

気象学のための数学

3 固有値・固有ベクトル

固有値、固有ベクトルは線形な系の特性を考えるうえで非常に重要である。また、主成分分析のような統計解析にも用いられる。ここでは計算機を用いて実対称行列の固有値、固有ベクトルを求める方法を学ぶ。

3.1 固有値・固有ベクトル

ある正方行列Aについて、零ベクトルではないベクトル \vec{x} が存在して、

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x}$$

を満たすとき、 λ を行列Aの**固有値**、 \vec{x} を**固有ベクトル**という。行列Aの固有値 λ は、

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

を満たす。

[証明]

λ を行列Aの**固有値**、 \vec{x} を**固有ベクトル**とすると、

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x}$$

より、

$$(A - \lambda E)\vec{x} = \vec{0}$$

ここで、 $A - \lambda E$ に逆行列が存在すると仮定する。左から逆行列 $(A - \lambda E)^{-1}$ をかけると、

$$\vec{x} = \vec{0}$$

となり、 \vec{x} が零ベクトルではないという条件に反し矛盾が生じる。したがって、 $A - \lambda E$ に逆行列は存在しない。ゆえに、

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

である。

$\det(A - \lambda E) = 0$ は、固有値 λ に関する n 次方程式になっている。この方程式を**固有方程式**（特性方程式）という。一般に n 次方程式の解は重解を含めれば n 個存在するので、 n 次正方行列Aの固有値は重複を含めて n 個存在する。

また、ある正方行列が正則であれば固有値はゼロではない。逆に、ある正方行列の固有値がゼロでなければ正則である。つまり、

正則である \Leftrightarrow 固有値がゼロではない

問1. 以下の行列の固有値、固有ベクトルをすべて求めよ。

$$(1) \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \quad (2) \begin{pmatrix} 1 & -3 & 0 \\ -2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

3.2 エルミート行列

正方行列Aのすべての成分 a_{ij} が実数であって、 $a_{ij} = a_{ji}$ を満たすとき、行列Aを**実対称行列**という。また、複素数の場合に拡張して、正方行列Aのすべての成分 a_{ij} が $a_{ij} = \bar{a}_{ji}$ を満たすとき、行列Aを**エルミート行列**という。実対称行列とは、転置行列が自分自身に等しい行列のことであり、エルミート行列とは、随伴行列が自分自身と等しい行列のことである。

エルミート行列にはいくつかの重要な性質がある。

エルミート行列の固有値はすべて実数である。

[証明]

正方行列Aのある固有値を λ 、固有ベクトルを \vec{x} とすると、

$$\vec{x}^* A \vec{x} = \vec{x}^* (A \vec{x}) = \vec{x}^* (\lambda \vec{x}) = \lambda \vec{x}^* \vec{x}$$

が成り立つ。一方、 $A^* = A$ だから、

$$\vec{x}^* A \vec{x} = \vec{x}^* A^* \vec{x} = (\vec{x}^* A^*) \vec{x} = (A \vec{x})^* \vec{x} = \tilde{\lambda} \vec{x}^* \vec{x}$$

ふたつの式を比べると、

$$\tilde{\lambda} = \lambda$$

となるから、 λ は実数である。

また、

エルミート行列の異なる固有値に対応する固有ベクトルは互いに直交する。

[証明]

正方行列Aのふたつの異なる固有値を λ_1 、 λ_2 、それぞれの固有値に対応する固有ベクトルを \vec{x}_1 、 \vec{x}_2 とすると、

$$\vec{x}_2^* A \vec{x}_1 = \vec{x}_2^* (A \vec{x}_1) = \vec{x}_2^* (\lambda_1 \vec{x}_1) = \lambda_1 \vec{x}_2^* \vec{x}_1$$

が成り立つ。一方、 $A^* = A$ だから、

$$\vec{x}_2^* A \vec{x}_1 = \vec{x}_2^* A^* \vec{x}_1 = (A \vec{x}_2)^* \vec{x}_1 = (\lambda_2 \vec{x}_2)^* \vec{x}_1 = \lambda_2 \vec{x}_2^* \vec{x}_1$$

ふたつの式を比べると、

$$\lambda_1 \vec{x}_2^* \vec{x}_1 = \lambda_2 \vec{x}_2^* \vec{x}_1$$

となるから、 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ であれば、

$$\vec{x}_2^* \vec{x}_1 = 0$$

したがって、異なる固有値に対応する固有ベクトルは直交する。

3. 3 べき乗法による固有値・固有ベクトルの計算

実対称行列Aの固有値のうち、絶対値が最大のもの比較的容易に計算できる。n次の実対称行列の固有値はn個存在するので、対応する固有ベクトルもn個存在する。実対称行列の固有ベクトルは互いに直交するので一次独立である。したがって、任意のn次元ベクトルは、n個の固有ベクトルの線形結合で表わすことができる。ここで、零ベクトルではない、あるn次元ベクトルを \vec{y} 、n次実対称行列Aの固有値を絶対値の大きいほうから順に λ_1 、 λ_2 、...、 λ_n 、対応する固有ベクトルを \vec{x}_1 、 \vec{x}_2 、...、 \vec{x}_n とすると、

$$\vec{y} = c_1 \vec{x}_1 + c_2 \vec{x}_2 + \dots + c_n \vec{x}_n$$

と書ける。ここで、 c_i は実数である。ただし、各固有ベクトルは絶対値が1になるように規格化されているものとする。 \vec{y} に左から行列Aをk回かけると、

$$A^k \vec{y} = c_1 A^k \vec{x}_1 + c_2 A^k \vec{x}_2 + \dots + c_n A^k \vec{x}_n = c_1 \lambda_1^k \vec{x}_1 + c_2 \lambda_2^k \vec{x}_2 + \dots + c_n \lambda_n^k \vec{x}_n$$

となる。ここで、 $i \geq 2$ に対して、 $|\lambda_1| > |\lambda_i|$ だから、

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|\lambda_i^k|}{|\lambda_1^k|} \rightarrow 0$$

ゆえに、

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|c_i \lambda_i^k \vec{x}_i|}{|c_1 \lambda_1^k \vec{x}_1|} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|c_i \lambda_i^k|}{|c_1 \lambda_1^k|} = \frac{|c_i|}{|c_1|} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|\lambda_i^k|}{|\lambda_1^k|} \rightarrow 0$$

したがって、 $k \rightarrow \infty$ のとき、

$$A^k \vec{y} = c_1 \lambda_1^k \vec{x}_1 + c_2 \lambda_2^k \vec{x}_2 + \dots + c_n \lambda_n^k \vec{x}_n \rightarrow c_1 \lambda_1^k \vec{x}_1$$

つまり、適当なベクトル \vec{y} に対して行列Aを多数回かければ、絶対値が最大である固有値に対応する固有ベクトルに収束する。実際に計算するときには、 $|\lambda_1| > 1$ であれば $k \rightarrow \infty$ で $|A^k \vec{y}| \rightarrow \infty$ 、 $|\lambda_1| < 1$ であれば $|A^k \vec{y}| \rightarrow 0$ となるので、行列Aをかけるごとにベクトル \vec{y} を規格化するとよい。このようにして実対称行列の絶対値が最大の固有値と、対応する固有ベクトルを求める方法を**べき乗法**という。

行列Aの固有値が $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ であるとき、逆行列 A^{-1} の固有値は $\lambda_1^{-1}, \lambda_2^{-1}, \dots, \lambda_n^{-1}$ である。したがって、絶対値が最小である固有値を求めるときは、逆行列について絶対値が最大である固有値を求めればよい。

3. 4 グラム・シュミットの直交化

n次元の空間において、たがいに直交し大きさが1であるn個のベクトルの組を**正規直交基底**という。たとえば、実対称行列の固有ベクトルはたがいに直交するから、実対称行列Aの規格化された固有ベクトルの組 $\{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n\}$ は正規直交基底である。ここでは、正則な正方行列 $A = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_n)$ から、正規直交基底 $\{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n\}$ を求めることを考えてみる。

$$\begin{aligned} \vec{x}_1 &= \frac{\vec{a}_1}{|\vec{a}_1|} \\ \vec{x}_2 &= \frac{\vec{a}_2 - (\vec{a}_2 \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1}{|\vec{a}_2 - (\vec{a}_2 \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1|} \\ \vec{x}_3 &= \frac{\vec{a}_3 - (\vec{a}_3 \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1 - (\vec{a}_3 \cdot \vec{x}_2)\vec{x}_2}{|\vec{a}_3 - (\vec{a}_3 \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1 - (\vec{a}_3 \cdot \vec{x}_2)\vec{x}_2|} \\ &\dots \\ \vec{x}_n &= \frac{\vec{a}_n - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1 - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_2)\vec{x}_2 - \dots - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_{n-1})\vec{x}_{n-1}}{|\vec{a}_n - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1 - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_2)\vec{x}_2 - \dots - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_{n-1})\vec{x}_{n-1}|} \end{aligned}$$

このようにして得られたベクトルの組 $\{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n\}$ は正規直交基底である。つまり、行列 $Q = (\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n)$ は直交行列になっている。このようにして正則な正方行列から直交行列を求める方法を**グラム・シュミットの直交化**（シュミットの直交化）という。

問2. 以下の行列に対して、グラム・シュミットの直交化を行え。

$$(1) \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & -3 \\ 1 & -1 & 4 \end{pmatrix} \quad (2) \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 3 \\ 0 & -2 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & -1 & 2 \\ 2 & -1 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

3. 5 QR分解

正則な正方行列Aについて、グラム・シュミットの直交化によって直交行列 $Q = (\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n)$ を求める。このとき、

$$A = QR$$

と書くことができる。ここで、行列Rは対角成分よりも左下にある成分はすべてゼロである。このような行列を**上三角行列**という。このように、正則な正方行列を直交行列と上三角行列の積に分解することを**QR分解**という。任意の正則な正方行列は一意的にQR分解できる。

問3. 問2の行列(1)、(2)に対して、QR分解を行え。

3. 6 QR法による固有値・固有ベクトルの計算

べき乗法では、適当なベクトル \vec{y}_1 に対して、実対称行列Aをかけるという操作を多数回反復することによって絶対値が最大の固有値に対応する固有ベクトル \vec{x}_1 に収束させた。実対称行列の固有ベクトルはたがいに直交する。したがって、適当なベクトル \vec{y}_2 に対して、行列Aをかけてベクトル \vec{y}_1 と平行な成分を取り除くという操作を反復すると、絶対値が2番目に大きい固有値に対応する固有ベクトル \vec{x}_2 に収束すると期待される。一般に、適当なベクトル \vec{y}_i に対して、行列Aをかけてベクトル $\vec{y}_1, \dots, \vec{y}_{i-1}$ と平行な成分を取り除くという操作を反復すると、絶対値がi番目に大きい固有値に対応する固有ベクトル \vec{x}_i に収束する。初期のベクトルの組

$\{\vec{y}_1, \vec{y}_2, \dots, \vec{y}_n\}$ を $(\vec{y}_1, \vec{y}_2, \dots, \vec{y}_n) = E$ (E は単位行列) としたとき、以上の操作を次のように書くことができる。

$$A = AE = P_1 R_1$$

$$A P_1 = P_2 R_2$$

$$A P_2 = P_3 R_3$$

$$A P_3 = P_4 R_4$$

...

ただし、 P_k は直交行列、 R_k は上三角行列である。 $k \rightarrow \infty$ のとき、 $\vec{y}_i \rightarrow \vec{x}_i$ だから、 $P_k \rightarrow (\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n)$ である。これらの式は左から P_k^{-1} をかけることによって、次のように変形できる。

$$A = AE = P_1 R_1$$

$$P_1^{-1} A P_1 = P_1^{-1} P_2 R_2$$

$$P_2^{-1} A P_2 = P_2^{-1} P_3 R_3$$

$$P_3^{-1} A P_3 = P_3^{-1} P_4 R_4$$

...

ここで、

$$Q_1 = P_1$$

$$Q_2 = P_1^{-1} P_2$$

$$Q_3 = P_2^{-1} P_3$$

$$Q_4 = P_3^{-1} P_4$$

...

と定義すると、 Q_k は直交行列であって、

$$A = Q_1 R_1$$

$$Q_1^{-1} A Q_1 = Q_2 R_2$$

$$Q_2^{-1} Q_1^{-1} A Q_1 Q_2 = Q_3 R_3$$

$$Q_3^{-1} Q_2^{-1} Q_1^{-1} A Q_1 Q_2 Q_3 = Q_4 R_4$$

...

となる。一般に、

$$Q_{k-1}^{-1} \dots Q_2^{-1} Q_1^{-1} A Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1} = Q_k R_k$$

の両辺に左側から Q_k^{-1} 、右側から Q_k をかけると、

$$Q_k^{-1} \dots Q_2^{-1} Q_1^{-1} A Q_1 Q_2 \dots Q_k = R_k Q_k$$

上の式に代入すると、

$$A = Q_1 R_1$$

$$R_1 Q_1 = Q_2 R_2$$

$$R_2 Q_2 = Q_3 R_3$$

$$R_3 Q_3 = Q_4 R_4$$

...

となる。したがって、次のような手順によって、実対称行列 A の固有値、固有ベクトルを求めることができる。

(1) 行列 A をQR分解し、

得られた行列 Q_1 、 R_1 について $R_1 Q_1$ を計算して行列 A_1 とする。

(2) 行列 A_1 をQR分解し、

得られた行列 Q_2 、 R_2 について $R_2 Q_2$ を計算して行列 A_2 とする。

一般に、

(k) 行列 A_{k-1} をQR分解し、

得られた行列 Q_k 、 R_k について $R_k Q_k$ を計算して行列 A_k とする。

このように QR 分解を反復することによって、 $Q_1 Q_2 Q_3 \cdots Q_k$ は行列 A の固有ベクトルからなる行列 $(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n)$ に収束する。また、このとき、 R_k は対角行列に収束し、対角成分は行列 A の固有値に収束する。このようにして実対称行列の固有値、固有ベクトルを求める方法を **QR法** という。

課題：①任意の正則な正方行列に対してグラム・シュミットの直交化を行うプログラムを作成せよ。

②次に、そのプログラムを拡張して、任意の正則な正方行列に対して QR 分解を行うプログラムを作成せよ。QR 分解を行うプログラムは QRDEV という名前のサブルーチン (C の場合は qrdev という名前の関数) として作る。サブルーチン (関数) の中では、別に作成したサブルーチン (関数) を参照してもよい。

③さらに、②で作成したサブルーチン (関数) を用いて、任意の正則な実対称行列について、QR 法を用いて固有値、固有ベクトルを計算するプログラムを作成せよ。固有値、固有ベクトルを計算するプログラムは EIGEN という名前のサブルーチン (C の場合は eigen という名前の関数) として作る。また検算を適宜行うこと。

④作成したサブルーチン (関数) を用いて、以下の行列の固有値、固有ベクトルをすべて求めよ。

$$\begin{pmatrix} 0.9 & 0.4 & 0.1 & -0.3 & -0.1 & 0.2 \\ 0.4 & 0.8 & 0.5 & 0.0 & -0.2 & -0.1 \\ 0.1 & 0.5 & 0.8 & 0.4 & -0.1 & -0.2 \\ -0.3 & 0.0 & 0.4 & 0.7 & 0.3 & -0.1 \\ -0.1 & -0.2 & -0.1 & 0.3 & 0.8 & 0.4 \\ 0.2 & -0.1 & -0.2 & -0.1 & 0.4 & 0.6 \end{pmatrix}$$

計算に用いたプログラム (prog03.f または prog03.c) と、固有値、固有ベクトルを記したテキストファイル (answer03.txt) を提出せよ。