

No.5 対称行列の対角化

この回のゴール

- 実対称行列の固有値はすべて実数であることを示せる。
- 実対称行列の異なる固有値に対する固有ベクトルは直交することを示せる。
- 実対称行列を直交行列で対角化できる。
- 2 次形式を標準形に直し、2 次曲線の形を判定できる。

この回では、 $\mathbb{R}^n$ に標準内積を入れて考える。成分が実数の対称行列 (${}^tA = A$) を**実対称行列**という。

■ 1. 対称行列の基本性質

まず、対称行列と内積の関係を見ておく。

定理 1

A が実対称行列なら、すべての $x, y \in \mathbb{R}^n$ について

$$(Ax, y) = (x, Ay).$$

【証明】 $(Ax, y) = {}^t(Ax)y = {}^tx {}^tAy = {}^txAy = (x, Ay)$. □

定理 2 固有値は実数

実対称行列の固有値は（複素数の範囲で考えても）すべて実数である。

【証明】 複素数 $z = a + bi$ の共役を $\bar{z} = a - bi$ と書く。 $z\bar{z} = a^2 + b^2 = |z|^2 \geq 0$ で、 z が実数 $\iff z = \bar{z}$ である（分野「複素関数論」第 1 章 No.1）。

λ を A の（複素数の）固有値、 $v = {}^t(v_1, \dots, v_n)$ （成分は複素数、 $v \neq 0$ ）を固有ベクトルとする。 $\bar{v} = {}^t(\bar{v}_1, \dots, \bar{v}_n)$ とおき、数 ${}^t\bar{v}Av$ を 2 通りに計算する。

- $Av = \lambda v$ より、 ${}^t\bar{v}Av = \lambda {}^t\bar{v}v$.
- A の成分は実数なので、 $Av = \lambda v$ の両辺の共役をとると $A\bar{v} = \bar{\lambda}\bar{v}$. ${}^tA = A$ を使うと ${}^t\bar{v}Av = {}^t(A\bar{v})v = \bar{\lambda} {}^t\bar{v}v$.

よって $(\lambda - \bar{\lambda}) {}^t\bar{v}v = 0$. ${}^t\bar{v}v = |v_1|^2 + \dots + |v_n|^2 > 0$ なので $\lambda = \bar{\lambda}$, つまり λ は実数. □

注意

一般の実行列は、回転行列のように実数の固有値をもたないことがある（第 6 章 No.2 例 2）。対称行列ではそのようなことが起こらず、固有多項式はいつも実数の範囲で 1 次式の積に分解する。

定理 3 異なる固有値の固有ベクトルは直交する

A を実対称行列とする。 $\lambda \neq \mu$ を固有値、 u, v をそれぞれの固有ベクトルとすると、 $(u, v) = 0$.

【証明】 定理 1 より $\lambda(u, v) = (Au, v) = (u, Av) = \mu(u, v)$. $(\lambda - \mu)(u, v) = 0$ で、 $\lambda \neq \mu$ なので $(u, v) = 0$. □

例 1

$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ の固有ベクトル $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ (固有値 3) と $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ (固有値 -1) は確かに直交している.

一方, 対称でない $\begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$ の固有ベクトル $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$ は直交していない (内積 -1).

■ 2. 直交行列による対角化

定理 4 実対称行列の対角化

A を n 次実対称行列とする. 適当な直交行列 Q をとると

$${}^tQAQ = Q^{-1}AQ = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

($\lambda_1, \dots, \lambda_n$ は A の固有値) と対角化できる. 逆に, 直交行列で対角化できる行列は対称行列である.

【証明】 n に関する帰納法. $n = 1$ は明らか. $n - 1$ 次で正しいとする.

代数学の基本定理により, 固有多項式 $\varphi_A(\lambda)$ は複素数の範囲で根 λ_1 をもつ. 定理 2 よりその根は実数である. $A - \lambda_1 E$ は成分が実数で正則でない行列なので, $(A - \lambda_1 E)\mathbf{x} = \mathbf{0}$ は成分が実数の自明でない解をもつ (掃き出し法は実数の範囲で計算できる). この固有ベクトルを正規化したものを $\mathbf{u}_1$ とする. $\mathbf{u}_1$ を含む $\mathbb{R}^n$ の正規直交基底 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$ をとり (基底に延長してからグラム・シュミットの直交化法), $Q_1 = (\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n)$ とする. ${}^tQ_1AQ_1$ の (i, j) 成分は ${}^t\mathbf{u}_iA\mathbf{u}_j = (\mathbf{u}_i, A\mathbf{u}_j)$ である.

- 第 1 列: $(\mathbf{u}_i, A\mathbf{u}_1) = \lambda_1(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_1) = \lambda_1\delta_{i1}$.
- ${}^tQ_1AQ_1$ は対称行列 (${}^t({}^tQ_1AQ_1) = {}^tQ_1{}^tAQ_1 = {}^tQ_1AQ_1$) なので, 第 1 行も $(\lambda_1, 0, \dots, 0)$.

よって ${}^tQ_1AQ_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & A' \end{pmatrix}$ で, A' は $n - 1$ 次実対称行列. 帰納法の仮定より $n - 1$ 次直交行列 Q' で

${}^tQ'A'Q'$ が対角行列になる. $Q = Q_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q' \end{pmatrix}$ は直交行列の積なので直交行列で (No.2 定理 5), ${}^tQAQ$ は対角行列になる.

逆: ${}^tQAQ = D$ なら $A = QD{}^tQ$ で, ${}^tA = Q{}^tD{}^tQ = QD{}^tQ = A$. □

手順

1. 固有値を求める (すべて実数になる).
2. 各固有値について固有空間の基底を求め, **固有空間ごとに**グラム・シュミットの直交化法で正規直交基底にする.
3. それらを並べて Q を作る. 異なる固有空間のベクトルどうしは定理 3 より自動的に直交している.

固有値がすべて単根なら, 各固有ベクトルを正規化するだけでよい.

例題 1

$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ を直交行列で対角化せよ.

【解答】 固有値 3, -1, 固有ベクトル ${}^t(1, 1)$, ${}^t(1, -1)$ を正規化して並べる.

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad {}^tQAQ = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

(第 6 章 No.3 の P を正規化したものである. 逆行列が転置で求まるのが利点.)

例題 2 固有値が重複する場合

$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ を直交行列で対角化せよ.

【解答】 第 6 章 No.2 例題 2 より, 固有値は 4 と 1 (2 重) で, $W(4) = \langle {}^t(1, 1, 1) \rangle$, $W(1) = \langle {}^t(-1, 1, 0), {}^t(-1, 0, 1) \rangle$.

$W(4)$: 正規化して $\mathbf{q}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} {}^t(1, 1, 1)$.

$W(1)$: 基底 ${}^t(-1, 1, 0)$, ${}^t(-1, 0, 1)$ は直交していないので, グラム・シュミットの直交化法を使う. No.3 例題 2 で計算したとおり $\mathbf{q}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} {}^t(-1, 1, 0)$, $\mathbf{q}_3 = \frac{1}{\sqrt{6}} {}^t(-1, -1, 2)$.

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}, \quad {}^tQAQ = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

注意

第 6 章 No.3 例題 2 の P は, $W(1)$ の 2 本が直交していなかったため直交行列ではなかった. 固有空間の中でグラム・シュミットの直交化法を行うのは, このためである.

■ 3. 2 次形式

定義 1 2 次形式

実対称行列 A を用いて $q(\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, A\mathbf{x}) = {}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}$ と表される式を **2 次形式** という. たとえば $\mathbf{x} = {}^t(x, y)$, $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ なら $q(\mathbf{x}) = ax^2 + 2bxy + cy^2$.

定理 5 2 次形式の標準形

${}^tQAQ = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ となる直交行列 Q をとり, $\mathbf{x} = Q\mathbf{X}$ と変数を変換すると

$$q(\mathbf{x}) = \lambda_1 X_1^2 + \lambda_2 X_2^2 + \dots + \lambda_n X_n^2.$$

【証明】 ${}^t\mathbf{x}A\mathbf{x} = {}^t(Q\mathbf{X})AQ\mathbf{X} = {}^t\mathbf{X}({}^tQAQ)\mathbf{X} = \sum \lambda_i X_i^2$. □

Q は直交行列なので, $\mathbf{x} = Q\mathbf{X}$ は「座標軸を回転 (または折り返し) する」変換であり, 図形の形や大きさは変わらない.

例題 3

曲線 $5x^2 + 4xy + 2y^2 = 6$ はどのような図形か.

【解答】 $A = \begin{pmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$, $\varphi_A = \lambda^2 - 7\lambda + 6 = (\lambda - 6)(\lambda - 1)$. 固有ベクトルは ${}^t(2, 1)$ (固有値 6), ${}^t(-1, 2)$ (固有値 1). $Q = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ ($\det Q = 1$ で回転) として ${}^t(x, y) = Q{}^t(X, Y)$ とおくと

$$6X^2 + Y^2 = 6, \quad \text{つまり} \quad X^2 + \frac{Y^2}{6} = 1.$$

これは楕円で, X 軸 (${}^t(2, 1)$ 方向) の半径 1, Y 軸 (${}^t(-1, 2)$ 方向) の半径 $\sqrt{6}$ である.

コラム: 正定値と極値問題

すべての $x \neq 0$ で ${}^t x A x > 0$ となる対称行列 A を**正定値**という. 定理 5 より, A が正定値 $\iff A$ の固有値がすべて正 (練習問題 5). 2 変数関数の極値を判定するとき, 停留点 (偏導関数がすべて 0 になる点) において, 2 階偏導関数を並べた行列 (ヘッセ行列) が正定値なら, その点は狭義の極小点になる (分野「微分積分」第 3 章 No.5). その背景にあるのが, この 2 次形式の理論である.

■ 練習問題

1. 次の対称行列を直交行列で対角化せよ.

$$(1) \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \quad (2) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

2. 曲線 $x^2 + 4xy + y^2 = 3$ はどのような図形か.

3. 実対称行列 A が $A^2 = O$ を満たすならば, $A = O$ であることを示せ.

4. 実対称行列 A を対角化する直交行列 Q は, A^k (k は自然数) も対角化することを示せ.

5. 実対称行列 A について, A が正定値 $\iff A$ の固有値がすべて正, を示せ.

6. (考えてみよう) $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ はそれぞれ正定値か. $2x^2 + 2xy + 2y^2$ と $x^2 + 4xy + y^2$ の値の符号と結びつけて説明せよ.

■ 練習問題の解答

1. (1) 固有値 3 (固有ベクトル ${}^t(1, 1)$), 1 (${}^t(1, -1)$). $Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, ${}^tQ A Q = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.
 (2) 例題 2 の行列を B とすると $A = B - 2E$. $B\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ なら $A\mathbf{v} = (\lambda - 2)\mathbf{v}$ なので, 固有ベクトルは例題 2 と同じで, 固有値は 2 ずつ小さくなる ($4 \rightarrow 2$, $1 \rightarrow -1$). 例題 2 の Q を使って ${}^tQ A Q = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$.
2. $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ で, 例題 1 より固有値 3, -1. $Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ で変換すると $3X^2 - Y^2 = 3$, つまり $X^2 - \frac{Y^2}{3} = 1$. 双曲線である (X 軸は ${}^t(1, 1)$ 方向).
3. 直交行列で $A = QD^tQ$ とすると $A^2 = QD^2{}^tQ = O$ より $D^2 = O$. D は対角行列なので $D = O$, よって $A = O$.
4. ${}^tQ A Q = D$ なら ${}^tQ A^k Q = ({}^tQ A Q)^k = D^k$ (間の $Q^tQ = E$ が消える) で, D^k は対角行列.
5. 定理 5 より ${}^t\mathbf{x} A \mathbf{x} = \sum \lambda_i X_i^2$ ($\mathbf{x} = Q\mathbf{X}$). Q は正則なので $\mathbf{x} \neq \mathbf{0} \iff \mathbf{X} \neq \mathbf{0}$. すべての $\lambda_i > 0$ なら $\mathbf{X} \neq \mathbf{0}$ で $\sum \lambda_i X_i^2 > 0$. 逆に, ある $\lambda_j \leq 0$ なら $\mathbf{X} = \mathbf{e}_j$ で $\lambda_j \leq 0$ となり正定値でない.
6. $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ は固有値 3, 1 で正定値. 実際 $2x^2 + 2xy + 2y^2 = x^2 + y^2 + (x+y)^2 > 0$ ($\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$). $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ は固有値 3, -1 で正定値でない. 実際 $x = 1, y = -1$ で $x^2 + 4xy + y^2 = -2 < 0$.