実対称行列の対角化

みそ

2005.2.24

1　実対称行列

実対称行列とは、行列 A の転置行列を A^T とすると $A = A^T$ を満たす行列のことである。実対称行列は、ある直行行列で対角化可能で、また固有値は必ず実数となる。詳しくは線形代数等の参考書を見てもらいたい。

2　固有値問題

物理学の問題において、固有値問題は数多く出てくる。そのとき現れる方程式は

$$AX = \lambda X$$

でありこれは固有方程式と呼ばれる。ここで、A は任意の数 n の $n \times n$ 次行列で λ は固有値、X は列ベクトルで固有ベクトルという。n が大きい値となると人の手による計算でこの方程式を解くのは大変である。また、n が無限となる場合の物理学問題もある。そこでこのような問題はコンピュータによって解く。まず行列 A を対角化して解くのが基本である。その方法には様々な形式があるが、ここでは最も簡単な方法で解く方法を紹介する。

3　実対称行列の対角化の方法

ある直行行列を U とすると、n 次実対称行列 A は必ず次の計算

$$U^{-1}AU \tag{1}$$

により対角化される。しかし、実対称行列 A からすぐに対角化する直行行列 U を見つけるのは難しい。そこでまず実対象行列の非対角成分のうち最もその絶対値が大きい成分に注目する。その成分が a_{ij} であったとしよう。そして次に第 i 行 i 列と第 j 行 j 列の値が $\cos\theta$ であとの対角成分は全て1であり、第 i 行 j 列の値が $\sin\theta$ で第 j 行 i 列の値が $-\sin\theta$ でり残りの成分は全て0である直行行列を考える。そして、式(1)の計算を行い計算結果の行列を C とすると各成分は

$$
\begin{aligned}
c_{ii} &= a_{ii}\cos^2\theta + a_{jj}\sin^2\theta - 2a_{ij}\sin\theta\cos\theta \\
c_{jj} &= a_{ii}\sin^2\theta + a_{jj}\cos^2\theta + 2a_{ij}\sin\theta\cos\theta \\
c_{ij} &= a_{ij}(\cos^2\theta - \sin^2\theta) + (a_{ii} - a_{jj})\sin\theta\cos\theta \\
c_{ji} &= c_{ij} \\
c_{il} &= a_{il}\cos\theta - a_{jl}\sin\theta \qquad (l \neq i, j) \\
c_{li} &= c_{il} \qquad (l \neq i, j) \\
c_{jl} &= a_{il}\sin\theta + a_{jl}\cos\theta \qquad (l \neq i, j) \\
c_{lj} &= c_{jl} \qquad (l \neq i, j) \\
c_{lm} &= a_{lm} \qquad (l \neq i, j \quad m \neq i, j)
\end{aligned}
$$

そして $c_{ij} = 0$ となるように θ の値を決める。上記の式の c_{ij} の右辺を0とおいて、$a_{ii} \neq a_{jj}$ の場合

$$\theta = \frac{1}{2}\arctan\frac{-2a_{ij}}{a_{ii} - a_{jj}}$$

$a_{ii} = a_{jj}$ の場合 θ の値は何通りかとれるが、ここでは $\frac{\pi}{4}$ とする。これで行列 C の全ての成分の値が決まる。そして今度は行列 C に同様な計算を行う。以降これらの計算を繰り返し最終的に実対称行列の全ての非対角成分がある値より小さくなったら計算を終わるとする。これは、コンピュータでは全ての非対角行列を0にはできない場合があるからである。