

固有値解法の一工夫について

駒 沢 勉

(1964年12月受付)

A Revised Method for Computing Eigenvalues and Eigenvectors of a Real Matrix

Tsutomu KOMAZAWA

In this report, we show the application of rotation method for finding eigenvalues and eigenvectors of a real matrix on linear computation which is, mainly, related to the computation of quantifying method and factor analysis. And, the results of numerical calculation are obtained by using an electric digital computer TSK III in the Institute of Statistical Mathematics.

Institute of Statistical Mathematics

はじめに

この報告では、数量化の計算に関連した線型計算のうち、行列の固有値、固有ベクトルの解法を統計数理研究に37年設置された電子計算機 TSK III を利用し、効果をあげている数値計算法をのべる。この数値計算法は、実対称行列 A があるとき、ある $U^T A U = A$ (対角行列) となる直交行列 U が存在することを利用する。そのとき A の対角要素が A の固有値、 U の列ベクトルが固有ベクトルを表わす。しかし、実際問題としてそのような直交行列を見出す数値計算法が問題となる。C. G. J. Jacobi⁽¹⁾ は非対角線の要素を順次0にするような直交変換を表わす行列の無限系列を作り、それら行列の積の極限として直交行列 U を求める方法を考え出した。ここに、C. G. J. Jacobi のこの考えと J. Greenstadt⁽²⁾ が提唱した方法を利用したわれわれの方法を掲げる。

§1. Jacobi の方法について

この方法は平面の回転を基礎としているので回転法と呼ばれているが、1846年 Jacobi により発見されたのでヤコビ法の呼び方でも有名である。電子計算機の発展とともに利用されてきている。改良されたいろいろな方法も多く派生しているが考えの基本のヤコビ法についてまず述べてみる。

$$A = \{a_{ij}\} \quad a_{ij} = a_{ji} \quad (i, j = 1, 2, \dots, n)$$

行列 U を次のように定義する。

$$U U^T = E \cdots (1) \quad (E: \text{単位行列})$$

$$z = U x \cdots \cdots (2)$$

なる直交変換により、

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i x_j = 1 \rightarrow \sum_{i=1}^n \lambda_i z_i^2 = 1$$

と変換される。

ただし、

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad z = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix}$$

とともに長さが1である。

このことを行列の直交変換からみると、

$$U^T A U = A, \quad A = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & 0 & \\ & & \ddots & \\ & 0 & & \lambda_n \end{bmatrix}$$

である。このとき λ_i は A の固有値となり、 U の列が対応する固有ベクトルとなる。

一般に C を直交変換の行列とし、

$$y = Cx$$

とすると、

$$\sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i x_j = 1 \rightarrow \sum_{i,j=1}^n t_{ij} y_i y_j = 1$$

に対応する変換された二次型式の行列 T は、

$$T = C^T A C$$

と表わされる。

更に、直交変換を受けた行列と受ける前の行列の要素は、

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n t_{ij}^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2$$

であるから、もし、 $C=U$ であれば T の対角要素の二乗和は最大となる。なぜならば、

$$T = \{t_{ij}\} \quad (i, j = 1, \dots, n)$$

において、

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n t_{ij}^2 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \dots + \lambda_n^2 \geq \sum_{i=1}^n t_{ii}^2$$

ところで、 $C=B$ のとき、

$$\sum_{i=1}^n t_{ii}^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i^2$$

である。

ところで、実際には実 n 次元空間 R^n の本来の直交変換 (回転) のうち、 $(n-2)$ の座標軸を固定した残りの2本の座標軸 x_j, x_k の平面の回転列 C_1, C_2, \dots の積の極限とし U を求めるわけである。

a_{jk} を A の絶対値最大非対角要素とする。これを平面 $(X_j X_k)$ における θ_1 の座標軸の回転によって消すことを考えてみる。

変換の方程式は、

$$X_j = \cos \theta_1 Y_j - \sin \theta_1 Y_k$$

$$X_k = \sin \theta_1 Y_j + \cos \theta_1 Y_k$$

$$X_i = Y_i \quad (i \neq j, k)$$

ただし、 X_i, Y_i はベクトルを表わす。

ここで, $\frac{a}{c} = \mu$, $\frac{a_{11} - a_{22}}{2a_{21}} = k$ とすると,

$$\frac{a_{12}}{a_{21}} - 2k\mu - \mu^2 = 0 \quad (2.3)$$

$$1 - 2k\mu - \mu^2 = 0, \quad (a_{12} = a_{21}) \quad (3.3)'$$

(2.3) の二次式の根を解き, a, c を求める.

すなわち,

$$c = \frac{1}{\sqrt{1 + \mu^2}}, \quad a = c\mu$$

である.

行列 A が実対称行列であれば, μ に関する二次方程式の根は,

$$\mu = -[k + \sqrt{k^2 + 1}] \quad \text{又は} \quad -[k - \sqrt{k^2 + 1}]$$

で与えられる. また, この直交変換を使用すると行列 A が非対称行列でも行列を三角行列に変換することによって固有値が求められる利点がある. 固有値は変換をほどこされた行列の対角線上に大きさの順に現われてくる.

実際の計算手順は次のようになっている. (実対称行列 A について)

1) 非対角要素の絶対値最大なものを見つける.

$$m = \max_{i>j} |a_{ij}|$$

ところで, 変換するたびに絶対値最大な要素を見つけ, その2本の座標軸による回転をするのでは, 最大値を見つける単純なことに貴重な計算時間をいちいち費やすのは損である. そこで, 絶対値最大の非対角要素を選ばずとも順々に頭から消していっても回転角度がある制限をうけると, すべての非対角要素と要求の値以下にすることが証明されているので, 求めた絶対値最大の要素にある定数 ε ($\varepsilon = 0.1, 0.5, \dots$) をかけ, その値より絶対値が大きいものについて頭から順次くり返し消してゆく方法をとる.

2) $a_{jk} \geq \varepsilon \quad (j > k, k = 1, \dots, n)$

なる非対角要素 a_{jk} を見つけ, 回転軸を定める.

$$3) \quad k = \frac{a_{jj} - a_{kk}}{2a_{jk}}$$

$$\mu = -k + \sqrt{k^2 + 1}$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{1 + \mu^2}}, \quad a = a\mu$$

を計算する.

4) $T_k = C_k^T T_{k-1} C_k$ ($T_0 = A$) によって変った要素だけを実際には計算する.

$$t_{jj}^{(k)} = t_{jj}^{(k-1)} c^2 + 2t_{jk}^{(k-1)} ac + t_{kk}^{(k-1)} c^2$$

$$t_{kk}^{(k)} = t_{jj}^{(k-1)} + t_{kk}^{(k-1)} - t_{jj}^{(k)}$$

$$t_{ij}^{(k)} = t_{ij}^{(k-1)} c + t_{ik}^{(k-1)} a$$

$$t_{ik}^{(k)} = t_{ik}^{(k-1)} c - t_{ij}^{(k-1)} a \quad \left(\begin{array}{l} l \neq k, j \\ l = 1, \dots, n \end{array} \right)$$

$$t_{jl}^{(k)} = t_{jl}^{(k-1)}, \quad t_{kl}^{(k)} = t_{kl}^{(k-1)}$$

$$t_{jk}^{(k)} = t_{jk}^{(k-1)} = 0$$

手順 2) 3) 4) を逐次くり返しては手順 1) にさらに何回かもどってくり返し, $\delta = \max_{i>j} |a_{ij}| \geq 0$ の収束判定条件に達したとき, 変換がほどこされた行列の対角上に固有値の近似根が求まっている. 固有ベクトルが欲しいときはあらかじめ単位行列をつくっておき, 手順 4) の次に,

$$5) \quad \begin{aligned} s_{ij}^{(k)} &= s_{ij}^{(k-1)}c + s_{ik}^{(k-1)}a \\ s_{ik}^{(k)} &= s_{ik}^{(k-1)}c - s_{ij}^{(k-1)}a \end{aligned}$$

で計算される。

ただし、 $S_0 = \{s_{ij}^{(0)}\} = E \cdots$ 単位行列

行列 $S_k = \{s_{ij}^{(k)}\}$ の列ベクトルが各固有値に対応する固有ベクトルである。

上による計算の列を次に掲げておく。

例 1)

$$A = \begin{bmatrix} 12 & 11 & 10 & 9 & \cdots & 3 & 2 & 1 \\ 11 & 11 & 10 & 9 & \cdots & 3 & 2 & 1 \\ 10 & 10 & 10 & 9 & \cdots & 3 & 2 & 1 \\ & & & \cdots & & & & \\ & & & \cdots & & & & \\ 2 & 2 & 2 & 2 & \cdots & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

この行列の固有値は解析的に計算すると、

$$\lambda_i = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \cos \frac{(2i-1)\pi}{25} \right\}^{-1} \quad (i=1, 2, \dots, 12)$$

で得られる。

試算の結果

繰返し回数	$m = \max_{i>j} a_{ij} $
第 1 回目	1.100000000+01
2 "	1.4518435194-00
3 "	5.4610404818-01
4 "	8.7470646341-02
5 "	6.1236430117-02
6 "	7.9004727144-03
7 "	4.6026567061-03
8 "	3.7036054953-04
9 "	3.5927166562-05
10 "	3.1064225624-06
11 "	3.0632184639-07
12 "	3.0165073450-08

($\epsilon=0.1, \delta=0.0000001$)

$\max_{i>j} |a_{ij}| < 10^{-7}$ 以下になったときの対角線上の要素 (固有値) と変換行列 c_1 の積 (固有ベクトル) は次のように得られた。TSK III での計算時間は約 10 分程度であった。(印刷時間を含む)。

Eigenvalue

6.3409135820+01 7.1201219465-00 2.6180339884-00 1.3790211855-00 8.7074532835-01
 6.1529474351-01 4.7045959596-01 3.8196600986-01 3.2556062590-01 2.8918975241-01
 2.6648111201-01 2.5398988833-01

Eigenvector

$$\begin{array}{l}
 X_1 = \begin{bmatrix} 3.9925975546-01 \\ 3.9281675787-01 \\ 3.8048001407-01 \\ 3.6195406898-01 \\ 3.3765699842-01 \\ 3.0826047897-01 \\ 2.7384243394-01 \\ 2.3502023966-01 \\ 1.9278229621-01 \\ 1.4725501641-01 \\ 9.9403370961-02 \\ 5.0197674198-02 \end{bmatrix} \\
 X_2 = \begin{bmatrix} -3.9294065500-01 \\ -3.3767984596-01 \\ -2.3519446575-01 \\ -9.9381031412-02 \\ 5.0055310480-02 \\ 1.9276988967-01 \\ 3.0817624778-01 \\ 3.8042456119-01 \\ 3.9922865212-01 \\ 3.6189320890-01 \\ 2.7384213007-01 \\ 1.4722858546-01 \end{bmatrix} \\
 X_3 = \begin{bmatrix} -3.8041683195-01 \\ -2.3510654923-01 \\ -1.3500501500-06 \\ 2.3512235139-01 \\ 3.8041709097-01 \\ 3.8042060362-01 \\ 2.3511138171-01 \\ -8.5084305309-06 \\ -2.3511664034-01 \\ -3.8043300290-01 \\ -3.8042176797-01 \\ -2.3511962495-01 \end{bmatrix} \\
 X_4 = \begin{bmatrix} 3.6193533821-01 \\ 9.9474534656-02 \\ -2.3511823925-01 \\ -3.9921540109-01 \\ -2.7381249482-01 \\ 5.0129085333-02 \\ 3.3774366958-01 \\ 3.8041274622-01 \\ 1.4724766382-01 \\ -1.9270326304-01 \\ -3.9291040017-01 \\ -3.0820163721-01 \end{bmatrix} \\
 X_5 = \begin{bmatrix} 3.3772470735-01 \\ -5.5134591196-02 \\ -3.8041308110-01 \\ -2.7381960593-01 \\ 1.4724866539-01 \\ 3.9921961831-01 \\ 1.9269612602-01 \\ -2.3512407227-01 \\ -3.9291346958-01 \\ -9.9471048228-02 \\ 3.0820998983-01 \\ 3.6193200299-01 \end{bmatrix} \\
 X_6 = \begin{bmatrix} -3.0819826851-01 \\ 1.9270285411-01 \\ 3.8042748308-01 \\ -5.0127055146-02 \\ -3.9920737037-01 \\ -9.9472366746-02 \\ 3.6193305454-01 \\ 2.3511716011-01 \\ -2.7381447875-01 \\ -3.3773134909-01 \\ 1.4724982798-01 \\ 3.9291908824-01 \end{bmatrix} \\
 X_7 = \begin{bmatrix} 2.7382507719-01 \\ -3.0820727679-01 \\ -2.3512055162-01 \\ 3.3772904170-01 \\ 1.9270370727-01 \\ -3.6192558337-01 \\ -1.4724878199-01 \\ 3.8041794253-01 \\ 9.9473232999-02 \\ -3.9291425974-01 \\ -5.0129940132-02 \\ 3.9921311589-01 \end{bmatrix} \\
 X_8 = \begin{bmatrix} -2.3511455001-01 \\ 3.8042201645-01 \\ 2.9110241522-07 \\ -3.8042228460-01 \\ 2.3511439062-01 \\ 2.3511334584-01 \\ -3.8042154247-01 \\ 2.8846882057-06 \\ 3.8042388416-01 \\ -2.3511559308-01 \\ -2.3511866832-01 \\ 3.8041957014-01 \end{bmatrix} \\
 X_9 = \begin{bmatrix} 1.9261350287-01 \\ -3.9929649136-01 \\ 2.3503250865-01 \\ 1.4717165947-01 \\ -3.9298945132-01 \\ 2.7374843366-01 \\ 9.9411094650-02 \\ -3.8047572220-01 \\ 3.0816499929-01 \\ 5.0101822925-02 \\ -3.6195625730-01 \\ 3.3771456409-01 \end{bmatrix} \\
 X_{10} = \begin{bmatrix} -1.4724593678-01 \\ 3.6193409796-01 \\ -3.8041851088-01 \\ 1.9270695516-01 \\ 9.9481531178-02 \\ -3.3772586595-01 \\ 3.9291678998-01 \\ -2.3511643037-01 \\ -5.0135146540-02 \\ 3.0820706385-01 \\ -3.9920488254-01 \\ 2.7382437502-01 \end{bmatrix} \\
 X_{11} = \begin{bmatrix} 9.9412307295-02 \\ -2.7387327663-01 \\ 3.8038684416-01 \\ -3.9292602911-01 \\ 3.0821787622-01 \\ -1.4721651730-01 \\ -5.0083517626-02 \\ 2.3517169817-01 \\ -3.6187403425-01 \\ 3.9926003234-01 \\ -3.3769492577-01 \\ 1.9272079436-01 \end{bmatrix} \\
 X_{12} = \begin{bmatrix} -5.0078188522-02 \\ 1.4729558701-01 \\ -2.3508382590-01 \\ 3.0821900550-01 \\ -3.6193112543-01 \\ 3.9290374135-01 \\ -3.9923045803-01 \\ 3.8039516096-01 \\ -3.3776489640-01 \\ 2.7378308356-01 \\ -1.9273222765-01 \\ 9.9457952866-02 \end{bmatrix}
 \end{array}$$

例 2) 数量化の外的基準のない場合の分類の分析に使用した行列データから固有値を求めてみる*. 行列は非対称行列, 階数 (rank) 落がある. (列についての和は 0)

.4322791164	-.0385542169	-.0385542169	-.0385542169	.0051957831
-.0867469879	.7164937527	-.0867469879	-.0577614807	-.0554969879
-.0048192771	-.0048192771	.9951807228	-.0048192771	-.0048192771
-.0554216867	-.0369031682	-.0554216867	.7924044002	-.0554216867
.0051957831	-.0246653280	-.0385542169	-.0385542169	.6093624498
-.0189006024	-.0626506024	-.0626506024	-.0626509024	-.0084839357
.0892444779	-.0409638554	-.0409638554	-.0264711018	-.0305471888
-.1129392570	-.1239346273	-.1493975903	-.1131657063	-.1493975903
.0147590361	-.0602409639	-.0602409639	-.0602409639	.0147590361
-.0626506024	-.0256135657	-.0626506024	-.0409114720	-.0626506024
.0115838353	-.0144578313	-.0144578313	-.0144578318	-.0040411647
-.0490461847	-.0212684070	-.0698795181	-.0408940108	-.0698795181
-.0896209839	-.1017737617	-.1156626506	-.1156626506	-.1052459839
-.0442269076	-.0395972780	-.0650602410	-.0433211105	-.0650602409
-.0286897590	-.1210508701	-.1349397590	-.1349397591	-.0182730923
-.0116311399	.0839948027	-.0291456147	.0094457831	-.0385542196
-.0867469880	-.0867469879	-.0719620417	-.0867469879	-.0354649367
-.0048192771	-.0048192771	-.0048192771	-.0048192771	-.0048192771
-.0554216867	-.0358138436	-.0419808265	-.0554216867	-.0361909175
-.0052208835	-.0287502953	-.0385542169	.0094457831	-.0385542169
.6886314488	-.0626506024	-.0492096422	-.0213172691	-.0626506024
-.0409638554	.6011930073	-.0409638554	-.0142971888	-.0409638554
-.1173463083	-.1493975903	.7269464956	-.1493975903	-.1493975904
-.0204973741	-.0210252776	-.0602409639	.5477590361	-.0602409639
-.0626506024	-.0626506024	-.0626506024	-.0626506024	.7770929873
-.0016373185	-.0046539098	-.0104255733	-.0077911647	-.0144578313
-.0570590053	-.0012520671	-.0389655396	-.0698795181	-.0698795181
-.1156626506	-.0611528467	-.1156626506	-.0023292173	-.1156626506
-.0458294717	-.0650602409	-.0395226066	-.0650602410	.0054525795
-.0631448872	-.0712142688	-.1228429848	-.0269397590	-.1157089898
.0308902276	-.0270599640	-.0293736613	-.0262085379	-.0081970740
-.0867469880	-.0264021604	-.0763303213	-.0527963707	-.0778184165
-.0048192771	-.0048192771	-.0048192771	-.0048192771	-.0048192771
-.0554216867	-.0324331810	-.0554216867	-.0369031682	-.0554216867
-.0107764391	-.0385542169	-.0350819946	-.0385542169	-.0052208835
-.0070950469	-.0511563495	-.0626506024	-.0441320839	-.0293172691
-.0131860776	-.0007339704	-.0322832999	-.0409638554	-.0216186173
-.1077309237	-.0833056363	-.1493975904	-.0907556151	-.1360047332
-.0324631861	-.0602409638	-.0012131861	-.0602409638	-.0120266781
-.6226506024	-.0626506024	-.0626506024	.0052506222	-.0537220310
.6105421686	-.0144578313	-.0109856091	-.0144578313	-.0040411647
-.0698795181	.6628791026	-.0698795181	-.0112375428	-.0698795181
-.0878848728	-.1156626506	.7298234605	-.0971441321	-.0725078887
-.0650602410	-.0104625398	-.0546435743	.6479027220	-.0650602410
-.0377175368	-.1349397590	-.0845925368	-.1349397590	.6156554791

(行列 A)

* 標識を一定にしたときのある 15 の評価語の分類の分析に使用したデータより.

その結果は,

繰返し回数	$\max_{i>j} a_{ij} $
第 1 回目	1.4939759040-01
2 "	1.4746896904-01
3 "	4.4997241965-02
4 "	4.4619956998-02
5 "	9.2840455481-03
6 "	2.5350938484-03
7 "	4.0984646223-04
8 "	5.6518188636-05
9 "	7.9041629986-06
10 "	1.5094232151-06
11 "	2.0292482890-07
12 "	3.6601798786-08

($\epsilon=0.1, \delta=0.0000001$)

Eigenvalue

1.0000000001-00] 9.3223529746-01 8.7239852626-01 8.3086440938-01 8.1612074586-01
 7.8976224856-01 7.4090256627-01 7.1925106250-01 6.5791234595-01 6.3555132893-01
 6.2151963157-01 6.0653234309-01 5.4285773548-01 3.8823811153-01 -2.7940937425-10

§3. むすびに

回転法による固有値, 固有ベクトルの数値解法は数量化や因子分析の計算に表われてくる固有値解法に便利な点が幾つかある。全根が一度に求まること, 階数が落ちていてもよいこと, 多重根が表われても容易に解けること, 非対称行列にも応用できる, 階数落ちははっきり分かっているときには計算上の精度が簡単に観測できるなどが掲げられる。われわれの経験からいうと対称行列に関しては, 回転法はすぐれた数値解法で, 恐らく他の方法は考える必要がないといってもよいくらいである。ただし, 細目についてはいろいろな改良が考えられるので, いかなる種類の回転法が計算機の計算時間と問題の精度上で適しているが今後に残された課題であると思う。

統計数理研究所

参 考 文 献

- (1) C. G. J. Jacobi, "Über ein leiches verfahren, die in der Theorie der Sakularstörungen vorkommenden Gleichungen numerish aufzulösen" J. Reine Angaw. Math. 30 (1846) pp. 51~95.
- (2) J. Greenstadt, A method for finding roots of arbitrary matrices, MTAC, 9, April, (1955), pp. 47-52.
- (3) 森口繁一, 高田勝「数値計算法」岩波講座現代応用数学, 1958.
- (4) 林 知己夫, 数量化の方法と成分分析法因子分析法, 工業統計講座, (1962).