数理解析研究所講究録
91巻 1970年 224-232

非負既約行列の固有値問題の数値解法

東大 教養　　清 水 留三郎

§1. 序論

対称行列ないし正規行列の固有値問題の数値解法としてはJacobi法あるいはHouseholder法が十分有効であることはよく知られている．正規でない行列に対してはべき乗法に頼ることが多いが，計算量が多く収束の保証がないのが難点である．ところが非負既約行列に対して計算量も少く収束も速い解法が[1]に報告されているのをここに紹介する．

§2. 計算法

$A=[a_{ij}]$がN次の非負既約行列ならば，Aの最大固有値ωはスペクトル半径$\rho(A)$に等しく，

$$(1)\qquad \forall i \qquad \sum_{j=1}^{N} a_{ij}=\omega$$

か

$$(2) \qquad \min_i \sum_{j=1}^{N} a_{ij} < \omega < \max_i \sum_{j=1}^{N} a_{ij}$$

のいずれかが成立つ’ことが知られている[3]. 非負既約行列 $A_0 \equiv A$ から始めて，非負既約行列 A_n を対角行列 T_n によって相似な非負既約行列 $A_{n+1} \equiv T_n^{-1} A_n T_n$ に変換して(2)で与えられる ω の存在区間を狭めることができれば最大固有値 ω が求まり，対応する固有ベクトルの各要素も $T_0 T_1 T_2 \cdots$ の対角要素として定まる.

N次正方行列 $A_n = [a_{ij}^n]$ に対して

$$R_i^n = \sum_{j=1}^{N} a_{ij} \ , \ R^n = \max_i R_i^n \ , \ r^n = \min_i R_i^n$$

とする. また $J_n = \{ i \mid R_i^n = r^n \}$ として，

$$b_i^n = \sum_{j \in J_n} a_{ij}^n$$

とする.

$$T_n = \mathrm{diag}\,(d_1^n, \cdots, d_N^n),$$

$$d_i^n = \begin{cases} 1 \ , & i \notin J_n, \\ x_n \ , & i \in J_n \end{cases}$$

とすると，

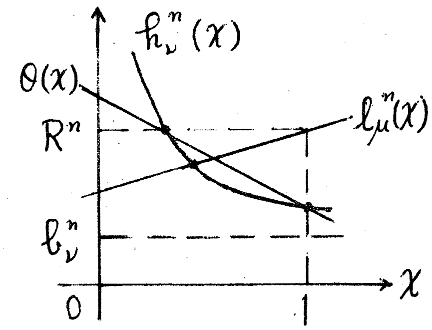
$$R_i^{n+1} = \begin{cases} \ell_i^n(x_n) = R_i^n + (x_n - 1)\, b_i^n, & i \notin J_n, \\ h_i^n(x_n) = b_i^n + \dfrac{r^n - b_i^n}{x_n}, & i \in J_n \end{cases}$$

である．ここで x_n はつぎのように定める．ν と μ を

$$\nu \in J_n,\ b_\nu^n = \min_{i \in J_n} b_i^n,\ R_\mu^n = \max_i R_i^n$$

となるように選び，x_n を方程式

$$h_\nu^n(2x-1) = \ell_\mu^n(2x-1)$$



の区間$(\frac{1}{2}, 1]$内の根にとる．
行列A_0が既約ならば，そのような根は唯一つ存在し，

$$a = 4 b_\mu^n,\ b = 2R^n - 6 b_\mu^n - 2 b_\nu^n,\ c = R^n + r^n - 2 b_\mu^n - 2 b_\nu^n$$

とすると，

$$x_n = \begin{cases} \dfrac{-b + \sqrt{b^2 + 4ac}}{2a}, & a \neq 0, \\ c/b, & a = 0 \end{cases}$$

である．固有ベクトルを求めるために，$T_0 T_1 \cdots T_n$ の代りに

$$D_n = \mathrm{diag}\left(\prod_{t=0}^{n} d_1^t, \cdots, \prod_{t=0}^{n} d_N^t\right) \Big/ \max_j \prod_{t=0}^{n} d_j^t$$

を用い,

(3) $$A_{n+1}=D_n^{-1}A_0D_n$$

とする.

§3 収束の証明

§2の計算法によって最大固有値の存在区間をいくらでも狭めることができることを示そう.

<u>定理</u> A_0が非負既約行列ならば, $n\to\infty$にしたがって

(4) $$R_i^n\to\omega,\quad i=1,2,\cdots,N,$$

(5) $$D_ne\to x$$

となる. ここで$e=[1\cdots1]^T$, xは最大要素が1になるように規格化した最大固有値ωに対応する固有ベクトルである.

この定理はつぎの一連の補助定理によって示される.

<u>補助定理1</u> $R^{n+1}\leqq R^n$.

(証明) まず任意の$i\notin J_n$に対して

$$R_i^{n+1}=R_i^n+(x_n-1)b_i^n\leqq R_i^n.$$

つぎにνについて考える. $h_\nu^n(2x-1)=R^n$の根をu_nとすると$u_n\leqq x_n$である. 双曲線$h_\nu^n(x)$上の2点$(2u_n-1,R^n)$と$(1,r^n)$

を結ぶ直線を

$$\theta(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{r^n - R^n}{1 - u_n}\right)(x-1) + r^n$$

とすると，$h_\nu^n(x)$ は凸であるから，任意の $x \in [2u_n - 1, 1]$ に対して $h_\nu^n(x) \leqq \theta(x)$ である．$2u_n - 1 \leqq u_n \leqq x_n \leqq 1$ であるから

$$R_\nu^{n+1} = h_\nu^n(x_n) \leqq \theta(x_n) \leqq \theta(u_n) = \frac{R^n + r^n}{2}$$

最後に任意の $i \in J_n$ に対して

$$R_i^{n+1} = \frac{r^n}{x_n} - \left(\frac{1}{x_n} - 1\right) b_i^n \leqq R_\nu^{n+1} \leqq \frac{R^n + r^n}{2}$$

（証明終）

ところで

$$\Delta_i^n = \prod_{t=0}^{n} d_i^t$$

とすると，(3) から $a_{ij}^{n+1} = a_{ij}^0 \Delta_j^n / \Delta_i^n$ であるが，補助定理1により $a_{ij}^{n+1} \leqq R^{n+1} \leqq R^0$ であるから，$m = min\{a_{ij}^0 \mid a_{ij}^0 > 0\}$ とすると，$a_{ij}^0 > 0$ である任意の (i, j) に対して

$$\frac{\Delta_i^n}{\Delta_j^n} \geqq \frac{m}{R^0} \tag{6}$$

である．$\Delta_p^n = \max_i \Delta_i^n$，$D_n = diag(\Delta_1^n, \cdots, \Delta_N^n)/\Delta_p^n$ とする

と，任意の $i \neq p$ に対してA_0の既約性から $a^0_{ii_1}, a^0_{i_1i_2}, \cdots,$ $a^0_{i_rp}$ が正の非対角要素であるような $(i_1, i_2, \cdots, i_r)$ が存在するから，(6) によって

$$(7) \qquad \frac{\Delta^n_i}{\Delta^n_p} = \frac{\Delta^n_i}{\Delta^n_{i_1}} \frac{\Delta^n_{i_1}}{\Delta^n_{i_2}} \cdots \frac{\Delta^n_{i_r}}{\Delta^n_p} \geq \left(\frac{m}{R^0}\right)^{r+1} > 0$$

である．したがって，任意のnに対してD_nは正則であり，逆行列D_n^{-1}が存在する．

<u>補助定理2</u>　$R^n \to \omega$ ならば，$R^n_i \to \omega\ (i=1, \cdots, N)$，$D_n e \to x$．

（証明）$\{D_n\}$は有界であるから，その集積点の集合$\mathfrak{D}$は空でない．$\{D_n\}$から$\mathfrak{D}$の1点D_∞に収束する部分列$\{D_{n(k)}\}$を選ぶ．$D^{-1}_{n(k)} \to D^{-1}_\infty$ であるから，$A_{n(k)} = D^{-1}_{n(k)} A_0 D_{n(k)} \to A_\infty = D^{-1}_\infty A_0 D_\infty$ である．A_∞ は非負既約行列であるから，(1) によって$R^n \to \omega$ ならば$R^n_i \to \omega\ (i=1, \cdots, N)$である．したがって，$A_\infty e = \omega e$ または$A_0 D_\infty e = \omega D_\infty e$であるから，$D_\infty e \Rightarrow x$である．

（証明終）

<u>補助定理3</u>　A_0が非負既約行列ならば，$R^n \to \omega$である．

（証明）2通りの場合が考えられる

場合1：任意のiに対して$\{n_i(k) \mid i \in J_{n_i(k)}\}$が無限列である場合．

任意の$p \in J_n$に対して

$$R_p^{n+1} \leqq \frac{R^n + r^n}{2} \leqq \frac{R^n + \omega}{2}$$

から

$$R_i^{n_i(1)+1} \leqq \frac{R^{n_i(1)} + \omega}{2} \leqq \frac{R^0 + \omega}{2}, \quad i = 1, \cdots, N.$$

したがって，$M_1 = \max_i n_i(1) + 1$ とすると，

$$R^{M_1} \leqq \frac{R^0 + \omega}{2}$$

R^0 を R^{M_1} に置換えて上の議論を繰返すと，

$$R^{M_2} \leqq \frac{R^{M_1} + \omega}{2} \leqq \frac{R^0}{4} + \omega\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4}\right)$$

であるような $M_2 > M_1$ が存在する．一般に

$$R^{M_k} \leqq \frac{R^0}{2^k} + \omega\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \cdots + \frac{1}{2^k}\right)$$

であるような M_k が存在する．ところが，$\omega \leqq R^{M_k}$ であるから，$k \to \infty$ にしたがって $R^{M_k} \to \omega$ となる．

場合2：十分大きい任意の n に対して $p \notin J_n$ である p が存在する場合．

$\{x_n\}$ の部分列に1に収束するものがないと仮定すると，$\varepsilon > 0$ が存在して十分大きい任意の n に対して $x_n < 1 - \varepsilon$ である．十分大きい任意の n に対して $p \notin J_n$，$x_n < 1 - \varepsilon$ であるから，

$$R_p^{n+1} = R_p^n + (\chi_n - 1)\, \ell_p^n \leqq R_p^n - \varepsilon\, \ell_p^n.$$

したがって，ある$M>0$が存在して，任意の$n \geqq M$に対して

(8) $$R_p^{n+1} \leqq R_p^M - \varepsilon \sum_{t=M}^{n} \ell_p^t.$$

任意の$q \neq p$に対してA_0の既約性から任意のnに対して$a_{pi_1}^0>0$, $a_{i_1 i_2}^0>0, \cdots, a_{i_k q}^0>0$であるような$(i_1, i_2, \cdots, i_k)$が存在する．$a_{ij}^0>0$ならば任意の$n$に対して$a_{ij}^n = a_{ij}^0 \Delta_j^n / \Delta_i^n \geqq \delta > 0$であるから，$\ell_p^n>0$である$n$が無限に存在すれば$\sum \ell_p^t \to \infty$である．そのとき(8)から$R_p^n$が負になるという矛盾が起る．他方十分大きい任意の$n$に対して$\ell_p^n=0$ならば，任意の$j \in J_n$に対して$a_{pj}^n=0$であるから，$i_1 \notin J_n$である．$p$を$i_1$に置換えれば$R_{i_1}^n$が負になるという矛盾が起るか，$i_2 \notin J_n$となる．このようにして十分大きい$n$に対して$q \notin J_n$となったとすると，十分大きい任意の$n$に対して$J_n = \emptyset$となる．いずれにしても$\{\chi_n\}$の部分列で1に収束するもの$\{\chi_{n(k)}\}$が存在する．ところで，$\{R^n\}$は$\omega$を下界とする非増加列であるから$R^n \to \alpha \geqq \omega$.
また$\ell_\nu^n(2\chi_n - 1) = \ell_\mu^n(2\chi_n - 1)$から

$$\gamma^{n(k)} = (2\chi_{n(k)} - 1) R^{n(k)} - 2(\chi_{n(k)} - 1)\left[\ell_\nu^{n(k)} - (2\chi_{n(k)} - 1)\ell_\mu^{n(k)}\right].$$

であり，$\gamma^{n(k)} \to \alpha \leqq \omega$. したがって$R^n \to \omega$. （証明終）

§4. 例題

$$A_0 = \begin{bmatrix} 1.00397 & 0.00401 & 0.99603 \\ 0.00788 & 0.99397 & 1.00400 \\ 0.00001 & 0.00005 & 1.00207 \end{bmatrix}$$

の固有値は

$$\lambda_1 = 1.011637,\ \lambda_2 = 0.9984827,\ \lambda_3 = 0.9898904$$

である. $\lambda_2/\lambda_1 = 0.987$, $\log_{10}(\lambda_2/\lambda_1) = -0.005$ であるからべき乗法では1000回の反復で10^5程度の誤差である.

この方法による反復の模様は図1に示した通りである.

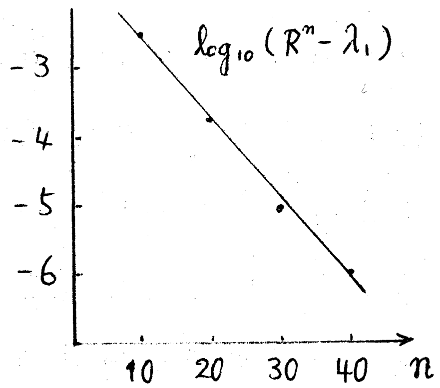


図1 誤差曲線

参考文献

[1] Hall, C. A. and Porsching, T. A.: Computing the maximal eigenvalue and eigenvector of a nonnegative irreducible matrix, SIAM J. Num. Anal., 5, 3, Sept. 1968.

[2] —— : Computing the maximal eigenvalue and eigenvector of a positive matrix, SIAM J. Num. Anal., 5, 2, June 1968.

[3] Varga, R. S.: Matrix iterative analysis, Prentice-Hall, 1962.