

大学初年次における数学教材の提案（その 44） ～ ハウスホルダー行列 ～

貴田 研司^{*1}

A Suggestion on Mathematical Materials for Freshman Education Vol.44 ～ Householder Matrix ～

by

Kenshi KIDA^{*1}

(received on Nov. 25, 2022 & accepted on Jan. 11, 2023)

あらまし

本論文においては、固有値の計算方法の一つとして知られるハウスホルダー行列を用いての三重対角化について、具体例を交えながら詳しく解説する。

Abstract

In this paper, we give explanation of an item for eigenvalue analysis. We present specially tridiagonalizations by means of Householder matrices with concrete examples.

キーワード: ハウスホルダー変換, 鏡映, 対称行列, 直交行列, 3 重対角化

Keywords: Householder Transformation, Reflection, Symmetric Matrix, Orthogonal Matrix, Tridiagonalization

1. はじめに

固有値解析の手法の一つとして、ハウスホルダー法（鏡映変換）による行列の三重対角化がある¹⁾。まず三重対角行列は以下のように定義される：

定義（三重対角行列）

正方行列において、対角成分とその上下の成分以外はすべて 0 であるようなものを三重対角行列と呼ぶ。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

与えられた対称行列に行列演算を施し、三重対角行列に変形することを三重対角化と呼ぶ。ここで、任意の対称行列 A に対し、ハウスホルダー行列を用いた変換を繰り返すことにより、 A を三重対角化できることが知られている²⁾。これをハウスホルダー法と呼ぶ。ハウスホルダー法による行列の三重対角化の一つの例³⁾として

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

に対して、ハウスホルダー行列として

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

を選ぶと

^{*1} 理系教育センター 教授

$$H^{-1}AH = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

となることを挙げておく．

本論文では，ハウスホルダー行列の定義と性質について述べ，ハウスホルダー法による行列の三重対角化を簡単な例をあげることによって解説する．

2. ハウスホルダー行列

長さが等しい 2 つの次元ベクトル $x, y \in \mathbb{R}^n$ が与えられたとき， $v = x - y$ とおく．このとき

$$H = I - \frac{2vv^T}{\|v\|^2}$$

を，ハウスホルダー行列という．

定理

- (1) $Hx = y$
- (2) $Hy = x$
- (3) H は対称行列である．
- (4) H は直交行列である．
- (5) H は固有値 1 をもつ．
- (6) H は固有値 -1 をもつ．

(証明)

(1)

$$\begin{aligned} Hx &= x - \frac{2vv^T}{\|v\|^2}x \\ &= x - \frac{2(v^Tx)v}{\|v\|^2} \\ &= x - \frac{2(x^T - y^T)x(x - y)}{\|v\|^2} \\ &= x - \frac{2(\|x\|^2 - x \cdot y)(x - y)}{\|v\|^2} \\ &= \frac{2(\|x\|^2 - x \cdot y)}{\|v\|^2}y + \frac{\|v\|^2 - 2\|x\|^2 + 2x \cdot y}{\|v\|^2}x \\ &= \frac{2(\|x\|^2 - x \cdot y)}{\|v\|^2}y + \frac{\|v\|^2 - 2(\|x\|^2 - x \cdot y)}{\|v\|^2}x \end{aligned}$$

ここで

$$\|v\|^2 = (x^T - y^T)(x - y) = \|x\|^2 + \|y\|^2 - 2x \cdot y$$

であるが, $\|x\| = \|y\|$ だから $\|v\|^2 = 2(\|x\|^2 - x \cdot y)$ と表すことができる.

したがって

$$Hx = y$$

が成り立つ.

(2)

$$\begin{aligned} Hy &= y - \frac{2vv^T}{\|v\|^2}y \\ &= y - \frac{2(v^Ty)v}{\|v\|^2} \\ &= y - \frac{2(x^T - y^T)y(x - y)}{\|v\|^2} \\ &= y - \frac{2(x \cdot y - \|y\|^2)(x - y)}{\|v\|^2} \\ &= \frac{2(\|y\|^2 - x \cdot y)}{\|v\|^2}x + \frac{\|v\|^2 - 2\|y\|^2 + 2x \cdot y}{\|v\|^2}y \\ &= \frac{2(\|y\|^2 - x \cdot y)}{\|v\|^2}x + \frac{\|v\|^2 - 2(\|y\|^2 - x \cdot y)}{\|v\|^2}y \end{aligned}$$

ところが

$$\|v\|^2 = (x^T - y^T)(x - y) = \|x\|^2 + \|y\|^2 - 2x \cdot y$$

であるが, $\|x\| = \|y\|$ だから $\|v\|^2 = 2(\|y\|^2 - x \cdot y)$ と表すことができる.

したがって

$$Hy = x$$

が成り立つ.

(3)

$$H^T = \left(I - \frac{2vv^T}{\|v\|^2} \right)^T = I^T - \frac{2(v^T)^T v^T}{\|v\|^2} = I - \frac{2vv^T}{\|v\|^2} = H$$

であるから, H は対称行列である.

(4) H は対称行列であるから $H^T = H$ である. すると

$$HH^T = H^2$$

$$\begin{aligned}
 &= \left(I - \frac{2vv^T}{\|v\|^2} \right)^2 \\
 &= I - \frac{4vv^T}{\|v\|^2} + \frac{4vv^T vv^T}{\|v\|^4} \\
 &= I - \frac{4vv^T}{\|v\|^2} + \frac{4v\|v\|^2 v^T}{\|v\|^4} \\
 &= I - \frac{4vv^T}{\|v\|^2} + \frac{4vv^T}{\|v\|^2} \\
 &= I
 \end{aligned}$$

であるから、 H は直交行列である。

(5)

$$\begin{aligned}
 H(x+y) &= (x+y) - \frac{2vv^T}{\|v\|^2}(x+y) \\
 &= (x+y) - \frac{2v(x-y)^T}{\|v\|^2}(x+y) \\
 &= (x+y) - \frac{2v(x^T - y^T)(x+y)}{\|v\|^2} \\
 &= (x+y) - \frac{2v(x^T x + x^T y - y^T x - y^T y)}{\|v\|^2} \\
 &= (x+y) - \frac{2v\{\|x\|^2 + x \cdot y - y \cdot x - \|y\|^2\}}{\|v\|^2} \\
 &= (x+y)
 \end{aligned}$$

であるから、 H は固有値1をもつ。

(6)

$$\begin{aligned}
 Hv &= v - \frac{2vv^T}{\|v\|^2}v \\
 &= v - \frac{2v\|v\|^2}{\|v\|^2} \\
 &= v - 2v \\
 &= -v
 \end{aligned}$$

であるから、 H は固有値-1をもつ。

(証明終)

3. 三重対角化

例題

ハウスホルダー行列を用いて

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 4 & 3 \\ 4 & 4 & 2 \\ 3 & 2 & -5 \end{pmatrix}$$

を三重対角化せよ.

(解答)

行列 A の $(3,1)$ 成分が0となるようにしたい.

$$s = \sqrt{a_{21}^2 + a_{31}^2} = \sqrt{4^2 + 3^2} = 5,$$

$\mathbf{x}, \mathbf{y}$ を

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} a_{11} \\ -s \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -5 \\ 0 \end{pmatrix}$$

と定義すると, $\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{y}\|$ となる. このとき

$$\mathbf{v} = \mathbf{x} - \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 5 \\ -5 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 9 \\ 3 \end{pmatrix},$$

$$\|\mathbf{v}\|^2 = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 = 0^2 + 9^2 + 3^2 = 90$$

となっている.

変換行列 (ハウスホルダー行列) を計算する.

$$\begin{aligned} H &= I - \frac{2\mathbf{v}\mathbf{v}^T}{\|\mathbf{v}\|^2} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{2}{90} \begin{pmatrix} 0 \\ 9 \\ 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 9 & 3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 3 \\ 0 & 3 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \\ 0 & -\frac{3}{5} & \frac{4}{5} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

したがって

$$B = HAH$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \\ 0 & -\frac{3}{5} & \frac{4}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 4 & 3 \\ 4 & 4 & 2 \\ 3 & 2 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \\ 0 & -\frac{3}{5} & \frac{4}{5} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 5 & -5 & 0 \\ -5 & -\frac{76}{5} & \frac{94}{5} \\ 0 & \frac{94}{5} & -\frac{92}{5} \end{pmatrix}$$

（解答終）

この例題は 3 次行列であるためにハウスホルダー行列 1 つの変換で三重対角化を完了できた．4 次行列以上の場合，同様の操作を繰り返していくことになるが，そのアルゴリズムについては他の書物¹⁾⁴⁾を参照されたい．

参考文献

- 1) 神谷紀生・北栄輔「計算による線形代数」共立出版，1999
- 2) <https://mathwords.net/householder> 「具体例で学ぶ数学 ハウスホルダー行列とその応用」
- 3) ギルバート・ストラング著，山口昌哉也哉監訳，井上昭訳「線形代数とその応用」産業図書，1978
- 4) 日本計算工学会編集「固有値計算と特異値計算」日本計算工学会，2019