

行列の対角化

固有値と固有ベクトル

行列の対角化

行列 A に対して

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

を満たす

ベクトル \vec{x} (固有ベクトル) と

値 λ (固有値) と

の組を求める.

- ・ 時間に依存しないシュレディンガー方程式
- ・ 導波管や光ファイバー内の電磁波 (マイクロ波) や光
- ・ 制御系 (力学系) の固有振動

固有値方程式型微分方程式

$$Lu = \lambda u$$

$$u = c_0\varphi_0 + c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + \dots = \sum_n c_n\varphi_n$$

$$\sum_n c_n L\varphi_n = \lambda \sum_n c_n\varphi_n \quad (\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{m,n})$$

$$\sum_n \langle\varphi_m|L|\varphi_n\rangle c_n = \lambda c_m$$

行列の固有値方程式

$$\begin{pmatrix} \langle\varphi_0|L|\varphi_0\rangle & \langle\varphi_0|L|\varphi_1\rangle & \dots \\ \langle\varphi_1|L|\varphi_0\rangle & \langle\varphi_1|L|\varphi_1\rangle & \dots \\ \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

例題

$$\begin{bmatrix} -(K_1 + K_2) & K_2 \\ K_2 & -K_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -\omega^2 \begin{bmatrix} M_1 & 0 \\ 0 & M_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$M_1 = M_2 = m$ のとき

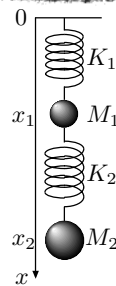
$$\begin{bmatrix} -(K_1 + K_2) & K_2 \\ K_2 & -K_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -m\omega^2 \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} -(K_1 + K_2) & K_2 \\ K_2 & -K_2 \end{bmatrix} \quad \vec{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

$\lambda = -m\omega^2$ とおけば

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

例題



$$\begin{cases} -K_1x_1 + (x_2 - x_1)K_2 = M_1 \frac{d^2x_1}{dt^2} \\ -(x_2 - x_1)K_2 = M_2 \frac{d^2x_2}{dt^2} \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 = A_1 \sin \omega t \\ x_2 = A_2 \sin \omega t \end{cases}$$

$$\begin{cases} -K_1x_1 + (x_2 - x_1)K_2 = -M_1\omega^2x_1 \\ -(x_2 - x_1)K_2 = -M_2\omega^2x_2 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} -(K_1 + K_2) & K_2 \\ K_2 & -K_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -\omega^2 \begin{bmatrix} M_1 & 0 \\ 0 & M_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

例題

$$\begin{bmatrix} -(K_1 + K_2) & K_2 \\ K_2 & -K_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = -\omega^2 \begin{bmatrix} M_1 & 0 \\ 0 & M_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

一般に $A\vec{x} = \lambda S\vec{x}$ のとき

$$S = C^2 \quad (C = S^{\frac{1}{2}})$$

$$A\vec{x} = \lambda C^2\vec{x}$$

$$C^{-1}A\vec{x} = C^{-1}\lambda C^2\vec{x}$$

$$C^{-1}AC^{-1}C\vec{x} = \lambda C\vec{x}$$

$$\vec{y} \equiv C\vec{x} \quad B \equiv C^{-1}AC^{-1} \text{ とおけば } B\vec{y} = \lambda\vec{y}$$

相似変換

$A\vec{x} = \lambda\vec{x}$ のとき

$$U^{-1}A\vec{x} = U^{-1}\lambda\vec{x}$$

$$U^{-1}AUU^{-1}\vec{x} = \lambda U^{-1}\vec{x}$$

$$B \equiv U^{-1}AU$$

$\vec{y} \equiv U^{-1}\vec{x}$ とおくと

$$B\vec{y} = \lambda\vec{y}$$

A と $U^{-1}AU$ は同じ固有値をもつ

相似変換

$A\vec{u}_k = \lambda_k\vec{u}_k$ のとき $U = (\vec{u}_0, \vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots)$ とおくと

$$AU = (\lambda_0\vec{u}_0, \lambda_1\vec{u}_1, \lambda_2\vec{u}_2, \dots)$$

$$= U \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \lambda_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$U^{-1}AU = \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \lambda_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

行列の対角化

$$U^{-1}AU = \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \lambda_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

を満たす U をみつけて $\{\lambda_k\}$ を求める

$U = (\vec{u}_0, \vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots)$ より

$A\vec{u}_k = \lambda_k\vec{u}_k$ を満たす $\{\vec{u}_k\}$ が求まる

Jacobi法

A が対称行列であるとき

U は直交行列にとることができる

直交行列の逆行列はその転置行列である ($U^{-1} = {}^tU$)

$$U^{-1}AU = \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \lambda_2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = {}^tU AU = D$$

Jacobi法

R_k を A の、ある非対角成分を零にする直交変換とする

$$A_1 = {}^tR_1 A R_1 \quad (1\text{つの非対角成分が}0\text{になる})$$

$$A_2 = {}^tR_2 ({}^tR_1 A R_1) R_2 \quad (\text{別の非対角成分が}0\text{になる})$$

\vdots

$$A_n = {}^tR_n ({}^tR_{n-1} \dots {}^tR_3 ({}^tR_2 ({}^tR_1 A R_1) R_2) R_3 \dots R_{n-1}) R_n$$

$$A_n = ({}^tR_n {}^tR_{n-1} \dots {}^tR_3 {}^tR_2 {}^tR_1) A (R_1 R_2 R_3 \dots R_{n-1} R_n)$$

$$= ({}^tR_1 R_2 R_3 \dots R_{n-1} R_n) A (R_1 R_2 R_3 \dots R_{n-1} R_n)$$

$$A_n \longrightarrow D \quad (n \rightarrow \infty)$$

$$R_1 R_2 R_3 \dots R_{n-1} R_n \longrightarrow U \quad (n \rightarrow \infty)$$

(p,q)成分を零にする直交変換行列

$$R_{p,q} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

p 列 q 列

Jacobi法

$$B = {}^t R_{p,q} A R_{p,q}$$

$$B(p,p) = A(p,p) \cos^2 \theta - 2A(p,q) \cos \theta \sin \theta + A(q,q) \sin^2 \theta$$

$$B(p,q) = (A(p,p) - A(q,q)) \cos \theta \sin \theta + A(p,q)(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)$$

$$B(q,p) = B(p,q)$$

$$B(q,q) = A(p,p) \sin^2 \theta + 2A(p,q) \cos \theta \sin \theta + A(q,q) \cos^2 \theta$$

$$B(p,j) = A(p,j) \cos \theta - A(q,j) \sin \theta \quad (j \neq p, q)$$

$$B(q,j) = A(p,j) \sin \theta + A(q,j) \cos \theta \quad (j \neq p, q)$$

$$B(i,p) = A(i,p) \cos \theta - A(i,q) \sin \theta \quad (i \neq p, q)$$

$$B(i,q) = A(i,p) \sin \theta + A(i,q) \cos \theta \quad (i \neq p, q)$$

Jacobi法

$$B(p,q) = \frac{1}{2} (A(p,p) - A(q,q)) \sin 2\theta + A(p,q) \cos 2\theta = 0$$

$$\begin{cases} \sin \theta = \sqrt{\frac{1-\gamma}{2}} \operatorname{sign}(\alpha\beta) \\ \cos \theta = \sqrt{1-\sin^2 \theta} \end{cases} \begin{cases} \alpha = -A(p,q) \\ \beta = \frac{1}{2} (A(p,p) - A(q,q)) \\ \gamma = \frac{|\beta|}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \end{cases}$$

A_k の（絶対値の）最大非対角成分 $A(p,q)$ を零にする直交変換行列 R_k に対して

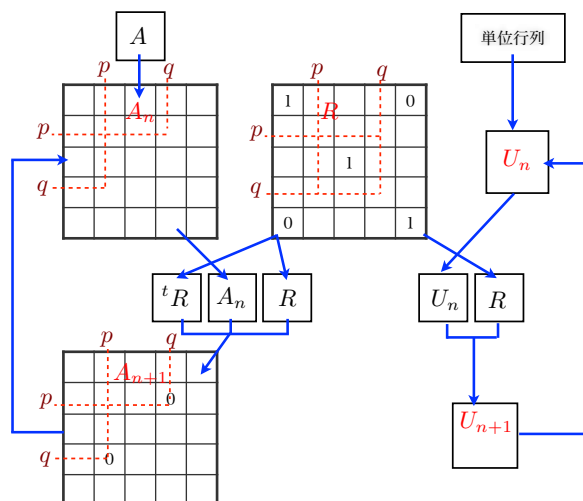
$$A_{k+1} = {}^t R_k A_k R_k$$

Jacobi法

$$U_k = U_{k-1} R_k \quad U_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

$$U_k(i,p) = U_{k-1}(i,p) \cos \theta - U_{k-1}(i,q) \sin \theta \quad (i = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

$$U_k(i,q) = U_{k-1}(i,q) \cos \theta + U_{k-1}(i,p) \sin \theta \quad (i = 0, 1, 2, 3, \dots)$$



冪乗法

$$A = U \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1}$$

$$A^2 = U \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1} U \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1} = U \begin{pmatrix} \lambda_0^2 & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1}$$

$$A^3 = U \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1} U \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1} U \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1} = U \begin{pmatrix} \lambda_0^3 & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1}$$

$$A^n = U \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1} \cdots U \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1} = U \begin{pmatrix} \lambda_0^n & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} U^{-1}$$

冪乗法

$$A^n U = U \begin{pmatrix} \lambda_0^n & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_1^n & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_{N-1}^n \end{pmatrix} = \lambda_0^n U \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & (\lambda_1/\lambda_0)^n & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & (\lambda_{N-1}/\lambda_0)^n \end{pmatrix}$$

$$|\lambda_0| > |\lambda_1| > \cdots > |\lambda_{N-1}| \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\lambda_k}{\lambda_0} = 0 \quad (k \neq 0)$$

$$A^n U = U \begin{pmatrix} \lambda_0^n & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_1^n & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_{N-1}^n \end{pmatrix} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} U \begin{pmatrix} \lambda_0^n & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

冪乗法

$$\begin{aligned} \vec{x}^{(0)} &= c_0 \vec{u}_0 + c_1 \vec{u}_1 + c_2 \vec{u}_2 + \dots \\ A \vec{x}^{(0)} &= c_0 A \vec{u}_0 + c_1 A \vec{u}_1 + c_2 A \vec{u}_2 + \dots \\ &= c_0 \lambda_0 \vec{u}_0 + c_1 \lambda_1 \vec{u}_1 + c_2 \lambda_2 \vec{u}_2 + \dots \\ A^2 \vec{x}^{(0)} &= c_0 \lambda_0^2 \vec{u}_0 + c_1 \lambda_1^2 \vec{u}_1 + c_2 \lambda_2^2 \vec{u}_2 + \dots \\ &\vdots \\ A^n \vec{x}^{(0)} &= c_0 \lambda_0^n \vec{u}_0 + c_1 \lambda_1^n \vec{u}_1 + c_2 \lambda_2^n \vec{u}_2 + \dots \\ &= \lambda_0^n (c_0 \vec{u}_0 + c_1 (\lambda_1/\lambda_0)^n \vec{u}_1 + \dots) \\ &\rightarrow \lambda_0^n c_0 \vec{u}_0 \quad (n \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad \left(\begin{array}{l} \|\vec{u}_0\| = 1 \\ \|\vec{u}_1\| = 1 \\ \|\vec{u}_2\| = 1 \\ \vdots \end{array} \right)$$

冪乗法

$$\begin{aligned} A^n \vec{x}^{(0)} &\rightarrow \lambda_0^n c_0 \vec{u}_0 \quad (n \rightarrow \infty) \\ \vec{x}^{(n+1)} &= \frac{1}{\|A \vec{x}^{(n)}\|} A \vec{x}^{(n)} \quad \left(\|\vec{x}^{(n+1)}\| = \frac{1}{\|A \vec{x}^{(n)}\|} \|A \vec{x}^{(n)}\| = 1 \right) \\ \vec{x}^{(n)} &\propto A^n \vec{x}^{(0)} \rightarrow \lambda_0^n c_0 \vec{u}_0 \quad (n \rightarrow \infty) \\ \vec{x}^{(n)} &\rightarrow \vec{u}_0 \quad (n \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

冪乗法

$$\begin{aligned} \vec{x}^{(n+1)} &= \frac{1}{\|A \vec{x}^{(n)}\|} A \vec{x}^{(n)} \\ \vec{x}^{(n)} &\rightarrow \vec{u}_0 \quad (n \rightarrow \infty) \\ \|A \vec{x}^{(n)}\| &\rightarrow \|A \vec{u}_0\| = \|\lambda_0 \vec{u}_0\| = \lambda_0 \|\vec{u}_0\| = \lambda_0 \\ \|A \vec{x}^{(n)}\| &\rightarrow \lambda_0 \quad (n \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

冪乗法

$$\begin{aligned} \vec{x}^{(0)} &= c_0 \vec{u}_0 + c_1 \vec{u}_1 + c_2 \vec{u}_2 + \dots \\ \vec{x}^{(0)} \cdot \vec{u}_0 &= c_0 \vec{u}_0 \cdot \vec{u}_0 + c_1 \vec{u}_1 \cdot \vec{u}_0 + c_2 \vec{u}_2 \cdot \vec{u}_0 + \dots = c_0 \\ \vec{x}^{(0)} - (\vec{x}^{(0)} \cdot \vec{u}_0) \vec{u}_0 &= c_1 \vec{u}_1 + c_2 \vec{u}_2 + \dots \equiv \vec{x}_1^{(0)} \\ A \vec{x}_1^{(0)} &= c_1 A \vec{u}_1 + c_2 A \vec{u}_2 + \dots \\ &= c_1 \lambda_1 \vec{u}_1 + c_2 \lambda_2 \vec{u}_2 + \dots \\ A^n \vec{x}_1^{(0)} &\rightarrow c_1 \lambda_1^n \vec{u}_1 \quad (n \rightarrow \infty) \end{aligned} \quad \text{Gram-Schmidtの直交化法}$$

冪乗法

$$\begin{aligned} \vec{x}_0^{(0)} &= \text{乱数など} \\ k &= 0, 1, 2, \dots \\ \vec{x}_k^{(n+1)} &= \frac{1}{\|A \vec{x}_k^{(n)}\|} A \vec{x}_k^{(n)} \\ \|A \vec{x}_k^{(n)}\| &\rightarrow \lambda_k \\ \vec{x}_k^{(n)} &\rightarrow \vec{u}_k \\ \vec{x}_{k+1}^{(0)} &= \vec{x}_k^{(0)} - (\vec{x}_k^{(0)} \cdot \vec{u}_k) \vec{u}_k \end{aligned}$$

行列の対角化法

- ヤコビ法
 - 実対称行列
 - 電気電子工学のほとんどの問題が対応
 - 全ての固有値・固有ベクトル
- 冪乗法
 - 最大固有値のみ
 - グラム・シュミットの直交化法
 - 必要な個数の固有値・固有ベクトル
 - 量子力学、統計力学の問題が対応