

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

① 半正定値行列・正定値行列

② 半正定値行列の応用

目次

① 半正定値行列・正定値行列

② 半正定値行列の応用

2次形式

定義 (2次形式)

n 次実対称行列 A に対して

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

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

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

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

2次形式における対称行列の仮定

注意

2次形式 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x}$ 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、

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

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

- よって任意の $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ に対し、 $\mathbf{x}^T \mathbf{A}' \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ 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 $x \in \mathbb{R}^n$ に対して $x^T A x \geq 0$ であるとき, A を**半正定値行列**という.
- 任意の $x \neq 0$ に対して $x^T A x > 0$ 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.

~~~ 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

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 2x_1^2 + 4x_2^2 - 2\sqrt{3}x_1x_2$$
$$= (x_1 - \sqrt{3}x_2)^2 + x_1^2 + x_2^2 > 0 \quad (\forall (x_1, x_2)^T \neq 0).$$

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  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n \in \mathbb{R}$ ,  
それぞれに対応する固有ベクトルを  $p_1, p_2, \dots, p_n \in \mathbb{R}^n$  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  $p_1, p_2, \dots, p_n$  は  $\mathbb{R}^n$  の正規直交基底としてとれる。
- よって任意の  $x \in \mathbb{R}^n$  は  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n \in \mathbb{R}$  を用いて次のように表せる:

$$x = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \cdots + \alpha_n p_n = \sum_{i=1}^n \alpha_i p_i.$$

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

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

- したがって、

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

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

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  $x$  を任意にとる.

- このとき

$$x^T P^T P x = (Px)^T (Px) = \|Px\|^2 \geq 0$$

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  $x \neq 0 \implies Px \neq 0$  より, 任意の  $x \neq 0$  で  $x^T P^T P x > 0$ .  
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  $\Rightarrow A = B^2$  となる半正定値行列  $B$  が存在。
- $A$  が正定値行列  $\Rightarrow A = B^2$  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  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n \geq 0$  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,

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

- また,

$A$ が半正定値行列  $\Rightarrow B$ は半正定値行列,  $A$ が正定値行列  $\Rightarrow B$ 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。

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  $n = 1, 2, \dots$  に対し

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

証明 まず  $(\Rightarrow)$  を示す。

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

$$\mathbf{x}^{(r)T} A^{(r)} \mathbf{x}^{(r)} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}^{(r)} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}^T A \begin{pmatrix} \mathbf{x}^{(r)} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

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  $\det(A^{(r)}) > 0$ 。

$(\Leftarrow)$  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:

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

- 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:

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

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

- $\det(U) = 1$  であるため

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

であり、仮定より  $\det(A) > 0$  と合わせて次を得る:

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

- 帰納法の仮定から  $B$  は正定値行列であるため、 $b = a_n - \mathbf{a}^T B^{-1} \mathbf{a} > 0$  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.

□

# 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,

$$A \text{ が半正定値行列} \implies \det(A^{(r)}) \geq 0 \quad (\forall r = 1, 2, \dots, n).$$

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

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

であるが、 $A$  は半正定値行列ではない。

# 目次

① 半正定値行列・正定値行列

② 半正定値行列の応用

# 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  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$  に対して実数  $(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}) \in \mathbb{R}$  を対応させる写像が次の性質を満たすとき,  $(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y})$  を  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  の内積 (inner product) という:

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

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

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

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

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

$G$  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

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

と定義する. このとき,  $G$  が正定値行列ならば  $(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y})$  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

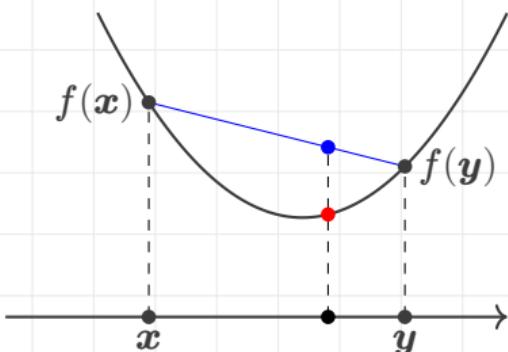
## 定義 (凸関数)

関数  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  に対して、任意の  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, \theta \in [0, 1]$  で

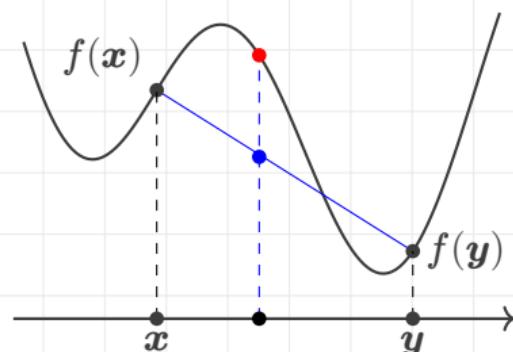
$$f(\theta\mathbf{x} + (1 - \theta)\mathbf{y}) \leq \theta f(\mathbf{x}) + (1 - \theta)f(\mathbf{y}) \quad (1)$$

が成り立つとき、 $f$  を凸関数という。

凸関数



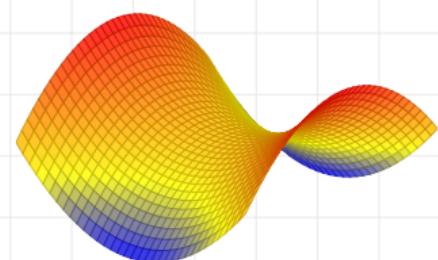
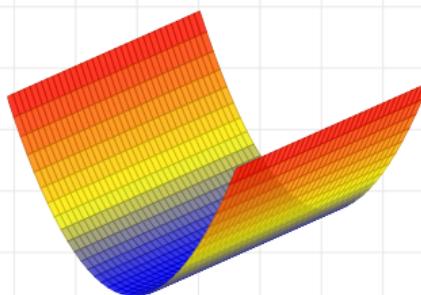
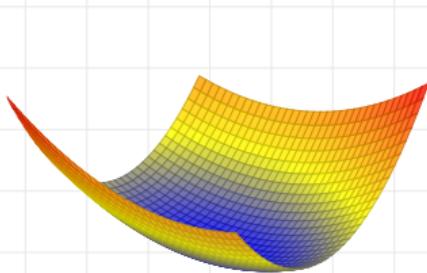
非凸関数



## 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  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  を  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x}$  と定義する。このとき

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



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

凸関数

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

凸関数

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

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  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, \theta \in [0, 1]$  に対して,

$$\text{式 (1) の (右辺)} - (\text{左辺}) = \theta f(\mathbf{x}) + (1 - \theta)f(\mathbf{y}) - f(\theta\mathbf{x} + (1 - \theta)\mathbf{y})$$

$$= \theta \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + (1 - \theta) \mathbf{y}^T A \mathbf{y} - (\theta \mathbf{x} + (1 - \theta) \mathbf{y})^T A (\theta \mathbf{x} + (1 - \theta) \mathbf{y})$$

$$= \theta \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + (1 - \theta) \mathbf{y}^T A \mathbf{y}$$

$$- (\theta^2 \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + 2\theta(1 - \theta) \mathbf{x}^T A \mathbf{y} + (1 - \theta)^2 \mathbf{y}^T A \mathbf{y})$$

$$= \theta(1 - \theta) (\mathbf{x}^T A \mathbf{x} - 2 \mathbf{x}^T A \mathbf{y} + \mathbf{y}^T A \mathbf{y})$$

$$= \theta(1 - \theta) (\mathbf{x} - \mathbf{y})^T A (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \geq 0.$$

- よって  $\theta f(\mathbf{x}) + (1 - \theta)f(\mathbf{y}) \geq f(\theta\mathbf{x} + (1 - \theta)\mathbf{y})$  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  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$  に対し,

$$\frac{1}{2}f(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}f(\mathbf{y}) \geq f\left(\frac{\mathbf{x} + \mathbf{y}}{2}\right) \quad \text{すなわち} \quad \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{y}^T A \mathbf{y} \geq \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \mathbf{y})^T A (\mathbf{x} + \mathbf{y})$$

- 左辺から右辺を引くと

$$\begin{aligned} 0 &\leq \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{y}^T A \mathbf{y} - \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \mathbf{y})^T A (\mathbf{x} + \mathbf{y}) \\ &= \mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{y}^T A \mathbf{y} - \frac{1}{2}(\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + 2\mathbf{x}^T A \mathbf{y} + \mathbf{y}^T A \mathbf{y}) \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}^T A \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T A \mathbf{y} + \mathbf{y}^T A \mathbf{y}) \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T A (\mathbf{x} - \mathbf{y}). \end{aligned}$$

- $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  は任意に取れるので, 結果的に任意の  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$  に対し  $\mathbf{v}^T A \mathbf{v} \geq 0$  が成り立つ.  
よって  $A$  は半正定値行列.

□

# 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.