2.8 行列要素のバランス処理

これは，行列内の要素数値間で絶対値のレベル差を小さくする処理を言います．

要素数値間で絶対値のレベル差が大きいと固有値計算の誤差も大きくなる傾向があります．本プログラムでは，回転変換による対角要素のバランス処理を用意しており，下記に計算方法を説明します．

まず，対角要素間で，2 つの要素数値の差が最大のものを探索します．次に，その 2 要素の数値を等しくするように回転変換を行います．この操作を繰り返して，対角要素間のレベル差を低減します．

回転変換は，**2.3 ヤコビ法**で説明したものと同様です．ただし，バランス処理では，2 つの対角要素の値を等しくするように変換します．したがって，**（**2.13**）式**における 2 つの対角要素の値を等しくおくと次式となります．

$$\begin{aligned} & a_{11}\cos^2\theta + 2a_{12}\sin\theta\cos\theta + a_{22}\sin^2\theta \\ & = a_{11}\sin^2\theta - 2a_{12}\sin\theta\cos\theta + a_{22}\cos^2\theta \end{aligned} \tag{2.26}$$

$$\therefore (a_{11}-a_{22})\sin^2\theta - 4a_{12}\sin\theta\cos\theta - (a_{11}-a_{22})\cos^2\theta = 0 \tag{2.27}$$

両辺を $\cos^2\theta$ で割って $\tan\theta$ に書き直すと次のようになります．

$$(a_{11}-a_{22})\tan^2\theta - 4a_{12}\tan\theta - (a_{11}-a_{22}) = 0 \tag{2.28}$$

$$\therefore \tan\theta = \frac{2a_{12} \pm \sqrt{4{a_{12}}^2 + (a_{11}-a_{22})^2}}{a_{11}-a_{22}} \tag{2.29}$$

ここで，（2.29）式の分子の±については，＋を採用することにします（いずれを採用しても可）．そして，（2.29）式の $\tan\theta$ から，（2.17）式，（2.18）式により $\cos\theta, \sin\theta$ を算出します．後はヤコビ法と同様に，変換行列 $\mathbf{R}$ を作成して $\mathbf{R}^{\mathrm{T}}\mathbf{AR}$ の行列演算を行います．

注）上記を修正した改訂版ソフトを算生会のホームページで提供しています．