プログラム演習
(7) べき乗法を用いた行列の固有値と固有ベクトルの計算

まず始めに、行列の固有値と固有ベクトルについて復習しよう。
行列 $\mathbf{A}$ を考えたとき、以下の式が成り立つものとする。

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \tag{1}$$

ここで、$\mathbf{x}$ はベクトルである。この式は、ベクトル $\mathbf{x}$ に対し、着目している行列を作用させたときに得られるベクトルが元のベクトルの定数倍になっていることを意味している。この式における λ が行列 $\mathbf{A}$ の**固有値**であり、$\mathbf{x}$ がそれに対応する**固有ベクトル**である。

なお、式 (1) を満足する λ と $\mathbf{x}$ のセットは、基本的には複数存在するため、一般的には以下のように記述する。

$$\mathbf{A}\mathbf{x}_i = \lambda_i\mathbf{x}_i \tag{2}$$

$(\lambda_i, \mathbf{x}_i)$ のセットを「i 番目の固有値と固有ベクトルのセット」というような言い方もする。

固有値と固有関数の求め方としては、以下の方法が挙げられる。式 (2) は以下のように変形される。

$$\left(\mathbf{A} - \lambda_i\mathbf{I}\right)\mathbf{x}_i\mathbf{0} \tag{3}$$

$\mathbf{I}$ は単位行列である。ここで、仮に行列 $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}$ に逆行列 $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^{-1}$ が存在する場合、それを両辺の左から作用させることで以下の式を得る。

$$\left(\mathbf{A} - \lambda_i\mathbf{I}\right)^{-1}\left(\mathbf{A} - \lambda_i\mathbf{I}\right)\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i = \mathbf{0} \tag{4}$$

行列 $\mathbf{A}$ の固有ベクトルとしてゼロベクトルが得られるのは**自明**（trivial）であり、我々はこのような自明な解を得たいわけではない。自明でない解を得るための条件は、行列 $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}$ に逆行列が存在しないことであり、それはこの行列の行列式がゼロとなることと同義である。従って、この行列式がゼロとなるような λ を求めるという問題に帰結する。

行列式は、2×2 の行列では容易に求めることができ、3×3 の行列ではある程度頑張れば求めることが出来る。ここでは 2×2 の行列を考えよう。このとき、式 (3) は以下のように書ける。

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} - \lambda_i & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} - \lambda_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{i,1} \\ x_{i,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

この左辺の行列式がゼロとなる条件として以下が得られる。

$$\left(a_{1,1} - \lambda_i\right)\left(a_{2,2} - \lambda_i\right) - a_{1,2}a_{2,1} = 0 \tag{6}$$

この式は λ_i についての二次方程式であるので、基本的には λ_i として 2 つの解が得られる。なお、仮に解が重根となる場合は、固有値が**縮退**（degeneracy）している、と言う。

ではここで、例として以下の行列の固有値と固有ベクトルを求めよう。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -4 \\ -3 & 5 \end{pmatrix} \tag{7}$$

この行列に対応する式 (6) 相当のものとして以下が得られる。

$$\left(1 - \lambda_i\right)\left(5 - \lambda_i\right) - 12 = \lambda_i^2 - 6\lambda_i - 7 = 0 \tag{8}$$

従って、固有値として 7 と-1 が容易に得られる。ここで、λ_1=7、λ_2=-1 として、それぞれの固有ベクトルを求めよう。まずは λ_1 に対応する固有ベクトル $\mathbf{x}_1$ であるが、式 (5) に λ_1 を代入することで以下が得られる。

$$\begin{pmatrix} -6 & -4 \\ -3 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1,1} \\ x_{1,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{9}$$

これより以下の２本の式が得られる。

$$-6x_{1,1} - 4x_{1,2} = 0, \tag{10}$$
$$-3x_{1,1} - 2x_{1,2} = 0 \tag{11}$$

この２本の式は同一であり、以下の関係式として整理できる。

$$x_{1,2} = (-3/2)x_{1,1} \tag{12}$$

つまり、λ_1 に対応する固有ベクトル $\mathbf{x}_1$ は

$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} x_{1,1} \\ (-3/2)x_{1,1} \end{pmatrix} = x_{1,1} \begin{pmatrix} 1 \\ -3/2 \end{pmatrix} \tag{13}$$

と書ける。定数 $x_{1,1}$ が乗ぜられる形になっているのは、式 (2) から明らかなように、固有ベクトルはその大きさが任意であるからである。固有ベクトルを一意的に決めるために、そのノルム [1] が 1.0 となるようにするのが一般的であり、このような操作を**正規化**と呼ぶ。

問題１：上で例として挙げた行列 $\mathbf{A}$ について、λ_2 に対応する固有ベクトルを求めよ。

サイズの小さい行列の固有値は上で述べたような方法で求めることが出来るが、サイズが大きくなった場合には困難である。固有値のうち、もっとも絶対値が大きいものを数値的に計算する方法として**べき乗法**（Power iteration）というものがある。ここではこのべき乗法を適用してみよう。

はじめに、固有ベクトルと大きさが一致する適当なベクトルを考える。ここでは $\mathbf{f}^{(0)}$ としよう。肩添字は反復回数に対応する（初期値だからゼロ）。そして、以下の式で記述される反復計算を行う [2]。

$$\mathbf{f}^{(l)} = \mathbf{A}\mathbf{f}^{(l-1)} \tag{14}$$

これを繰り返すことで、$\mathbf{f}^{(l)}$ は求めようとしている固有ベクトルに収束していく。また、固有値は $\mathbf{f}^{(l+1)}$ と $\mathbf{f}^{(l)}$ のノルムの比として推定される（従って、固有ベクトルは固有値の大きさだけ反復に伴って大きくなっていくことに注意が必要である）。

問題２：上で例として挙げた行列 $\mathbf{A}$ について、λ_1 とそれに対応する固有ベクトルをべき乗法により求め、解析解と一致することを確かめよ。

べき乗法によって絶対値が最大の固有値とそれに対応する固有ベクトルが求まる理由については、後々学んでもらうことになるだろう。

[1] この場合は、$x_{i,1}^2 + x_{i,2}^2$。

[2] 初期値として仮定したベクトル $\mathbf{f}^{(0)}$ に対して、最初の反復回では $\mathbf{A}\mathbf{f}^{(0)}$ を計算し、これを $\mathbf{f}^{(1)}$ とする。次の反復回では $\mathbf{A}\mathbf{f}^{(1)}$ を計算し、これを $\mathbf{f}^{(2)}$ とする。この手続きを繰り返して行う。