固有値・固有ベクトルの応用 1

数理工学 第 7 回

小林 健/ Ken Kobayashi

東京科学大 工学院 経営工学系

2025 年 10 月 27 日

目次

目次

2 次形式

定義 (2 次形式)

n 次実対称行列 A に対して

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} \quad (\forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n)$$

と定義される関数 $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ を **2 次形式 (quadratic form)** という．

$\boxed{\text{例}}$ $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -1 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \end{pmatrix}$ とした場合の 2 次形式は

$$\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -1 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 2x_1^2 + 3x_2^2 + 4x_3^2 - 2x_1x_2 + 2x_1x_3.$$

2 次形式における対称行列の仮定

注意

2 次形式 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$ における行列 A は対称行列であるとして一般性を失わない.

A が対称行列でない場合,

- $A' = \dfrac{1}{2}(A + A^T)$ とすると A' は対称行列.
- A' での 2 次形式を考えると,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}^T A' \boldsymbol{x} &= \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} + \boldsymbol{x}^T A^T \boldsymbol{x}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} + (\boldsymbol{x}^T A^T \boldsymbol{x})^T\right) \qquad (\because \text{スカラーは転置しても同じ}) \\ &= \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}. \end{aligned}$$

- よって任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対し, $\boldsymbol{x}^T A' \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$ であるから,
  2 次形式を考える際には対称行列と仮定してよい.

半正定値行列, 正定値行列

定義 (半正定値行列, 正定値行列)

n 次実対称行列 A に対して,

- 任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} \geq 0$ であるとき，A を**半正定値行列**という．
- 任意の $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ に対して $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} > 0$ であるとき, A を**正定値行列**という.

半正定値/正定値行列をそれぞれ英語で **positive semidefinite/definite matrix** という．

$\rightsquigarrow$ 定義より正定値行列は半正定値行列である

例 $A = \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 4 \end{pmatrix}$ とする. このとき

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 2x_1^2 + 4x_2^2 - 2\sqrt{3}x_1x_2$$

$$= \left(x_1 - \sqrt{3}x_2\right)^2 + x_1^2 + x_2^2 > 0 \quad (\forall (x_1, x_2)^T \neq \boldsymbol{0}).$$

よって A は正定値行列であり, 半正定値行列でもある.

半正定値行列·正定値行列の性質

定理 (固有値に基づく半正定値行列·正定値行列の特徴づけ)

A を n 次実対称行列とする．このとき

- A が半正定値行列 $\iff$ A の全ての固有値が非負である．
- A が正定値行列 $\iff$ A の全ての固有値が正である．

証明

- n 次実対称行列 A の固有値を $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n \in \mathbb{R}$,
  それぞれに対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_n \in \mathbb{R}^n$ とする．
- A は直交行列で対角化可能であるため，
  固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_n$ は $\mathbb{R}^n$ の正規直交基底としてとれる.
- よって任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ は $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n \in \mathbb{R}$ を用いて次のように表せる:

$$\boldsymbol{x} = \alpha_1 \boldsymbol{p}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{p}_2 + \cdots + \alpha_n \boldsymbol{p}_n = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{p}_i.$$

- このとき $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$ を計算すると

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} &= \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{p}_i\right)^T A \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{p}_i\right) \\
&= \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{p}_i\right)^T \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i A \boldsymbol{p}_i\right) \\
&= \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{p}_i\right)^T \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \lambda_i \boldsymbol{p}_i\right) && (\because A\boldsymbol{p}_i = \lambda_i \boldsymbol{p}_i) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \alpha_i^2 = \lambda_1 \alpha_1^2 + \lambda_2 \alpha_2^2 + \cdots + \lambda_n \alpha_n^2. && (\because \boldsymbol{p}_1, \ldots, \boldsymbol{p}_n \text{ は正規直交基底})
\end{aligned}$$

- したがって，

任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} \geq 0 \iff \lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n \geq 0$,

任意の $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ に対して $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} > 0 \iff \lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n > 0$

が成り立つ． □

半正定値行列，正定値行列の性質

命題 (半正定値行列·正定値行列になる行列)

行列 P を適当なサイズの実行列とする．このとき，$P^T P$ は半正定値行列である．
特に P が正則ならば $P^T P$ は正定値行列である．

証明　ベクトル $\boldsymbol{x}$ を任意にとる．

- このとき

$$\boldsymbol{x}^T P^T P\boldsymbol{x} = (P\boldsymbol{x})^T (P\boldsymbol{x}) = \|P\boldsymbol{x}\|^2 \geq 0$$

  であり $P^T P$ は半正定値行列である．
- また P が正則のとき $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0} \implies P\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ より，任意の $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ で $\boldsymbol{x}^T P^T P\boldsymbol{x} > 0$.
  よって $P^T P$ は正定値行列である． □

半正定値行列の平方根

定理 (半正定値·正定値行列の平方根)

A を n 次実対称行列とする．このとき，

- A が半正定値行列 $\Longrightarrow$ $A = B^2$ となる半正定値行列 B が存在．
- A が正定値行列 $\Longrightarrow$ $A = B^2$ となる正定値行列 B が存在．

証明 B を具体的に構成して示す．

- 半正定値行列 A の固有値を $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n \geq 0$ とし，固有値を対角成分に並べた行列を

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

とする．このとき直交行列 P を用いて $A = P\Lambda P^T$ と表せる．

- 対角行列 $\Lambda^{\frac{1}{2}}$ を次のように定義する:

$$\Lambda^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{\lambda_n} \end{pmatrix}$$

- このとき, $B = P\Lambda^{\frac{1}{2}}P^T$ と定義すると,

$$B^2 = P\Lambda^{\frac{1}{2}}P^T P\Lambda^{\frac{1}{2}}P^T = P\Lambda^{\frac{1}{2}}\Lambda^{\frac{1}{2}}P^T = P\Lambda P^T = A.$$

- また,

$$A\text{が半正定値行列} \Rightarrow B\text{は半正定値行列}, \quad A\text{が正定値行列} \Rightarrow B\text{は正定値行列}.$$

であり，所望の結果を得る． □

半正定値行列の平方根

- 半正定値行列 A に対し, $A = B^2$ となる半正定値行列 B は一意に定まる. (証明は略)
- このような半正定値行列 B を A の平方根といい, $B = \sqrt{A}$ と表す.

正定値行列の判定

定義 (首座小行列)

n 次正方行列 A に対し, はじめから r 行 r 列までの成分からなる r 次正方行列を A の次数が r の**首座小行列 (leading principal submatrix)** といい, $A^{(r)}$ と表す.

$\boxed{\text{例}}$ $A = \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{3} & 0 \\ -\sqrt{3} & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 5 \end{pmatrix}$ とする. このとき, A の首座小行列は以下:

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 \end{pmatrix}, \quad A^{(2)} = \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 4 \end{pmatrix}, \quad A^{(3)} = \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{3} & 0 \\ -\sqrt{3} & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 5 \end{pmatrix}.$$

正定値行列の判定

定理 (正定値行列の判定)

A を n 次実対称行列とする．このとき，任意の $n = 1, 2, \ldots,$ に対し

$$A \text{ が正定値行列} \iff \text{任意の } r = 1, 2, \ldots, n \text{ で } \det\left(A^{(r)}\right) > 0.$$

証明 まず $(\Rightarrow)$ を示す．

- $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対し，はじめから r 個の成分を取り出したベクトルを $\boldsymbol{x}^{(r)} \in \mathbb{R}^r$ とする．
- このとき，

$$\boldsymbol{x}^{(r)T} A^{(r)} \boldsymbol{x}^{(r)} = \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{x}^{(r)} \\ \\ \hline \mathbf{0} \end{array}\right)^T A \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{x}^{(r)} \\ \\ \hline \mathbf{0} \end{array}\right)$$

であり，A が正定値行列のとき $A^{(r)}$ も正定値行列である．よって $\det\left(A^{(r)}\right) > 0$.

($\Leftarrow$) を n に関する数学的帰納法で示す. $n=1$ のときは明らかに成り立つ.

- $n-1$ 次実対称行列で主張が成り立つと仮定し, n 次正方行列の場合を考える $(n \geq 2)$.
- n 次実対称行列 A を次のように表す:

$$A = \left(\begin{array}{c|c} B & \boldsymbol{a} \\ \hline \boldsymbol{a}^T & a_n \end{array}\right) \quad (B := A^{(n-1)},\ \boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^{n-1}, a_n \in \mathbb{R}).$$

- このとき仮定から $\det(B) > 0$ であり B は正則. よって A は次のように書ける:

$$A = \underbrace{\left(\begin{array}{c|c} I & \boldsymbol{0} \\ \hline (B^{-1}\boldsymbol{a})^T & 1 \end{array}\right)}_{U^T} \underbrace{\left(\begin{array}{c|c} B & \boldsymbol{0} \\ \hline \boldsymbol{0}^T & b \end{array}\right)}_{D\text{とおく}} \underbrace{\left(\begin{array}{c|c} I & B^{-1}\boldsymbol{a} \\ \hline \boldsymbol{0}^T & 1 \end{array}\right)}_{U\text{とおく}}.$$

なお $b := a_n - \boldsymbol{a}^T B^{-1} \boldsymbol{a}$ である.

- $\det(U) = 1$ であるため

$$\det(A) = \det(D) = \det(B)(a_n - \boldsymbol{a}^T B^{-1} \boldsymbol{a})$$

であり, 仮定より $\det(A) > 0$ と合わせて次を得る:

$$a_n - \boldsymbol{a}^T B^{-1} \boldsymbol{a} > 0.$$

- 帰納法の仮定から B は正定値行列であるため, $b = a_n - \boldsymbol{a}^T B^{-1} \boldsymbol{a} > 0$ とあわせて

$$D = \left(\begin{array}{c|c} B & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0}^T & b \end{array}\right)$$

は正定値行列である (D の 2 次形式を考えよ).

- よって U が正則であることとあわせて, $A = U^T D U$ は正定値行列である.

  ($U^T D U$ の 2 次形式を考えよ)

- 以上より, 帰納法で任意の n 次実対称行列で主張が成り立つことが示された. $\square$

首座小行列では半正定値行列の判定はできない

注意

n 次実対称行列 A に対し，

$$A \text{ が}\textbf{半}\text{正定値行列} \quad \Longrightarrow \quad \det\left(A^{(r)}\right) \geq 0 \quad (\forall r = 1, 2, \ldots, n).$$

は成り立つが，その逆 ($\Leftarrow$) は一般には成り立たない．

例 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ とする．このとき

$$\det\left(A^{(1)}\right) = 1, \quad \det\left(A^{(2)}\right) = 0, \quad \det\left(A^{(3)}\right) = 0$$

であるが，A は半正定値行列ではない．

目次

正定値行列の応用例: 内積の構成

内積の定義 (再掲)

任意のベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ に対して実数 $(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}) \in \mathbb{R}$ を対応させる写像が次の性質を満たすとき, $(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y})$ を $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ の**内積 (inner product)** という:

(1) (正定値性) 任意の $\boldsymbol{x} \in V$ で $(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x}) \geq 0$ であり,

$(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x}) = 0$ となるのは $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ の場合に限る.

(2) (対称性) 任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ に対して $(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{y} \cdot \boldsymbol{x})$.

(3) (線形性) 任意の実数 $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, 任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \in V$ に対して

$$((\alpha\boldsymbol{x} + \beta\boldsymbol{y}) \cdot \boldsymbol{z}) = \alpha(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{z}) + \beta(\boldsymbol{y} \cdot \boldsymbol{z}).$$

G を n 次実対称行列とする. $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ から $\mathbb{R}$ への写像を

$$(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}) = \boldsymbol{x}^T G \boldsymbol{y} \quad (\forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n)$$

と定義する. このとき, G が正定値行列ならば $(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y})$ は $\mathbb{R}^n$ 上の内積である.

半正定値行列の応用例: 2 次形式の凸性判定

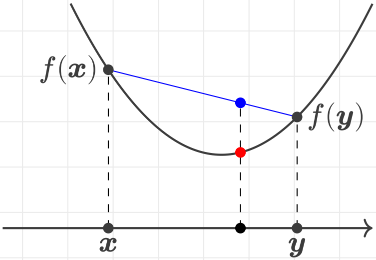
定義 (凸関数)

関数 $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ に対して, 任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n, \theta \in [0,1]$ で

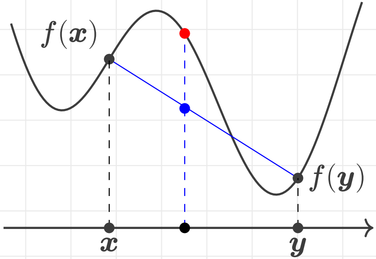
$$f(\theta\boldsymbol{x} + (1-\theta)\boldsymbol{y}) \le \theta f(\boldsymbol{x}) + (1-\theta) f(\boldsymbol{y}) \tag{1}$$

が成り立つとき, f を凸関数という.

凸関数



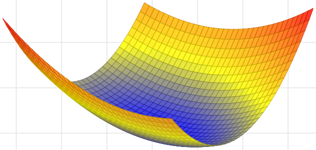
非凸関数



定理 (2 次形式が凸関数であることの必要十分条件)

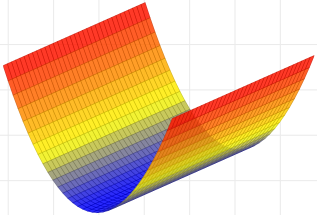
A を n 次実対称行列として, 関数 $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ を $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$ と定義する. このとき

$$f \text{ は凸関数} \quad \Longleftrightarrow \quad A \text{ は半正定値行列.}$$



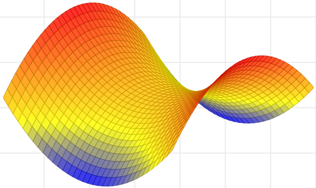
$A = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 3 \end{pmatrix}$ (半正定値)

凸関数



$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ (半正定値)

凸関数



$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ (半正定値でない)

非凸関数

証明

まず「A が半正定値行列 $\Rightarrow$ f が凸関数」を示す．

- A を半正定値行列とする．このとき任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n, \theta \in [0,1]$ に対して，

$$
\begin{aligned}
\text{式 (1) の (右辺)} - \text{(左辺)} &= \theta f(\boldsymbol{x}) + (1-\theta) f(\boldsymbol{y}) - f(\theta \boldsymbol{x} + (1-\theta)\boldsymbol{y}) \\
&= \theta \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} + (1-\theta) \boldsymbol{y}^T A \boldsymbol{y} - (\theta \boldsymbol{x} + (1-\theta)\boldsymbol{y})^T A (\theta \boldsymbol{x} + (1-\theta)\boldsymbol{y}) \\
&= \theta \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} + (1-\theta) \boldsymbol{y}^T A \boldsymbol{y} \\
&\qquad - \left(\theta^2 \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} + 2\theta(1-\theta) \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{y} + (1-\theta)^2 \boldsymbol{y}^T A \boldsymbol{y}\right) \\
&= \theta(1-\theta)\left(\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} - 2\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{y} + \boldsymbol{y}^T A \boldsymbol{y}\right) \\
&= \theta(1-\theta)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})^T A (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) \geq 0.
\end{aligned}
$$

- よって $\theta f(\boldsymbol{x}) + (1-\theta) f(\boldsymbol{y}) \geq f(\theta \boldsymbol{x} + (1-\theta)\boldsymbol{y})$ であり，f は凸関数．

次に「f が凸関数 $\Rightarrow$ A が半正定値行列」を示す．

- f を凸関数とする．このとき $\theta = 1/2$ として任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対し，
$$\frac{1}{2}f(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}f(\boldsymbol{y}) \geq f\left(\frac{\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}}{2}\right) \qquad \text{すなわち} \quad \boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}^T A\boldsymbol{y} \geq \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})^T A(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})$$
- 左辺から右辺を引くと
$$\begin{aligned} 0 &\leq \boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}^T A\boldsymbol{y} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})^T A(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}) \\ &= \boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}^T A\boldsymbol{y} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x} + 2\boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{y} + \boldsymbol{y}^T A\boldsymbol{y}) \\ &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{x} - 2\boldsymbol{x}^T A\boldsymbol{y} + \boldsymbol{y}^T A\boldsymbol{y}) \\ &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})^T A(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}). \end{aligned}$$
- $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ は任意に取れるので，結果的に任意の $\boldsymbol{v} \in \mathbb{R}^n$ に対し $\boldsymbol{v}^T A\boldsymbol{v} \geq 0$ が成り立つ．
  よって A は半正定値行列． $\square$

まとめ

講義の振り返り

- 2 次形式と対称行列
- 半正定値行列，正定値行列の定義と諸性質
- 半正定値行列，正定値行列の応用 (内積の構成, 凸性の判定)

自宅での復習

- 2 次形式に関する式の扱いについて復習する．
- 半正定値行列，正定値行列の定義と同値な条件を確認する．