実数 (real number) の集合は $\mathbb{R}$ で表し、複素数 (complex number) の集合は $\mathbb{C}$ を用いました。行列を対角化できるとさまざまな数値の処理が簡単にできます。ただし一般に与えられた行列がすべて対角化できるとは限りませんし、その変換を求めるにはどうしたらよいでしょうか？

行列の大きさを $m \times n$ 型の行列とします。

$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$ とするとき、転置共役行列 (transpose & conjugate) を $A^* = \begin{pmatrix} \overline{a_{11}} & \cdots & \overline{a_{m1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \overline{a_{1n}} & \cdots & \overline{a_{mn}} \end{pmatrix}$ とします。A は $m \times n$ 型で、 $A^* = (\overline{A})^\mathsf{T} = \overline{A^\mathsf{T}}$ は $n \times m$ 型行列で (LA20-Kadai62.pdf で用いました) です。転置行列や対称行列、また内積の計算を実数 $\mathbb{R}$ から複素数 $\mathbb{C}$ に拡張したのです。エルミート (Hermite, Hermitian), ユニタリー (unitary) も対称、直交の拡張する名称でした。この節では、おもに正方行列を議論します。

性質 A：n 次正方行列とする.

(i) 内積の順序をかえると、 $(A\vec{x}, \vec{y}) = (\vec{x}, A^*\vec{y})$

(ii) ノルム（大きさ）が変わらない： $|A\vec{x}| = |A^*\vec{x}|$

(iii) $A = (\vec{a_1}, \vec{a_2}, \cdots, \vec{a_n})$ (n 個の列ベクトル) がユニタリー行列 $\Leftrightarrow$ $\{\vec{a_1}, \vec{a_2}, \cdots, \vec{a_n}\}$ が正規直交基底

1　対称行列、エルミート行列、直交行列、ユニタリー行列

もし与えられた行列が対称行列（symmetrix）であれば、直交行列で対角化できます。またエルミート行列であれば、A が正規行列 (normal matrix) $AA^* = A^*A$ (もし $\mathbb{R}$ であれば、 $AA^\mathsf{T} = A^\mathsf{T}A$)。対角行列 Σ として

$$U^*AU = \Sigma = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

例 エルミート行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$ では, $\psi_A(x) = \det \begin{vmatrix} 1-x & i \\ -i & 1-x \end{vmatrix} = (1-x)^2 - (-i)i = x^2 - 2x = x(x-2)$ より、(i) $\lambda_1 = 0$ に対して、$\begin{pmatrix} 1-\lambda_1 & i \\ -i & 1-\lambda_1 \end{pmatrix} \vec{x_1} = \vec{0}$ を解くと、$\vec{x_1} \in < \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} >$, これを正規化すると $\vec{x_1} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ となる。同様に (ii) $\lambda_2 = 2$ に対して、$\begin{pmatrix} 1-\lambda_2 & i \\ -i & 1-\lambda_2 \end{pmatrix} \vec{x_2} = \vec{0}$ を解くと、$\vec{x_2} \in < \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} >$, これを正規化すると $\vec{x_2} = \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ となる。ユニタリー行列 $U = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \dfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}$ から

$$U^* \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} U = U^*AU = \Sigma = \mathrm{diag}(0, 2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

性質 実数 $\mathbb{R}$ における対称行列について

(i)　固有値は実数である。

(ii)　異なる固有値に対して、対応する固有ベクトルは直交する。

(iii)　直交行列で対角化できる。すなわち対称行列 A はある直交行列 P で、対角行列 $\Sigma = P^\mathsf{T}AP$ とできる。

【証明】 (i) 固有値 λ, その固有ベクトル $\vec{x}$ とするとき、『λ が実数』 $\Leftrightarrow$ 『共役が変わらない：$\overline{\lambda} = \lambda$』を示せばよい。仮定から、$A\vec{x} = \lambda\vec{x} \cdots$ ① をもちいて、内積 $(A\vec{x}, \vec{x})$ を計算し、対称性 $A^\mathsf{T} = A$ から、$(A\vec{x}, \vec{x}) = (\vec{x}, A^\mathsf{T}\vec{x}) = (\vec{x}, A\vec{x}) \cdots$ ② を得る。ここで式 ①より、$(\vec{x}, A\vec{x}) = (\vec{x}, \lambda\vec{x}) = \overline{\lambda}(\vec{x}, \vec{x})$ となることからこの結果で、$(\lambda\vec{x}, \vec{x}) = \overline{\lambda}(\vec{x}, \vec{x})$ の関係が得られ、λ は実数である。

(ii) 固有値 λ_i に対して、固有ベクトルを $\vec{x_i}$ $(i = 1, 2)$ として、$\lambda_1 \neq \lambda_2 \cdots$ ① を仮定する。このとき、内積 $(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = 0$ を示せばよい。そのために $(A\vec{x}_1, \vec{x}_2) = (\vec{x}_1, A^\mathsf{T}\vec{x}_2) = (\vec{x}_1, A\vec{x}_2)$ であるから、$(A\vec{x}_1, \vec{x}_2) =$

$(\lambda_1\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \lambda_1(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\cdots$②。また $(\vec{x}_1, A\vec{x}_2) = (\vec{x}_1, \lambda_2\vec{x}_2) = \overline{\lambda_2}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \lambda_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2)\cdots$③ となる。ここで、固有値は実数であることをもちいている。 式 ②, 式③を比較すれば、$(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = 0$ が得られる。(iii) は略。(終)

☆実数 $\mathbb{R}$ であると $(A\vec{x}, \vec{y}) = (\vec{x}, A^{\mathsf{T}}\vec{y})$ であるが、複素数 $\mathbb{C}$ では、共役転置 $A^* = (\overline{A})^{\mathsf{T}} = \overline{(A^{\mathsf{T}})}$ をもちいた $(A\vec{x}, \vec{y}) = (\vec{x}, A^*\vec{y})$ となる。

例 対称行列 A について、互いに直交する固有ベクトルを定めよ。

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

☆固有ベクトルは一つに定まるとは限らない！

【解】

固有値を定めるために $\psi_A(\lambda) = \det|A - \lambda E| = \begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 & -1 \\ 1 & 1-\lambda & 1 \\ -1 & 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3 + 3\lambda^2 - 4 = -(\lambda-2)^2(\lambda+1)$

よって (固有値, 重複度) は Case (i)：$(\lambda_1, n_1) = (-1, 1)$, Case (ii)：$(\lambda_2, n_2) = (2, 2)$ となり、つぎは λ を代入した変数 $\vec{x}_\lambda$ の連立方程式 $(A - \lambda E)\vec{x}_\lambda = \vec{0}$ を解く。$\begin{pmatrix} 1-\lambda_i & 1 & -1 \\ 1 & 1-\lambda_i & 1 \\ -1 & 1 & 1-\lambda_i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_{i1} \\ x_{i2} \\ x_{i3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ を解いて、

Case (i) $i = 1$: $\Rightarrow \vec{x}_1 \in < \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} >$ Case (ii) $i = 2$: $\Rightarrow \vec{x}_2 \in < \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} >$

すなわちベクトル（第１項が生成）と平面（第２と第３項が生成）が直交する（$\perp$）ことがわかる。部分空間が２個で、次元の和が $1 + 2 = 3$ 次元。$< \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} > \perp < \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} >$ であり、定理が成り立っている。３個の直交ベクトルをつくるには、１，２個目はそのままにして（既に直交)、３個目のベクトルを $c_1 = 1, c_2 = 2$ として、$c_1\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + c_2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ とすれば、直交行列が $P = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$ が得られる。$P^{\mathsf{T}}AP = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$

2　２次形式

既に直交行列やユニタリー行列の性質は対称行列の対角化でもちいてきた。この節では、応用の一つとして、２次形式を述べる。

反比例の式 $xy = c$ は軸の回転で双曲線 $\dfrac{x^2}{a^2} \pm \dfrac{y^2}{b^2} = 1$ に変換できることは、図を描くことから理解できる。

前節では対称行列が変換によって対角化できることを述べたが、この応用として、双曲線、楕円などの２次形式とよぶ多項式の形が、分類をすることができる。

http://www.math.s.chiba-u.ac.jp/~yasuda/Chiba/Lec/senkei23U8.pdf

２次形式とは $f(x, y) = ax^2 + bxy + cy^2 + dx + ey + f$ の形をいい、とくに２次式のみからなるものをさすことが多い。平行移動によって、同時式のみに制限しても一般性を失わないから。ベクトル、行列の積をもちいて $f(x, y) = ax^2 + bxy + cy^2 = (x, y)\begin{pmatrix} a & b/2 \\ b/2 & c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ と書け、係数部分には対称行列がもちいられる。対称行列は直交行列による変換により、対角化できたから、$(x, y) \mapsto (u, v)$ により、$\phi(u, v) = Au^2 + Bv^2 = (u, v)\begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ とすることができる。

例（課題として）

(1) $f(x, y) = 2x^2 - 2xy + 2y^2 = (x, y)\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ を $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$ を直交行列 $P =$

$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ をもちい、$\phi(u,v) = u^2 + 3v^2$ とできる。すなわち楕円の方程式の形である。これを固有値、固有ベクトルが $\lambda_1 = 1, \vec{x}_1 \in< \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} >, \lambda_2 = 3, \vec{x}_2 \in< \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} >$ と求められることを確かめよ。

(2) より高次の方程式であるが、$f(x,y,z,w) = 2x^2+2y^2+z^2+w^2-2xy = (x,y,z,w) \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{pmatrix}$ を直交行列 P をもちい、$\phi(u,v,s,t) = 3u^2 + v^2 + s^2 + t^2$ とできることを確かめよ。4次であるが、ブロックに分ければ、前問 (1) が用いられる。この P を求めよ。すなわち結論はほぼ明らか。

(3)　$f(x,y) = 2x^2 - 2\sqrt{3}xy$ が変換によって $\phi(u,v) = -u^2 + 3v^2$ となる変換を考えよ。

3　特異値分解

工学の分野でよくもちいられる特異値分解とは、『任意の $m \times n$ 型複素数行列 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ は

$$A = U\Sigma V^*$$

の形に表される』。ここで ユニタリー正方行列 $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$、$V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ で、$*$ は共役転置。$m \times n$ 型対角行列 $\Sigma = \begin{pmatrix} \tilde{\Sigma} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{m\times n}$, 正方対角行列 $\tilde{\Sigma} = \mathrm{diag}(\sigma_1, \cdots, \sigma_r)$, $r = rank(A)$.

4　色々な分野の行列

- ネットワーク解析
- 巡回セールスマン問題、 ゲーム理論（ミニマックス定理)、線形計画法
- 数理統計学、多変量データ解析、主成分分析、最小２乗法
- 線形制御（システム）問題、線形連立微分方程式
- 線形作用素、ベクトル解析