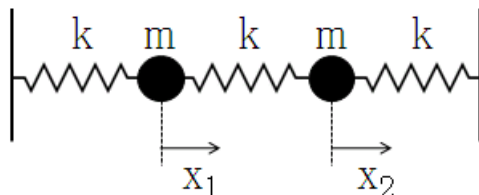


### 3 固有値・固有ベクトル

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 はじめに

図のようなバネ定数  $k$  のバネによってつながれた質量  $m$  のおもりがどのような振動をするか考える。



それぞれのおもりの変位を  $x_1$  と  $x_2$  すると、運動方程式は次のように書ける。

$$\begin{cases} m\ddot{x}_1 = -kx_1 - k(x_1 - x_2) \\ m\ddot{x}_2 = -k(x_2 - x_1) - kx_2 \end{cases}$$

簡単のため、質量  $m$  とバネ定数  $k$  を 1 として、

$$\begin{cases} \ddot{x}_1 = -2x_1 + x_2 \\ \ddot{x}_2 = x_1 - 2x_2 \end{cases}$$

とする。ここで、調和振動を仮定して、

$$x_1 = \hat{x}_1 \sin \omega t, \quad x_2 = \hat{x}_2 \sin \omega t$$

とおくと、

$$\begin{cases} -\omega^2 \hat{x}_1 = -2\hat{x}_1 + \hat{x}_2 \\ -\omega^2 \hat{x}_2 = \hat{x}_1 - 2\hat{x}_2 \end{cases}$$

と書ける。さらに、この連立方程式は、ベクトルと行列を用いて、

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix}$$

と書きかえることができる。ただし  $\lambda = \omega^2$  である。つまり、この連成振動の問題は、行列  $\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$  をかけたときに定数倍になるようなベクトル  $\begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix}$  と、そのベクトルに対応する定

数  $\lambda$  を求める問題に置きかえられることになる。この方程式の解は、 $\begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$  という自

明な解を除くと、 $\lambda = 1$  に対して  $\begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ 、 $\lambda = 3$  に対して  $\begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$  である。前者はふたつのおもりが同じ運動をする場合、後者はふたつのおもりが逆の運動をする場合である。このような数学的な問題においては  $\lambda$  を固有値、対応するベクトルを固有ベクトルとよんでいる。以上のように、系の時間変化を決定する方程式系を行列によって記述し、固

有値、固有ベクトルを計算すると、系が持っている固有の振動のパターンを調べることができる。このような固有の振動パターンを固有振動とよぶことがある。

以下では、行列の固有値、固有ベクトルの性質や計算方法について考え、系の固有振動を調べるために応用してみる。

### 3. 2 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、 $\lambda$ を行列Aの**固有値(eigenvalue)**、 $\vec{x}$ を**固有ベクトル(eigenvector)**という。行列Aの固有値 $\lambda$ は、

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

を満たす。

[証明]

$\lambda$ 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。

逆に、 $\det(A - \lambda E) = 0$ を満たす $\lambda$ は行列Aの固有値であることがわかっている<sup>1)</sup>。

**$\lambda$ はAの固有値である  $\Leftrightarrow A - \lambda E$ の行列式はゼロである**

$\det(A - \lambda E) = 0$ は、固有値 $\lambda$ 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)(characteristic equation)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、上の命題において $\lambda = 0$ の場合を考えれば、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. 3 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**(real symmetric matrix)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 $a_{ij}$ について、 $a_{ij}$ が $a_{ji}$ の複素共役 $\bar{a}_{ji}$ と等しい、つまり $a_{ij} = \bar{a}_{ji}$ を満たすとき、行列Aを**エルミート行列**(Hermitian matrix)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]

エルミート行列Aのある固有値を $\lambda$ 、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、

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

ふたつの式を比べると、

$$\bar{\lambda} = \lambda$$

となるから、 $\lambda$ 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]

エルミート行列Aのふたつの異なる固有値を $\lambda_1$ 、 $\lambda_2$ 、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、

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

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。 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ だから、

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

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. 4 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、固有ベクトルのうち、絶対値最大の固有値と、その固有値に対応する固有ベクトルは比較的容易に計算できる。たとえば、

$$A = \begin{pmatrix} 1.8 & 0.4 \\ 0.4 & 1.2 \end{pmatrix}$$

の固有値、固有ベクトルは、

$$\lambda_1 = 2, \vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 0.894 \\ 0.447 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_2 = 1, \vec{x}_2 = \begin{pmatrix} -0.447 \\ 0.894 \end{pmatrix}$$

である。ここで、適当なベクトル $\vec{y}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ に行列Aをかけて、 $\vec{y}_1$ を得るものとする。

$$\vec{y}_1 = \begin{pmatrix} 1.8 & 0.4 \\ 0.4 & 1.2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.8 \\ 0.4 \end{pmatrix}$$

を得る。もう一度行列Aをかけて、

$$\vec{y}_2 = \begin{pmatrix} 1.8 & 0.4 \\ 0.4 & 1.2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1.8 \\ 0.4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3.4 \\ 1.2 \end{pmatrix}$$

を得る。同様に、ベクトル $\vec{y}_n$ を計算していくと、

$$\vec{y}_3 = \begin{pmatrix} 6.6 \\ 2.8 \end{pmatrix}, \vec{y}_4 = \begin{pmatrix} 13.0 \\ 6.0 \end{pmatrix}, \vec{y}_5 = \begin{pmatrix} 25.8 \\ 12.4 \end{pmatrix}, \dots$$

となる。この例では、ベクトルに行列Aを何回もかけることによって、 $\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 0.894 \\ 0.447 \end{pmatrix}$ の定数倍に収束していくようである。実は、適当なベクトルに実対称行列を多数回かけると、絶対値最大の固有値に対応する固有ベクトルに収束することが知られている。以下では、実対称行列のこのような性質を検討し、実対称行列Aの固有値、固有ベクトルのうち、絶対値最大の固有値と、その固有値に対応する固有ベクトルを求める方法を考える。

n 次の正方行列の固有値は、固有方程式が重解を持つ場合を除いて、n 個存在する。したがって、対応する固有ベクトルもn 個存在する。実対称行列であれば、固有ベクトルは互いに直交するので一次独立である。ゆえに、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 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 、対応する固有ベクトルを $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n$ 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、 $|\lambda_i| < |\lambda_1|$ だから、

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

ゆえに、

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

したがって、 $k \rightarrow \infty$ のとき、

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

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(power iteration)**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。

**課題3-1 : ①**任意の実対称行列に対して、べき乗法を用いて絶対値が最大である固有値に対応する固有ベクトルを計算するプログラムを作成せよ。固有ベクトルを計算するプログラムはPOWMAX という名前のサブルーチン (Cの場合はpowmax という名前の関数) として作成せよ。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。主プログラム中ではnの値は固定でよいが、サブルーチン (関数) は任意のnに対して適用可能なもの (nの値を変更しても内部を書き替えなくてよいもの) にせよ (②も同様)。反復の回数は十分に大きな値 (たとえば1000回) を固定値として与えればよい。

**②**任意の正則な実対称行列に対して、逆行列を計算し、さらにべき乗法を適用することによって、絶対値が最小である固有値に対応する固有ベクトルを計算するプログラムを作成せよ。固有ベクトルを計算するプログラムはPOWMIN という名前のサブルーチン (Cの場合はpowmin という名前の関数) として作成せよ。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。また、これまでに作成したサブルーチン (関数) (逆行列を計算するプログラムや、①で作成したプログラム) を活用することが望ましい。

**③**作成したプログラムを用いて、以下の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、および絶対値が最小の固有値と対応する固有ベクトルを求めよ。

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

固有ベクトルは、①、②で作成したサブルーチン (関数) を用いて計算せよ。固有値は、サブルーチン (関数) の中で計算する必要はなく、主プログラムの中で計算してよい。計

算に用いたプログラム (①で作成したサブルーチンまたは関数を使って③を解いたもの (prog03\_1\_1.f または prog03\_1\_1.c) と②で作成したサブルーチンまたは関数を使って③を解いたもの (prog03\_1\_2.f または prog03\_1\_2.c)) と、③で得られた固有値、固有ベクトルを記したテキストファイル (answer03\_1.txt) を提出せよ。

### 3. 5 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**(orthogonal basis) 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、任意の正則な正方行列  $A = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_n)$  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る。はじめに、2 次の正則な正方行列  $A = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$  を例にして、正規直交基底を求める方法を考えよう。

1)  $\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \end{pmatrix}$  を規格化して、 $\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$  が得られる。

2-1)  $\vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$  のうち、 $\begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$  と平行な成分の大きさを求める。

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \end{pmatrix} = \sqrt{2}$$

2-2) 平行な成分を差し引く。

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix} - \sqrt{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

2-3)  $\begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$  を規格化して、 $\vec{x}_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$  が得られる。

このようにして得られた  $Q = (\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -\sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}$  は直交行列である。

次に、一般に、 $n$  次の正則な正方行列  $A = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_n)$  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。

$$\vec{x}_1 = \frac{\vec{a}_1}{|\vec{a}_1|}$$

$$\vec{x}_2 = \frac{\vec{a}_2 - (\vec{a}_2 \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1}{|\vec{a}_2 - (\vec{a}_2 \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1|}$$

$$\vec{x}_3 = \frac{\vec{a}_3 - (\vec{a}_3 \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1 - (\vec{a}_3 \cdot \vec{x}_2)\vec{x}_2}{|\vec{a}_3 - (\vec{a}_3 \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1 - (\vec{a}_3 \cdot \vec{x}_2)\vec{x}_2|}$$

$$\vec{x}_n = \frac{\vec{a}_n - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1 - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_2)\vec{x}_2 - \cdots - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_{n-1})\vec{x}_{n-1}}{|\vec{a}_n - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_1)\vec{x}_1 - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_2)\vec{x}_2 - \cdots - (\vec{a}_n \cdot \vec{x}_{n-1})\vec{x}_{n-1}|}$$

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）（Gram-Schmidt orthogonalization）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なえ。

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

### 3. 6 QR分解

正則な正方行列 $A = (\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_n)$ 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、 $\vec{a}_i$ は*i*個のベクトル $\{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_i\}$ の線形結合になっている。したがって、

$$A = QR$$

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**(upper triangular matrix)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**(QR decomposition)という。任意の正則な正方行列は、符号を除いて一意にQR分解できる。

**問3.** 問2の行列(1)、(2)に対して、QR分解を行なえ。なお、上三角行列Rは $R = Q^{-1}A$ によって求められる。 $Q^{-1}$ を求めるときには、Qが直交行列であることに注意せよ。

### 3. 7 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。

$$\begin{aligned} A &= AE = P_1 R_1 \\ A P_1 &= P_2 R_2 \\ A P_2 &= P_3 R_3 \\ A P_3 &= P_4 R_4 \\ &\dots \end{aligned}$$

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。

$$\begin{aligned} A &= A E = P_1 R_1 \\ P_1^{-1} A P_1 &= P_1^{-1} P_2 R_2 \\ P_2^{-1} A P_2 &= P_2^{-1} P_3 R_3 \\ P_3^{-1} A P_3 &= P_3^{-1} P_4 R_4 \\ &\dots \end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned} Q_1 &= P_1 \\ Q_2 &= P_1^{-1} P_2 \\ Q_3 &= P_2^{-1} P_3 \\ Q_4 &= P_3^{-1} P_4 \\ &\dots \end{aligned}$$

と定義すると、 $Q_k$  は直交行列であって、

$$\begin{aligned} A &= Q_1 R_1 \\ Q_1^{-1} A Q_1 &= Q_2 R_2 \\ Q_2^{-1} Q_1^{-1} A Q_1 Q_2 &= Q_3 R_3 \\ Q_3^{-1} Q_2^{-1} Q_1^{-1} A Q_1 Q_2 Q_3 &= Q_4 R_4 \\ &\dots \end{aligned}$$

となる。一般には、

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

と書ける。両辺に左から  $Q_k^{-1}$ 、右から  $Q_k$  をかけると、

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

となる。下の式を上のに代入すると、

$$R_{k-1} Q_{k-1} = Q_k R_k$$

が得られる。具体的には、

$$\begin{aligned} A &= Q_1 R_1 \\ R_1 Q_1 &= Q_2 R_2 \\ R_2 Q_2 &= Q_3 R_3 \\ R_3 Q_3 &= Q_4 R_4 \\ &\dots \end{aligned}$$

である。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、 $Q_1 Q_2 Q_3 \dots Q_k$  は行列  $A$  の固有ベクトルの組  $\{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n\}$  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  $A$  の固有値の絶対値に収束する。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** (QR algorithm) という。



**課題 3-2 :** 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な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分解を行なうプログラムを作成せよ。Qを求めてからRを求めるのではなく、QとRはグラム・シュミットの直交化のときに同時に求められる。QR分解を行なうプログラムは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) として作ること。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。

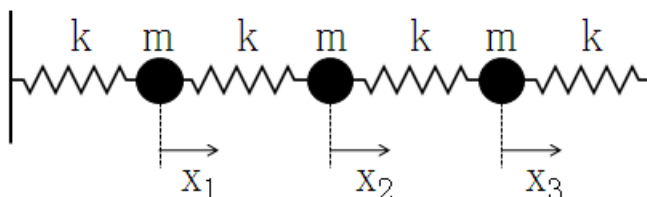
③さらに、②で作成したサブルーチン (関数) を用いて、任意の正則な実対称行列について、QR法を用いて固有値、固有ベクトルを計算するプログラムを作成せよ。固有値、固有ベクトルを計算するプログラムはEIGEN という名前のサブルーチン (Cの場合はeigen という名前の関数) として作ること。また検算を適宜行なうこと。

④作成したサブルーチン (関数) を用いて、以下の実対称行列の固有値、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\_2.f または prog03\_2.c) と、固有値、固有ベクトルを記したテキストファイル (answer03\_2.txt) を提出せよ。

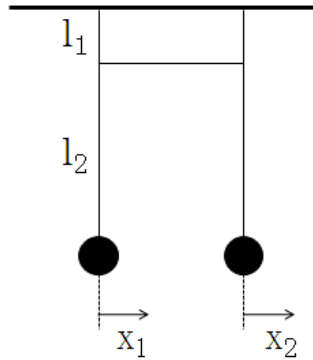
**課題 3-3 :** 図のようなバネ定数  $k$  のバネによってつながれた質量  $m$  のおもり 3 個について、運動方程式を書け。つぎに、課題 3-2 で作成したプログラムを用いて固有振動 (周期とパターン) をすべて求めよ。簡単のため  $k = 1$ 、 $m = 1$  としてよい。



結果を簡単なレポートとしてまとめ、PDF ファイル (report03\_3.pdf) で提出せよ。

### 応用例 1 :

糸の長さが  $l (= l_1 + l_2)$  である、2つの振り子を考える。2つの振り子は、上から  $l_1$  の場所で横糸によって結ばれている。このような振り子はどのような振動をするだろうか。



それぞれのおもりの変位を  $x_1$  と  $x_2$  すると、運動方程式は次のように書ける。

$$\begin{cases} \ddot{x}_1 = -g \frac{x_1 - x_0}{l_2} \\ \ddot{x}_2 = -g \frac{x_2 - x_0}{l_2} \end{cases}$$

さらに、横糸の変位を  $x_0$  とすると、横糸にはたらく力の和はゼロだから、

$$-2g \frac{x_0}{l_1} + g \frac{x_1 - x_0}{l_2} + g \frac{x_2 - x_0}{l_2} = 0$$

より、

$$x_0 = \frac{l_1}{l_1 + l_2} \frac{x_1 + x_2}{2}$$

となる。したがって、おもりに関する運動方程式は、

$$\begin{cases} \ddot{x}_1 = -g \frac{l_1 + 2l_2}{2l_2(l_1 + l_2)} x_1 + g \frac{l_1}{2l_2(l_1 + l_2)} x_2 \\ \ddot{x}_2 = g \frac{l_1}{2l_2(l_1 + l_2)} x_1 - g \frac{l_1 + 2l_2}{2l_2(l_1 + l_2)} x_2 \end{cases}$$

と書ける。簡単のため、重力加速度  $g$  と糸の全体の長さ  $l_1 + l_2$  を 1 として、

$$\begin{cases} \ddot{x}_1 = -\frac{1 + l_2}{2l_2} x_1 + \frac{1 - l_2}{2l_2} x_2 \\ \ddot{x}_2 = \frac{1 - l_2}{2l_2} x_1 - \frac{1 + l_2}{2l_2} x_2 \end{cases}$$

とする。ここで、調和振動を仮定して、

$$x_1 = \hat{x}_1 \sin \omega t, \quad x_2 = \hat{x}_2 \sin \omega t$$

とおくと、

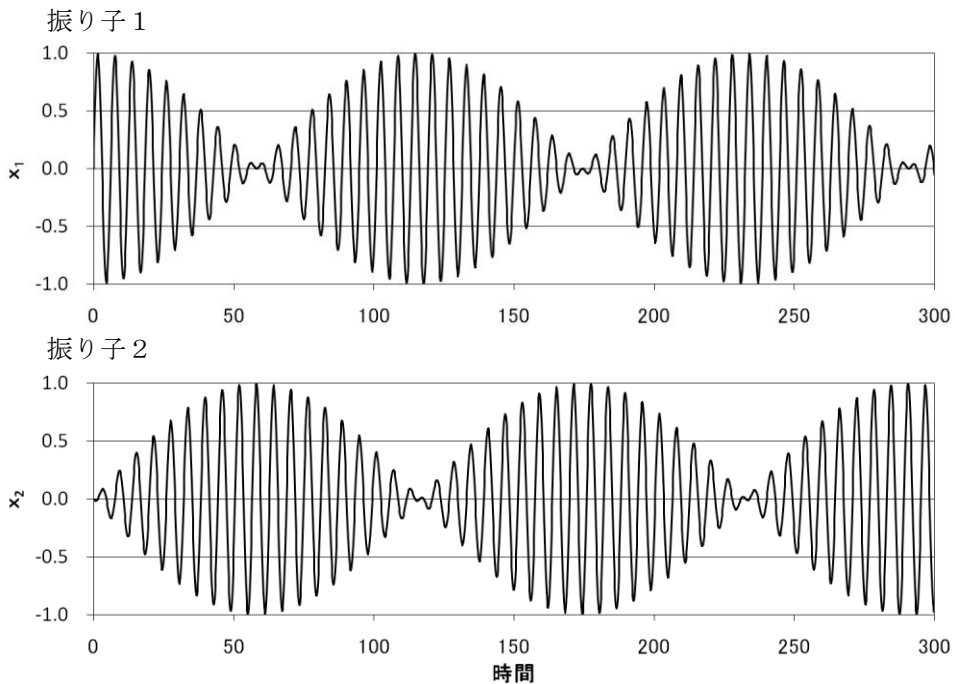
$$\begin{cases} -\omega^2 \hat{x}_1 = -\frac{1+l_2}{2l_2} \hat{x}_1 + \frac{1-l_2}{2l_2} \hat{x}_2 \\ -\omega^2 \hat{x}_2 = \frac{1-l_2}{2l_2} \hat{x}_1 - \frac{1+l_2}{2l_2} \hat{x}_2 \end{cases}$$

と書ける。さらに、この連立方程式は、ベクトルと行列を用いて、

$$\begin{pmatrix} \frac{1+l_2}{2l_2} & -\frac{1-l_2}{2l_2} \\ -\frac{1-l_2}{2l_2} & \frac{1+l_2}{2l_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix}$$

と書きかえることができる。ただし  $\lambda = \omega^2$  である。この方程式の解は、 $\lambda = 1$  に対して  $\begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ 、 $\lambda = 1/l_2$  に対して  $\begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$  である。前者はふたつのおもりが同じ運動をする場合、後者はふたつのおもりが逆の運動をする場合である。

たとえば、 $l_2 = 0.9$  であれば、角振動数が 1 の単振動と、角振動数が  $\sqrt{1/0.9} = 1.054$  の単振動が解として得られる。一般には、この 2 つの解の任意の重ね合わせが解になる。2 つの単振動の振幅が等しい場合には、次の図のような結果になる。



このように系に固有な振動パターンを求めるときには、固有値、固有ベクトルの計算が有効であることが多い。

## 応用例 2 :

客観解析データのような観測（解析）データから、もっとも主要な変動成分を検出するために行われる解析として、主成分分析（E O F 解析）とよばれる手法がある。

たとえば、時刻  $i$  における  $n$  番目の格子点での観測値（時間平均を差し引いた偏差）を  $x_n^i$  とする。ここで、ある時刻  $i$  における各格子点の  $x_n^i$  の値を縦に並べ、 $n$  個の成分を持つベクトル  $\vec{x}^i$  として表すことにする。このようなデータに関して、変動パターン  $a_n$  を定義し、同様にベクトル  $\vec{a}$  として表す。このとき、ベクトル  $\vec{a}$  とベクトル  $\vec{x}^i$  との内積は、

$$\vec{a} \cdot \vec{x}^i = \vec{a}^T \vec{x}^i = \vec{x}^{i T} \vec{a}$$

と書ける。このようにして得られた内積の絶対値が大きい場合には、時刻  $i$  に観測されたパターン  $x_n^i$  の中に、自分で定義した変動パターン  $a_n$  に対応する成分が多く含まれているといえる。

観測されたパターン  $x_n^i$  に  $a_n$  に対応する成分がどの程度含まれているか統計的に評価するため、内積の絶対値の 2 乗の時間平均値  $\langle |\vec{a}^T \vec{x}^i|^2 \rangle$  を求める。

$$\langle |\vec{a}^T \vec{x}^i|^2 \rangle = \langle \vec{a}^T \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \vec{a} \rangle = \vec{a}^T \langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a}$$

ここで、 $\langle \quad \rangle$  は時間平均（ $i$  個のデータの平均）を表している（ベクトルや行列の場合は各成分をそれぞれ時間平均する）。 $\langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle$  は  $n$  次の実対称行列であって、 $(m, n)$  成分は、地点  $m$  での偏差の時間変化と地点  $n$  での偏差の時間変化の共分散になっている。このような行列のことを分散共分散行列とよんでいる。

ここで、内積の絶対値の 2 乗の時間平均値  $\vec{a}^T \langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a}$  を最大にするようなベクトル  $\vec{a}$  を求めることを考える。 $\vec{a}^T \langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a}$  は、ベクトル  $\vec{a}$  とベクトル  $\langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a}$  との内積とみなすことができる。つまり、

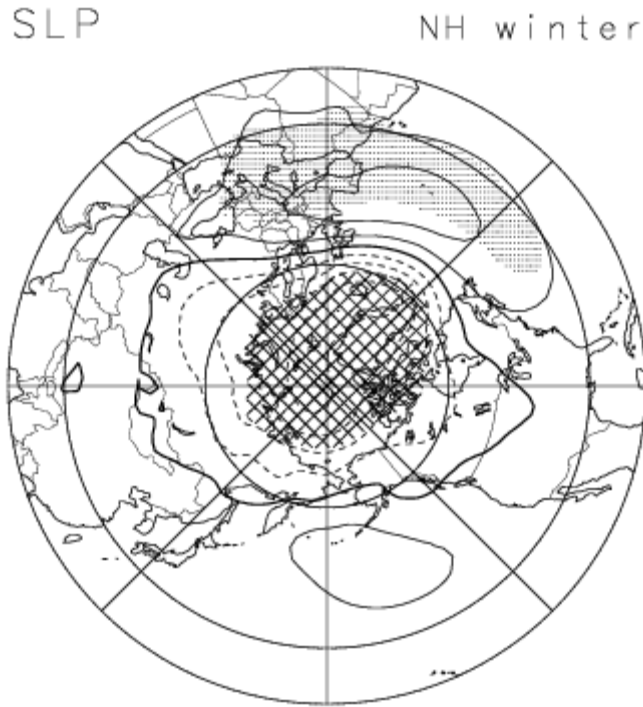
$$\vec{a}^T \langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a} = \vec{a} \cdot (\langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a})$$

である。内積とは、2 つのベクトルの大きさの積に、2 つのベクトルがなす角の余弦をかけたものである。したがって、ベクトル  $\langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a}$  の大きさが最大になったときに、仮に、ベクトル  $\langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a}$  がベクトル  $\vec{a}$  に平行であれば、そのとき、 $\vec{a}^T \langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a}$  は最大となる。実際、ベクトル  $\langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a}$  の大きさが最大になるのは、行列  $\langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle$  の最大固有値に対応する固有ベクトルをベクトル  $\vec{a}$  と定義した場合であり、このとき、ベクトル  $\langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle \vec{a}$  はベクトル  $\vec{a}$  に平行である。したがって、行列  $\langle \vec{x}^i \vec{x}^{i T} \rangle$  の最大固有値に対応する固有ベクトルをベクトル  $\vec{a}$  と定義すれば、観測されたパターン  $x_n^i$  には  $a_n$  に対応する成分が最も多く含まれるようになる。

同様に、 $k$  番目に大きい固有値に対応する固有ベクトルは、観測されたパターン  $x_n^i$  の中に  $k$  番目に多く含まれる変動パターンである。

下の図は冬季の北半球の月平均海面気圧偏差場の変動に関して主成分分析を行なったものである。最大固有値に対応する固有ベクトルが表す第 1 モードは図のようになる。これ

は、極域で気圧が低く、中緯度で気圧が高いパターンであり、北極振動とよばれる。なお、主成分分析によって得られる第1モードは結果的に最も大きく見えるパターンという意味であり、そのパターンの発生のしくみについては何も言及していない。一般には、第1モードはいくつかの要因の重ね合わせによって現れることがあり、解析結果の解釈には注意が必要である。実際に、北極振動のしくみについては、さまざまな議論がある。



(NCEP/NCAR の客観解析データより作成)

上の図に示したような偏差の場合には、正の北極振動といい、中緯度域に寒気が流出しにくいので、日本を含む中緯度域は暖冬になりやすいといわれている。

$A - \lambda E$ の次数を  $n$  とする。 $\det(A - \lambda E) = 0$ だから、 $A - \lambda E$ は正則ではない。ゆえに、 $A - \lambda E$ の階数は  $n$  よりも小さい。したがって、基本行列の積として表せる行列  $P$ 、 $Q$  を用いて、

$$P(A - \lambda E)Q = X$$

と変形できる。ただし、 $X$ は対角成分以外はすべてゼロ、対角成分は  $r$  番目 ( $r < n$ ) まで  $1$ 、それ以降は  $0$  である。両辺に右からベクトル

$\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  をかけると、

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

と変形できる。ただし、 $\vec{q}$ は行列  $Q$ の最終列からなるベクトルである。両辺に左から行列  $P^{-1}$  をかけると、

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

となって、

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

が得られる。したがって、 $\lambda$ は行列  $A$ の固有値である。