寄　　書

Hessenberg 行列の固有値*

山　本　哲　朗**

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn-1} & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (a_{ij}\text{は実数または複素数}) \qquad (1)$$

なる形の行列は（上方）Hessenberg 行列と呼ばれ，数値解析においてよくあらわれる．以下この行列の固有値に関するある簡単な性質を述べ，その応用として，三重対角行列の固有値に対する 2，3 の性質を導く．

1. Hessenberg 行列の固有値

（1）において，ある i につき $a_{ii-1}=0$ なら A の固有値は二つの Hessenberg 行列

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1i-1} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2i-1} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & & a_{i-1i-2} & a_{i-1i-1} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_{ii} & a_{ii+1} & \cdots & a_{in} \\ a_{i+1i} & a_{i+1i+1} & \cdots & a_{i+1n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & a_{nn-1} & a_{nn} \end{pmatrix}$$

の固有値の合併であるから，最初から $a_{ii-1}\neq 0$ $(2\leqq i\leqq n)$ として一般性を失わない．

さて，k 個の勝手な数 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots\cdots, \lambda_k$ をとり

$$\tilde{A}=(A-\lambda_1 E)(A-\lambda_2 E)\cdots\cdots(A-\lambda_k E)$$

をつくれば，簡単な計算により，$k<n$ なら $\tilde{A}$ の第 $(k+1, 1)$ 要素は $\prod_{i=1}^{k} a_{i+1i}\neq 0$ であり，$\tilde{A}\neq 0$. ゆえに A の最小多項式の次数は n 次以下ではあり得ない．すなわちちょうど n 次である．したがって A が対角化可能であれば，その固有値はすべて相異なる．

これより直ちに次の定理を得る．

定理 1．$a_{ii-1}\neq 0(2\leqq i\leqq n)$ なる n 次 Hessenberg 行列（1）において，A が対角化可能であるための必要十分条件は固有値がすべて相異なることである．

定理 1 は次のようにも述べられる．

定理 2．$a_{ii-1}\neq 0(2\leqq i\leqq n)$ なる n 次 Hessenberg 行列（1）において，A の固有ベクトルが全空間を張るのは，A の固有値が相異なるとき，かつそのときに限る．

2. 三重対角行列への応用

（1）において，特に $a_{ij}=0(j\geqq i+2)$ とすれば，三重対角行列

$$A=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & 0 \\ a_1 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-2} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & & & a_{n-1} & b_n \end{pmatrix} \qquad (2)$$

を得る．これは偏微分方程式を差分近似するときよくあらわれる．

定理 3．三重対角行列（2）において，a_i, c_i はすべて実数で，かつ $a_i c_i>0(1\leqq i\leqq n-1)$ であれば

（i）A の任意の固有値 λ の虚部 $I_m(\lambda)$ は

$$\min_i I_m(b_i)\leqq I_m(\lambda)\leqq \max_i I_m(b_i)$$

をみたす．

（ii）特に $b_i(1\leqq i\leqq n)$ が実数なら，A の固有値はすべて相異なる実数である．

証明．$D=\mathrm{diag}\,\{1, \sqrt{a_1/c_1}, \cdots\cdots, \sqrt{\prod_{i=1}^{n-1}(a_i/c_i)}\,\}$ とおけば

$$D^{-1}AD=\begin{pmatrix} b_1 & \sqrt{a_1c_1} & & & 0 \\ \sqrt{a_1c_1} & b_2 & \sqrt{a_2c_2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \sqrt{a_{n-2}c_{n-2}} & b_{n-1} & \sqrt{a_{n-1}c_{n-1}} \\ 0 & & & \sqrt{a_{n-1}c_{n-1}} & b_n \end{pmatrix}$$

ゆえにもし b_i がすべて実数なら A の固有値は実対称行列 $D^{-1}AD$ の固有値に等しくすべて実数であり，さらに実対称行列は対角行列に相似であるから定理 1 により，それらはすべて相異なる．ゆえに (ii) が成り立つ，また A の任意の固有値 λ に対応する $D^{-1}AD$ の単位固有ベクトル $x={}^t(x_1, x_2, \cdots\cdots, x_n)$ をとれば

* On the Characteristic Roots of Hessenberg Matrices by Tetsuro Yamamoto (Hiroshima University)

** 広島大学教養部

$$D^{-1}ADx=\lambda x,\ {}^t\bar{x}\cdot x=1$$

より

$$\lambda={}^t\bar{x}D^{-1}ADx$$
$$=\sum_{i=1}^{n}b_i|x_i|^2+\sum_{i=1}^{n-1}\sqrt{a_ic_i}\,(\bar{x}_ix_{i+1}+x_i\bar{x}_{i+1})$$

を得る．ところが，$\bar{x}_ix_{i+1}+x_i\bar{x}_{i+1}=\bar{x}_ix_{i+1}+\overline{\bar{x}_ix_{i+1}}$ は実数であるから

$$I_m(\lambda)=I_m(\sum_{i=1}^{n}b_i|x_i|^2)$$

しかも $|x_1|^2+\cdots\cdots+|x_n|^2=1$ だから，上式より (i) が従う．

定理 4．$a_i,\ c_i$ を実数とする三重対角行列 (2) において $a_ic_i<0(1\leqq i\leqq n-1)$ ならば

（i） A の任意の固有値 λ の実部 $R_e(\lambda)$ は

$$\min_i R_e(b_i)\leqq R_e(\lambda)\leqq\max_i R_e(b_i)$$

をみたす．

（ii） 特に $b_i=0(1\leqq i\leqq n)$ なら A の固有値はすべて相異なる純虚数（0も含む）である．

証明．$D=\mathrm{diag}\{1,\ \sqrt{-a_1/c_1},\cdots\cdots,\sqrt{\prod_{i=1}^{n-1}(-a_i/c_i)}\}$ を考えることにより，定理3と全く同様にして証明される．

定理 5．実三重対角行列（2）において

$$a_ic_i>0\ (1\leqq i\leqq n-1)$$
$$b_i>\sqrt{a_{i-1}c_{i-1}}+\sqrt{a_ic_i}\ (1\leqq i\leqq n)$$

（ただし $a_{-1}=c_{-1}=a_n=c_n=0$ とおく）

であれば A の固有値はすべて相異なる正数である．

証明．Gershgorin の定理によって，定理3における $D^{-1}AD$ の任意の固有値 λ は n 個の閉円板

$$|z-b_i|\leqq\sqrt{a_{i-1}c_{i-1}}+\sqrt{a_ic_i}\ \ (i=1,2,\cdots\cdots,n)$$

の少なくとも一つに含まれるから，定理3 (ii) より直ちに定理5を得る．

3. いくつかの注意

注意 1．定理3 (ii) の性質はよく知られていて，通常その証明は

$$f_o(x)=1$$
$$f_k(x)=\begin{vmatrix} x-b_1 & -c_1 & & & 0 \\ -a_1 & x-b_2 & -c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -a_{k-2} & x-b_{k-1} & -c_{k-1} \\ 0 & & & -a_{k-1} & x-b_k \end{vmatrix}\quad(k=1,2\cdots\cdots,n)$$

が Sturm の関数列をなす事実を利用してなされるようである．しかし，単に証明のみならず，いま示した如く定理1の簡単な応用にすぎない．

注意 2．「定理3あるいは4と類似な何らかの性質が Hessenberg 行列の固有値に関して成り立たないものか」とは当然考えられる疑問である．しかし，これは最早や期待できない．なぜならよく知られているように

$$f(x)=x^n+a_1x^{n-1}+\cdots\cdots+a_{n-1}x+a_n$$
$$=\begin{vmatrix} x & & & & a_n \\ -1 & x & & & a_{n-1} \\ & -1 & \ddots & & \vdots \\ & & \ddots & x & a_2 \\ & & & -1 & x+a_1 \end{vmatrix}\qquad(3)$$

すなわち n 次代数方程式 $f(x)=0$ の根は Hessenberg 行列

$$F=\begin{pmatrix} 0 & & & -a_n \\ 1 & 0 & & -a_{n-1} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & 0 & -a_2 \\ & & 1 & -a_1 \end{pmatrix}\qquad(4)$$

の固有値であり，a_i をとりかえることにより，その固有値はどのようにでもなり得るからである．

注意 3．代数方程式の根の限界．

注意2で示した事実によって，代数方程式の根の限界を求める問題は（4）の行列 F の固有値の限界を評価する問題と同値になる．したがって，一般の行列の固有値の限界を与える定理を用いて $f(x)=0$ の根を評価することができる．最も簡単な適用例として

定理 (Cauchy)．（3）で与えられる $f(x)=0$ の任意の根 α は

$$1+\max_{1\leqq i\leqq n}|a_i|\geqq|\alpha|\geqq\frac{|a_n|}{|a_n|+\max_{0\leqq i\leqq n-1}|a_i|}$$

なる範囲にある．ただし $a_0=1$ とする．

証明．α は (4) の固有値だから Gershgorin の定理によって，$|\alpha|\leqq\max_{1\leqq i\leqq n}\{1+|a_i|\}=1+\max_{1\leqq i\leqq n}|a_i|$

また右側の不等式は $a_n=0$ なら明らかだから，$a_n\neq0$ としてよく，このとき $\alpha\neq0$ で $\dfrac{1}{\alpha}$ は

$$g(x)=x^n+(a_{n-1}/a_n)x^{n-1}+\cdots\cdots+(a_1/a_n)x+1/a_n=0$$

の根だから，いま得た結果を適用して

$$\frac{1}{|\alpha|}\leqq1+\max_{0\leqq i\leqq n-1}\frac{|a_i|}{|a_n|}=\frac{|a_n|+\max_{0\leqq i\leqq n-1}|a_i|}{|a_n|}$$

すなわち $|\alpha|\geqq\dfrac{|a_n|}{|a_n|+\max_{0\leqq i\leqq n-1}|a_i|}$

注意 4. 特殊な代数方程式への異乗法解法の適用.

(3) において $f(x)$ の係数 a_i が特別な値をとる場合異乗法解法 (power method) が適用できる. この場合 Newton 法におけるような $f'(x) \neq 0$ の条件や, 初期値の検討などが不要であり, 得られた解の精度も正確に判定できる利点がある.

Case 1. $a_i \leqq 0 (1 \leqq i \leqq n-1)$ かつ $a_n < 0$ の場合

このとき (4) は, 既約な非負行列となるから, Perron-Frobenius の定理によって, (4) における F (したがって $f(x)=0$) は他のすべての固有値 λ_i より小でない正の単根 α をもつ ($|\lambda_i| \leqq \alpha$). もちろんこのとき, $|\lambda_i| = \alpha$, $\lambda_i \neq \alpha$ なる根 λ_i は存在するかも知れないが, 特に存在しないとき primitive 行列と呼ぶ. 簡単な計算によって (あるいは幾何学的考察により), 勝手な正数 $p>0$ につき, $G=F+pE$ (E は n 次単位行列) は primitive 行列となることがわかる. すなわち G の根 $\alpha+p$ は G の他のすべての根 λ_i+p の絶対値より大である ($|\lambda_i+p| < \alpha+p$). この場合定理 2 によって G の固有ベクトルは必らずしも全空間を張らないけれども, 初期ベクトルとして成分がすべて正のものをえらべば, 累乗法解法が適用可能であり, $\alpha+p$ (したがって α) が求まる (その方法については[1] p. 47 参照). なお, このとき各ステップで $\alpha+p$ (したがって α) の存在範囲を丸めの誤差も考慮して正確に評価することができるから, この方法は案外有効である ([3] 参照. そこにおける評価式は, primitive 行列に対してそのまま成り立つ).

Case 2. $a_1>0$, $a_i \leqq 0$ $(2 \leqq i \leqq n-1)$ かつ $a_n<0$ の場合

このときには p を $p>a_1$ なるようにえらんで $G=F+pE$ をつくり, 成分が正の初期ベクトルから出発して同様に累乗法解法を G に適用すれば $f(x)=0$ の最大実根 (実根中最大のもの) が常にえられる.

Case 3. $a_i \geqq 0 (1 \leqq i \leqq n-1)$ かつ $a_n<0$ の場合

このときは, $f(x)=0$ の代りに注意 3 における定理の証明で用いた $g(x)=0$ に対して Case 1 で述べた方法を適用すれば, 絶対値最小の正の単根 α (すなわち $0<\alpha \leqq |\lambda_i|$) を正確に求めることができる. あるいは (4) の逆行列が

$$F^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{a_{n-1}}{a_n} & 1 & & & \\ -\frac{a_{n-2}}{a_n} & 0 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \\ -\frac{a_1}{a_n} & & & 0 & 1 \\ -\frac{1}{a_n} & & & & 0 \end{pmatrix}$$

である事実を利用してもよい.

Case 4. $a_i \geqq 0$ $(1 \leqq i \leqq n-2)$, $a_{n-1}<0$, $a_n<0$ の場合

このとき上記 F^{-1} に Case 2 で述べた方法 (すなわちこの場合 p は $p>\frac{a_{n-1}}{a_n}$ なるようにとる) を適用すれば $f(x)=0$ の最小実根 (の逆数) (実根中最小) がえられる.

参考文献

1) Varga, R.S.: Matrix Iterative Analysis, 1962, Prentice-Hall, Inc.

2) Wielandt, H.: Unzerlegbare, nicht negativen Matrizen, Math. Z. 52 (1950), pp. 642～648

3) 山本哲朗: 要素が正の行列に対する累乗法解法の誤差評価, 情報処理学会講演予稿集 1965, 12., pp. 23～24

(昭和 41 年 10 月 11 日受付)