

非負既約行列の固有値問題 の数値解法

東大 教養 清水 紹三郎

§ 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、

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

か

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

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か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 $T_0, T_1, T_2, \dots$ 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

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

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.

$$T_n = \text{diag}(d_1^n, \dots, d_N^n),$$

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

とすると,

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

である。ここで x_n はつぎのように定める。 ν と $\mu \in$

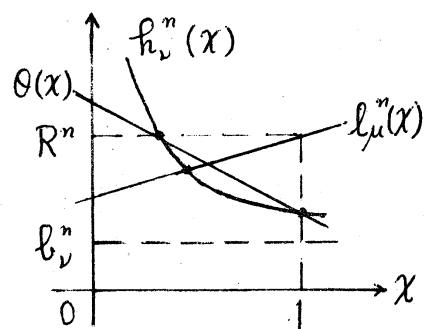
$$\nu \in J_n, \ell_\nu^n = \min_{i \in J_n} \ell_i^n, R_\mu^n = \max_i R_i^n$$

となるように選ぶ, 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,



$$a = 4\ell_\mu^n, \ell = 2R^n - 6\ell_\mu^n - 2\ell_\nu^n, C = R^n + \gamma^n - 2\ell_\mu^n - 2\ell_\nu^n$$

とすると,

$$x_n = \begin{cases} \frac{-\ell + \sqrt{\ell^2 + 4aC}}{2a}, & a \neq 0, \\ C/\ell, & a = 0 \end{cases}$$

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

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

を用い,

$$(3) \quad A_{n+1} = D_n^{-1} A_0 D_n$$

とする.

§3 収束の証明

§2の計算法によつて最大固有値の存在区間をいくらでも狭めることかてきることを示そう.

定理 A_0 が非負既約行列ならば, $n \rightarrow \infty$ にしたがつて

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

$$(5) \quad D_n e \rightarrow \chi$$

となる. ここで $e = [1 \dots 1]^T$, χ 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つて示される.

補助定理1 $R^{n+1} \leq R^n$

(証明) まず任意の $i \notin J_n$ に対して

$$R_i^{n+1} = R_i^n + (\chi_n - 1) b_i^n \leq R_i^n.$$

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

を結ぶ直線を

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

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

$$R_v^{n+1} = h_v^n(x_n) \leq \theta(x_n) \leq \theta(u_n) = \frac{R^n + \gamma^n}{2}$$

最後に任意の $i \in J_n$ に対して

$$R_i^{n+1} = \frac{\gamma^n}{x_n} - \left(\frac{1}{x_n} - 1 \right) h_i^n \leq R_v^{n+1} \leq \frac{R^n + \gamma^n}{2}$$

(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 $a_{ij}^{n+1} \leq R^{n+1} \leq R^0$ 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

$$(6) \quad \frac{\Delta_i^n}{\Delta_j^n} \geq \frac{m}{R^0}$$

である. $\Delta_p^n = \max_i \Delta_i^n$, $D_n = \text{diag}(\Delta_1^n, \dots, \Delta_n^n) / \Delta_p^n$ とする

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

$$(7) \quad \frac{\Delta_i^n}{\Delta_p^n} = \frac{\Delta_i^n}{\Delta_{i_1}^n} \frac{\Delta_{i_1}^n}{\Delta_{i_2}^n} \cdots \frac{\Delta_{i_r}^n}{\Delta_p^n} \geq \left(\frac{m}{R^0} \right)^{r+1} > 0$$

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.

補助定理 2 $R^n \rightarrow \omega$ ならば, $R_i^n \rightarrow \omega (i=1, \dots, N)$, $D_n e \rightarrow \chi$.

(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.

$D_{n(k)}^{-1} \rightarrow D_\infty^{-1}$ であるから, $A_{n(k)} = D_{n(k)}^{-1} A_0 D_{n(k)} \rightarrow A_\infty = D_\infty^{-1} A_0 D_\infty$ である. A_∞ は非負既約行列であるから, (1) によって $R^n \rightarrow \omega$ ならば $R_i^n \rightarrow \omega (i=1, \dots, N)$ 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, $D_\infty e \Rightarrow \chi$ である.

(証明終)

補助定理 3 A_0 が非負既約行列ならば, $R^n \rightarrow \omega$ 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

$$R_p^{n+1} \leq \frac{R^n + \gamma^n}{2} \leq \frac{R^n + \omega}{2}$$

から

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

したがって, $M_1 = \max n_i(1) + 1$ とすると,

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

R^0 を R^{M_1} に置換えて上の議論を繰返すと,

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

であるような $M_2 > M_1$ が存在する. 一般に

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

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

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

$\{\chi_n\}$ 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 $\chi_n < 1 - \varepsilon$ である. 十分大きい任意の n に対して $\eta \notin J_n$, $\chi_n < 1 - \varepsilon$ であるから,

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

したがって、ある $M > 0$ が存在して、任意の $n \geq M$ に対して

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

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 $a_{pi}^0 > 0$, $a_{ii_1}^0 > 0, \dots, a_{ii_k}^0 > 0$ であるような $(i_1, i_2, \dots, i_k)$ が存在する.

$a_{ij}^0 > 0$ ならば任意の n に対して $a_{ij}^n = a_{ij}^0 \Delta_j^n / \Delta_i^n \geq \delta > 0$ であるから、 $\ell_p^n > 0$ である n が無限に存在すれば $\sum \ell_p^t \rightarrow \infty$ 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^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 ω を下界とする非増加列であるから $R^n \rightarrow \alpha \geq \omega$.

また $\ell_\nu^n (2\chi_n - 1) = \ell_\mu^n (2\chi_n - 1)$ から

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

であり、 $\gamma^{n(k)} \rightarrow \alpha \leq \omega$. したがって $R^n \rightarrow \omega$. (証明終)

§ 4. 例題

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

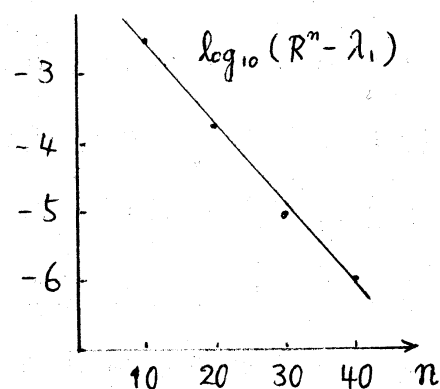
の固有値は

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

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様子は

図 1 に示した通りである。



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.

図 1 誤差曲線