JAPLA 2011.2.26(Sat) badmat.txt

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、
宿題で苦労されて居るのが偲ばれて、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 (2 3)(1 2) 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、λ1 = 3.73205 と λ2 = 0.267949。
固有ベクトル（縦に読む） は、上記夫々に対応して、

```
     λ1                    λ2
  1.732     3        と _1.732    3
  1         1.732        1        _1.732
```

です。

対角化の為の直交 2x2 行列を P とする。

その第1例 P は、上記 λ1 に対応する固有ベクトルから任意に 1 列を選び、λ2 からも同様に、任意に 1 列を選んで、下記の如く 2x2 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、2x2 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 -> 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 │
```

```
│ 1   1  _2│1  1  1  │1  1  1  │
└──────────────┴──────┘
```

規格直交化

```
v1 = 1 1 1    v2 = _2   1   1
  1 1 1           1  _2   1
  1 1 1,          1   1  _2
```
と置いて、

グラムシュミト法 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
```

グラムシュミト法 gramschmidt3 v2 から

```
 _2  1  1
  1 _2  1
  1  1 _2
 _2  1  1
NB. normalize
_0.816497  0.408248 0.408248
 0 _0.707107 0.707107
 0         0        0
```

ここで、小数値は、普通の記法では、

0.57735 = 1 / √(3)、

_ 0.707107 = _1 / √(2)、

0.408248 = 1 / √(6)、

_0.816497 = _2 / √(6) である。

かくて、直交化行列 V =

1 / √(3)	0	_2 / √(6)
1 / √(3)	_1 / √(2)	1 / √(6)
1 / √(3)	_1 / √(2)	1 / √(6)

が得られる。

この V の 行と列の転移行列を TV として、

TV ip iti3A ip V の変換から、予定通り、

対角要素 2, _1, _1 の対角行列が得られる。

むすび

最後がちょ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