

## 品の悪い行列の 固有値問題

中野嘉弘 (88 歳、札幌市南区)

FAX: 011-588-3354, E-mail: yoshihiro@river.ocn.ne.jp

## 0. はし が き

インターネット Yahoo 知恵袋の数学カテゴリーで、最も多い質問は、線形代数の行列の対角化と、固有ベクトルの関係である。大学生が、宿題で苦勞されて居るのが憫まれて、つい、応援したくなる。

昨年の JAPLA 夏の合宿 からの報告に、我らの 有能かつ御親切なる志村正人様の「マトリックスの数学と数値計算 (1) 行列式と行列の固有値 (pp.47) 」(文献 1) の中に、まさに「品の良い行列」の話題があった。その代表は先ず、「実対称行列」である。

細かく云えば、

- 1) 実数の逆行列が存在する。
- 2) 固有値は実数で、重複根は無い。
- 3) 異なる固有値に対応する固有ベクトルは直交する。
- 4) 直交行列によって対角化出来る。

学生諸君を苛める(?) のは、上記では無い、即ち、品の悪い行列の場合である。それを、扱う話の緒論を述べる予定である。

## 1. 先ず、2 次 の 行 列 の 問 題

問 (1) nraesseoventura さん: 2 次の正方行列  $\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$  の対角化は、どうしたら可能ですか?

答 (1) ] nra2 = . 2 2 \$ 2 3 1 2  
2 3  
1 2 。

中野の固有値問題ルーチン N\_evec (文献 2, 3, 4) を用い、演算

N\_evec nra2 より、

固有値は、 $\lambda_1 = 3.73205$  と  $\lambda_2 = 0.267949$ 。

固有ベクトル(縦に読む) は、上記夫々に対応して、

$\lambda_1$			$\lambda_2$	
1.732	3	と	-1.732	3
1	1.732		1	-1.732

 です。

対角化の為に直交  $2 \times 2$  行列を  $P$  とする。

その第1例  $P$  は、上記  $\lambda_1$  に対応する固有ベクトルから任意に1列を選び、 $\lambda_2$  からも同様に、任意に1列を選んで、下記の如く  $2 \times 2$  行列として作る。(選び方により、 $P$  には、今例では4通り作れるが、最終結果としては同じことになる。試算されよ。)

$P =$   

1.732	-1.732
1	1

その逆行列 }  $IP = . \% . P$  から、 $2 \times 2$  行列で、

0.288684	0.5
-0.288684	0.5

。

逆行列の検算は、行列の内積(inner product) の関数  $ip$  を用い、

$IP \ ip \ P \rightarrow$  単位行列 で可能である。

対角化の演算は、行列の内積  $IP \ ip \ nra2 \ ip \ P$  から、

3.73205	0
0	0.267949

の如く、対角要素には、固有値が並んだ。

問(2) ]iti2t =. 2 2 \$ 0 1 0 0

0 1  
0 0

固有値は 0, 0 (2重根)。

固有ベクトル(縦列に読む)は、演算  $N\_evec \ iti2t$  より、

0 1  
0 0

対角化: ] P =. 2 2 \$ 0 1 0 0

0 1

0 0 であるが、 $\det P = 0$  故、

逆行列  $IP$  は無い。対策として、転移行列  $TP$  を使う。

演算  $TP \ ip \ iti2t \ ip \ P$  から、結果は 0 0

0 0 で、

一見、固有値が対角線上に並んだかに見える(?) 。

問(3) ]iti2a =. 2 2 \$ 1 0 1 1

1 0

- 1 1
- ・演算 N\_evec iti2a から
  - ・固有値 1 1 (重複根)
  - ・固有ベクトル(縦列で読む)

0 0 0 0  
1 0 1 0

- ・対角化 は 前問と同様であるが、結果は

TP ip iti2a ip P から  
1 0  
0 0

対角化された様にも見えるが、固有値の全てが登場した訳では無い。

問(4) ]num21 = . 2 2 \$ 0 \_1 1 0  
0 \_1  
1 0

- ・演算 N\_evec num21
- ・固有値 0j1 と 0j\_1
- ・固有ベクトル(縦列として見る)は、

0 \_1 0 \_1  
1 0 と 1 0。

- ・対角化: P21 = 0 \_1 = 逆行列 IP21 として、

1 0  
演算 IP21 ip num21 ip P21 から 0 \_1  
1 0。

原対角行列には戻ったが、複素固有値の実部だけが登場だ！

## 2. 3 次 行 列 の 場 合

問(5)与行列 numB3 = 1 1 1  
1 1 \_1  
1 \_1 \_1

演算 N\_evec num3B  
固有値 固有ベクトル (縦列)

2 2 2 0  
2 2 0  
0 0 0

\_2 2 \_2 \_4  
\_2 2 4  
-4 4 8

1 \_1 1 \_1  
1 \_1 1  
\_1 1 \_1

変換行列の例

P3B 2 \_2 \_1

```

      2  2  1
      0  4  _1
逆行列 IP3B =. %. P3B
      0.25      0.25      0
      _0.0833333 0.0833333 0.166667
      _0.333333 0.333333 _0.333333

```

対角化

```

計算   IP3B ip num3B ip P3B
結果   2  0  0
        0  _2  0
        0  0  1

```

(対角要素が固有値である。)

問 (6) 与行列 iti3A =

```

      0  1  1
      1  0  1
      1  1  0

```

演算 N\_evec iti3A

固有値 固有ベクトル  
(2重根) 3x (縦列)

```

      2  1  1  1
      1  1  1
      1  1  1
      _1  0  0  0
      0  0  0
      0  0  0
      _1  0  0  0
      0  0  0
      0  0  0

```

変換行列

```

P3      1  0  0
      1  0  0
      1  0  0

```

det P3 = 0 であるから、逆行列は存在せず、  
[別途の解法]を考える必要がある。

### 3. 重複固有値の場合の 別途解法

中野の別途関数 eigvec を思いだした。トライする。

今は、固有値 (2, \_1, \_1)、与行列 iti3A である。

演算: (2, \_1, \_1) eigvec iti3A

結果:

```

      |-----|
      | _2  1  1 | 1  1  1 | 1  1  1 |
      | 1  _2  1 | 1  1  1 | 1  1  1 |

```

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & \sqrt{2} \\ \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}$$

規格直交化

$$\begin{array}{l} v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad v_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 1 & 1 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \quad \text{と置いて、} \end{array}$$

グラムシュミット法 `gramschmidt3 v1` から

```
1 1 1
1 1 1
1 1 1
NB. normalize
0.57735 0.57735 0.57735
0 0 0
0 0 0
```

グラムシュミット法 `gramschmidt3 v2` から

```
\sqrt{2} 1 1
1 \sqrt{2} 1
1 1 \sqrt{2}
\sqrt{2} 1 1
NB. normalize
\sqrt{2} 0.408248 0.408248
0 \sqrt{2} 0.707107
0 0 0
```

ここで、小数値は、普通の記法では、

$$\begin{aligned} 0.57735 &= 1 / \sqrt{3}, \\ \sqrt{2} 0.707107 &= \sqrt{2} / \sqrt{2}, \\ 0.408248 &= 1 / \sqrt{6}, \\ \sqrt{2} 0.408248 &= \sqrt{2} / \sqrt{6} \quad \text{である。} \end{aligned}$$

かくて、直交化行列  $V =$

$$\begin{pmatrix} 1 / \sqrt{3} & 0 & \sqrt{2} / \sqrt{6} \\ 1 / \sqrt{3} & \sqrt{2} / \sqrt{2} & 1 / \sqrt{6} \\ 1 / \sqrt{3} & \sqrt{2} / \sqrt{2} & 1 / \sqrt{6} \end{pmatrix}$$

が得られる。

この  $V$  の 行と列の転移行列を  $T_V$  として、

$T_V$  `ip iti3A ip V` の変換から、予定通り、

対角要素  $2, \sqrt{2}, \sqrt{2}$  の対角行列が得られる。

## む す び

最後がちよっと難問となったので、更に、エレガント化に改良しよう。

この問題が上手く進行すれば、量子化学で、固有値に重複があり、固有ベクトルに 0 ばかりが並んで仕舞う場合の取り扱いが大きく変わろう。

## 文 献

- 1) 志村正人「マトリックスの数学と数値計算 (1) 行列式と行列の固有値 (pp.47) 」JAPLA 夏の合宿 2010/8/3
- 2) 中野嘉弘「固有ベクトル計算法 志村論文の理解の為に」pp.11、JAPLA 2010.9.25
- 3) 中野嘉弘「固有ベクトル計算法(その 2) 量子化学に例題: ベンゼン」 JAPLA 2010.10.23
- 4) 中野嘉弘「固有ベクトル計算法(その 3) 」JAPLA 2010.12.4