag{25}$$

を解いていくと，y_k は $k \to \infty$ で固有値 σ の固有ベクトルに収束していくことが適当な条件下で期待される。このとき，式25は３重対角行列なので n に比例する乗算回数によって式25の１ステップが解けることがわかる。

§4 Q　R　法

QR 法は固有値問題の解法としてよく用いられる反復法である。QR 法について実対称行列と実非対称行列に分けて学ぶ。

対称行列に対するQR法

実対称３重対角行列の固有値を求める方法として，２分法とは異なる方法であるQR法を学ぼう。QR 法は非対称行列にも有効となる。QR 法は1961年 Francis と Kublanovskaya によって独立に提案された (J.F.G.Francis: The QR transformation. A unitary analogue to the LR transformation. I., Computer J., **4**, pp.264-271 (1961/62) The QR transformation II., *ibid.*, 332-345 (1961/62)

V.N.Kublanovskaya: On some algorithms for the solution of the complete eigenvalue problem, Z. Vycisl.Math.i Mat. FIz., **1**, pp.555-570 (1961))。

Aを正則行列とする。Aをユニタリ行列Qと上三角行列Rの積に分解すること

$$A = QR \tag{26}$$

をQR分解という。以下，Q_kはユニタリ行列，R_kは上三角行列とする。QR法は$A_1 = A$として，これを$A_1 = Q_1 R_1$とQR分解する。そして，$A_2 = R_1 Q_1$を作り，これをさらに$A_2 = Q_2 R_2$とQR分解する。という操作を繰り返していく反復解法である。これを，まとめると

$$\begin{aligned} &A_1 = A,\ A_1 = Q_1 R_1 \\ &A_{k+1} = R_k Q_k,\ A_{k+1} = Q_{k+1} R_{k+1},\ (k = 1, 2, \cdots) \end{aligned} \tag{27}$$

となる。$A_k = Q_k R_k$より，$R_k = Q_k^{-1} A_k$である。よって

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k \tag{28}$$

となる。これは，A_{k+1}がA_kから相似変換によって得られること，したがって，A_k，$(k = 1, 2, \cdots)$がみな同じ固有値をもつことを示している。

$n \times n$実行列Aの固有値が

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n| \tag{29}$$

とすると A_k の第 ij 要素 $a_{ij}^{(k)}$ は

$$a_{ij}^{(k)} = \begin{cases} 0 & (i > j) \\ \lambda_i & (i = j) \\ (U) & (i < j) \end{cases} \tag{30}$$

となることが示せる。収束は $|\lambda_k|/|\lambda_n|$ による一次収束であることも知られている。よって，反復式27によって，A_k を計算したとき，その対角成分に固有値が現れることがわかる。このような固有値の反復計算法をQR法という。

行列のQR分解をするには，**グラム・シュミット**(Gram Schmidt)**の直交化法**，ハウスホルダー変換による方法，回転行列による方法などがある。

QR法の収束は λ_k/λ_n，　$(k = 1, 2, \cdots, n-1)$ の値が大きいほど速いことが知られている。ただし，λ_n は絶対値最小の固有値とする。例えば，d_n はその近似値となる。μ を絶対値最小の固有値の推定値として，$T - \mu I = QR$ とQR分解し，それから $RQ + \mu I$ を作るという形にQR法を変形することがよく行われる。これをシフト付きQR法という。

実対称行列をハウスホルダー変換によって実対称３重対角行列に相似変換し，その後QR法によってすべての固有値を計算する方法を簡単のためHQR法と呼ぼう。HQR法によって$n \times n$実対称行列の固有値をすべて求めるのに要する計算時間の例をつぎの表に示す。これは手元のパソコン(Pentium II 200 MHz CPU) で計算した時間である。この表から100次元行列程度まではQR法と２分法ではほぼ同じ計算時間であることがわかる。

次元n	計算時間〔sec〕	次元n	計算時間〔sec〕
10	0.01	300	19.64
50	0.17	400	45.39
100	0.91	500	90.13
200	6.12		

非対称行列に対するQR法

実非対称$n \times n$行列Aの固有値をQR法ですべてもとめる方法について学ぶ。

LR法とQR法　1958年，RutishauserはLR法と呼ばれる$n \times n$実行列Aの固有値を計算する方法を示した(H.Rutishauser: Solutions of eigenvalue problems with LR transformation, Nat. Bur. Standards Appl. Math. Ser., **49**, pp.47-81 (1958))。

LR法では，$A_1 = A$からはじめ，$i = 1, 2, \cdots,$について線形連立方程式のLU分解法により，行列A_iを$A_i = L_i R_i$とLU分解する。ただし，L_iは対角成分が1である左(下)三角行列，R_iは右(上)三角行列である。そして，$A_{i+1} = R_i L_i$として，また，これをLU分解する。こうしていくうちに，適当な条件の下で，A_iは上半行列A_∞に収束していく。固有値はその対角成分に現れる。LR法の短所は途中のA_iのLU分解が必ずしも成功しない場合があることである。もし，A_iがLU分解をもち，$A_i = L_i R_i$と分解できれば，$A_{i+1} = R_i L_i$は

$$A_{i+1} = L_i^{-1} A_i L_i \tag{31}$$

となって，A_iと相似である。実際，$A_i = L_i R_i$を上式に代入すると，$A_{i+1} = R_i L_i$を得る。

LR法は以上のような短所があるため，あまり用いられないが，近年ソリトン理論において，離散的戸田方程式と関係することがわかった。その結果，LR法によって

なぜ固有値が計算できるかは，ソリトンの運動によって直感的に理解できるようになった。

QR 法はこのような LR 法の困難を回避したものと考えることができる。QR 法は LR 法において，A_i をユニタリ行列 Q_i と上三角行列 R_i の積に分解し，$A_{i+1} = R_iQ_i$ とする方法である。QR 分解は常に存在するので，QR 法は常に実行可能である。QR 法を非対称行列に適用すると，適当な条件の下では，実数で重複がない固有値が存在すると，その固有値に収束する A_i の対角要素が存在し，複素共役な固有値対が存在すると，A_i には 2×2 のブロック対角

$$\begin{pmatrix} a_{kk} & a_{k,k+1} \\ a_{k+1,k} & a_{k+1,k+1} \end{pmatrix} \tag{32}$$

に収束する要素がある。式32で定義される行列の固有値がその複素共役な固有値の対となる。こうして，QR 法によって，すべての実非対称行列の固有値が求められることが期待される。

ハウスホルダー変換

実対称行列の固有値を求める際に，ハウスホルダー変換によって，これを実対称３重対角に相似変換したように，実非対称行列の固有値を求める際にもこれにハウスホルダー変換を施すことが考えられる。そうすると，つぎの形の行列に実非対称行列を相似変換できることがわかる。

$$
\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1,n-2} & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\
a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2,n-2} & a_{2,n-1} & a_{2,n} \\
0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3,n-2} & a_{3,n-1} & a_{3,n} \\
0 & 0 & a_{43} & \cdots & a_{4,n-2} & a_{4,n-1} & a_{4,n} \\
. & . & . & \cdots & . & . & . \\
0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n,n-1} & a_{n,n}
\end{pmatrix}
\tag{33}
$$

この形の行列をヘッセンベルグ行列という。H を実 $n \times n$ ヘッセンベルグ行列とする。$H = QR$ とQR分解して，$H' = RQ$ を作ると，H' もヘッセンベルグ行列となることが知られている。したがって，与えられた実非対称 $n \times n$ 行列 A をハウスホルダー変換によってヘッセンベルグ行列 H に相似変換し，H 対してQR法を適用していくと，途中に現れる $H_i = R_iQ_i$ はすべてヘッセンベルグ行列となる。ヘッセンベルグ行列が零要素を多くもつことを利用してQR法を適用すると，密行列 A に

ＱＲ法を直接適用するよりも，大幅に計算効率をあげることができる(一回のＱＲ分解の手間が$O(n^2)$となる)。

実非対称行列を実ヘッセンベルグ行列に変換するハウスホルダー変換は実対称行列を実対称３重対角行列に変換するものと原理はまったく同じである。ただ，対称性がないので，３重対角行列のかわりにヘッセンベルグ行列が得られる。

こうして，固有値は実ヘッセンベルグ行列HをQR分解することによって計算される。