3 重対角行列の固有値問題

2001MM089 寺沢 直之
指導教員　鳥居 達生

1　はじめに

対称行列は直交変換によって相似な 3 重対角行列になる。3 重対角行列の固有値を求めるために、スツルムの定理に基づく 2 分法を採用し固有値、またそれぞれの固有値に対する固有ベクトルを計算する。またそれについてプログラミングを作成し、数値実験を行う。

2　3 重対角行列の固有値

2.1　固有値の特性方程式

まず対称な 3 重対角行列を

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \ddots & & \vdots \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix} \tag{1}$$

とする。

ここで、副対角要素 β_i はすべて 0 ではないとする。このとき行列 $|\lambda I - A|$ の第 k 番目の主小行列式 $p_k(\lambda)$ は次のように与えられる。

$$p_k(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda-\alpha_1 & -\beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ -\beta_1 & \lambda-\alpha_2 & \ddots & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & -\beta_{k-1} \\ 0 & \cdots & 0 & -\beta_{k-1} & \lambda-\alpha_k \end{vmatrix}$$

これを最後の行について展開すると $p_k(\lambda)$ に関する漸化式

$$p_k(\lambda) = (\lambda-\alpha_k)p_{k-1}(\lambda) - \beta_{k-1}^2 p_{k-2}(\lambda) \tag{2}$$

が得られる。

また

$$p_1(\lambda) = \lambda - \alpha_1$$

は明らかである。

ここで $k = 2$ のときも上の漸化式が成立するように便宜的に

$$p_0(\lambda) = 1$$

と定義しておく。

$k = n$ のとき

$$p_n(\lambda) = |\lambda I - A| \tag{3}$$

となり、これが A の特性多項式であり、この n 次多項式の零点が固有値になる。

3　スツルム列

3.1　スツルム列の定義

実係数多項式 $f_n(x)$ と区間 $[a, b]$ が与えられ、次の四つの条件を満たす多項式の列

$$f_n(x), f_{n-1}(x), f_{n-2}(x), \cdots, f_0(x) \tag{4}$$

は区間 $[a, b]$ においてスツルム列をなすという。

(1)　区間内のすべての点 x に対して、隣り合う二つの多項式 $f_k(x)$ と $f_{k+1}(x)$ は同時には 0 にならない。
(2)　区間内のある点 x_0 で $f_k(x_0) = 0$ であるなら $f_{k-1}(x_0)f_{k+1}(x_0) < 0$ である。
(3)　列の最後の多項式 $f_0(x)$ は区間内において一定の符号をもつ。
(4)　ある点 x_0 で $f_n(x_0) = 0$ であるならば $f'_n(x_0)f_{n-1}(x_0) > 0$ である。

3.2　スツルムの定理

スツルム列について、次の定理が成り立つ [1]。

多項式の列 $f_n(x), f_{n-1}(x), f_{n-2}(x), \cdots, f_0(x)$ は区間 $[a, b]$ でスツルム列をなし、$f_n(a)f_n(b) \neq 0$ であるとする。このとき、x を固定して関数値の列 $f_n(x), f_{n-1}(x), f_{n-2}(x), \cdots, f_0(x)$ を左から右に見ていったときの符号の変化回数を $N(x)$ とすると、多項式 $f_n(x)$ の区間 $[a, b]$ 内に存在する零点の個数 n_0 は次の式で与えられる。

$$n_0 = N(a) - N(b) \tag{5}$$

4　行列の固有値の存在範囲

4.1　固有値の個数

多項式列 $\{p_n(\lambda), p_{n-1}(\lambda), \cdots, p_1(\lambda), p_0(\lambda)\}$ はスツルム列の四つの条件を満たしているため、実軸上の閉区間においてスツルム列をなしている。

したがってスツルムの定理より次のことが言える。

区間 $[a, b]$ が与えられて $p_n(a) \neq 0$,$p_n(b) \neq 0$ とする。このとき λ を固定した列 $p_n(\lambda), p_{n-1}(\lambda), \cdots, p_1(\lambda), p_0(\lambda)$ における符号の変化回数を $N(\lambda)$ とすると、この区間に

含まれる $p_n(\lambda)=0$ の実根の数、すなわち行列 A の固有値の数 n_0 は

$$n_0 = N(a) - N(b) \tag{6}$$

で与えられる。

4.2 固有値の上限、下限

固有値の存在範囲を定めるためにまず行列 A の 1 ーノルムを次のように定義する。

$$||A||_1 = \max_{1\le k\le n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ik}| \tag{7}$$

これによりすべての固有値の存在範囲を

$$-||A||_1 \le \lambda \le ||A||_1 \tag{8}$$

と定める [2]。

5 2 分法

n 個の個有値をすべて求める 2 分法を示す。
固有値を小さい順に並べて

$$\lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_n$$

とし、それぞれの上限、下限を u_j, l_j で表す。
これらの初期値として、行列 A の 1 ーノルム

$$l_j = -||A||_1, u_j = ||A||_1$$

でとる。
スツルムの定理により $[-||A||_1, x)$ に存在する固有値の個数 $\nu(x)$ を用いて、固有値の存在範囲を狭める。
各 λ_k に対し

$$l_k \le \lambda_k < u_k,$$

$$l_j \le l_{j+1}, \quad u_j \le u_{j+1}, \qquad j = 1, 2, \cdots, n-1$$

が与えられたとする。
(l_k, u_k) の中点 x_k において $\nu(x_k) = \nu_k$ を求める。
$1 \le j \le \nu_k$ において $u_j > x_k$ を満たす u_j に関してだけ

$$u_j \to x_k$$

$\nu_k + 1 \le j \le n$ において $l_j < x_k$ を満たす l_j に関してだけ

$$l_j \to x_k$$

とする。
所要の精度 $\epsilon > 0$ を与えて $u_k - l_k < \epsilon$ となるまで (l_k, u_k) に対して 2 分法を繰り返せば $(l_k + u_k)/2$ が λ_k の近似値となる。
また k を 1 から n まで動かせば、すべての固有値の近似値が求まる。

6 固有ベクトルの計算法

3 重対角行列 (1) について $(A - \lambda I)x = 0$ を展開した連立方程式から得られる漸化式

$$x_{i+1} = -\frac{\beta_{i-1}x_{i-1} + (\alpha_i - \lambda)x_i}{\beta_i}, \quad i = 1, 2, \cdots, n-1 \tag{9}$$

を各固有値に適用する。ただし $x_0 = 0,\ x_1 = 1.$

7 数値実験

主対角要素を d、副対角要素を 1 とした 1000 次の 3 重対角行列の固有値の計算結果を示す。倍精度演算を用いた。

固有値	$d=0$ の結果
λ_1	-1.999990
λ_2	-1.999912
λ_3	-1.999843
$\vdots$	$\vdots$
λ_{998}	1.999912
λ_{999}	1.999961
λ_{1000}	1.999991

固有値	$d=2$ の結果
λ_1	0.000010
λ_2	0.000040
λ_3	0.000088
$\vdots$	$\vdots$
λ_{998}	3.999912
λ_{999}	3.999960
λ_{1000}	3.999990

$d=0$ のときの固有ベクトル

$$x[\lambda_1] = \begin{pmatrix} 1.000000 \\ -1.999990 \\ 2.999960 \\ \vdots \\ -6.236284 \\ 7.236093 \\ -8.235828 \end{pmatrix} \quad x[\lambda_{1000}] = \begin{pmatrix} 1.000000 \\ 1.999990 \\ 2.999960 \\ \vdots \\ -6.236284 \\ -7.236093 \\ -8.235828 \end{pmatrix}$$

$d=2$ のときの固有ベクトル

$$x[\lambda_1] = \begin{pmatrix} 1.000000 \\ -1.999990 \\ 2.999960 \\ \vdots \\ -6.215086 \\ 7.214861 \\ -8.214564 \end{pmatrix} \quad x[\lambda_{1000}] = \begin{pmatrix} 1.000000 \\ 1.999990 \\ 2.999960 \\ \vdots \\ -6.215086 \\ -7.214861 \\ -8.214564 \end{pmatrix}$$

この問題において d が 2 より大きくなるとともに、漸化式 (2) の計算が数値的に不安定になり、スツルム列の符号判定を間違うことがある。

8 おわりに

以上によりスツルムの方法を用いることによって 3 重対角行列の固有値、固有ベクトルを求めることができた。しかし、それぞれの固有値に対して二分法と割線法を併用するなど収束を速めることは課題として残っている。

参考文献

[1] 森正武：数値解析, 共立出版株式会社 (1973)
[2] 杉浦洋：数値計算の基礎と応用, サイエンス社 (1997)