(Tip-５) 固有値問題の解法（Jacob 法）

最も簡単で分かり易く、且つ固有値と固有ベクトルが同時に求められる。次元の低い場合に他の方法より有効である。しかし、次元が高くなると収斂に長時間要するか、収斂しない。

一般論として、対称行列 A に対し適当な直交行列 P により P^tAP を対角行列とする事ができる。

$$A=\begin{bmatrix} a & c \\ c & b \end{bmatrix} \qquad P=\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

として、P^tAP を求めると、対角部以外の要素は

$$(b-a)\sin 2\theta + 2c\cos 2\theta = 0$$

$$\tan 2\theta = c/(a-b) \qquad \therefore\ \theta = 1/2\ \tan^{-1}(c/(a-b))$$

或いは、A の固有値を λ_+、λ_-（$\lambda_+ > \lambda_-$）とすると

$$\theta = \tan^{-1}((\lambda_+ - a)/c))$$

θ をこのようにとると、A の固有値は P^tAP、固有ベクトルは P となる。
多次元対称行列 $A(a_{ij})$の場合、非対角要素の絶対値最大のものが a_{pq} である時、直交行列 P として、対角部は、要素(p,p)＝$\cos\theta$、要素(q,q)＝$\cos\theta$ とする以外はすべて１、非対角部は、要素(p,q)＝－$\sin\theta$、要素(q,p)＝$\sin\theta$ とする以外はすべて 0、とすると、上と同様に P^tAP の要素(p,q)が 0 となるためには、

$$\theta = 1/2\ \tan^{-1}(a_{pq}/(a_{pp} - a_{qq})) = \tan^{-1}(((\lambda_+ - a_{pp})/a_{pq})$$

この θ を代入した P を用い、P^tAP を求める。これを１回目の操作として、$P_1{}^tA_1P_1$ と表すと

$$A_2 = P_1{}^tA_1P_1$$

この A_2 を、上で述べた A とみなし同様の操作を繰り返すと、ｋ回目の操作後は

$$A_{k+1} = P_k{}^tA_kP_k$$
$$= (P_k{}^tP_{k-1}{}^t\text{-----}P_2{}^tP_1{}^t)A(P_1P_2\text{-----}P_{k-1}P_k)$$
$$\equiv P^t AP$$

A_k のすべての非対角要素が 0 に収斂すれば、その時の A_k の対角要素が A の固有値、P が固有ベクトルとなる。

＜収斂判定＞

k 回目の操作後の行列 $A_k = \left(a_{ij}^k\right)$ の絶対値最大要素を a_{pq}^k、k-1 回目の絶対値最大要素を a_{rs}^{k-1} とする時、収斂判定条件を以下のように取る。

$$a_{pq}^k < 10^{-6} \qquad \text{但し、} \left|a_{pq}^k\right| \ge \left|a_{rs}^{k-1}\right|$$