

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

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

と定義される関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 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

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

2 次形式における対称行列の仮定

注意

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

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

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

- よって任意の $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ に対し, $\mathbf{x}^T A' \mathbf{x} = \mathbf{x}^T A \mathbf{x}$ 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

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

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 $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n \in \mathbb{R}^n$ 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 $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n$ は \mathbb{R}^n の正規直交基底としてとれる.
- よって任意の $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ は $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n \in \mathbb{R}$ を用いて次のように表せる:

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

- 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 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ 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 \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 $\boldsymbol{x} \neq \mathbf{0} \implies P\boldsymbol{x} \neq \mathbf{0}$ より, 任意の $\boldsymbol{x} \neq \mathbf{0}$ 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 $\implies A = B^2$ となる半正定値行列 B が存在.
- A が正定値行列 $\implies A = B^2$ 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,

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

- また,

A 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:

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

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,

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

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:

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

なお $b := a_n - \mathbf{a}^T B^{-1} \mathbf{a}$ 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 $x, y \in V$ に対して実数 $(x \cdot y) \in \mathbb{R}$ を対応させる写像が次の性質を満たすとき, $(x \cdot y)$ を x, y の内積 (inner product) という:

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

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

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

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

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

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

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

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

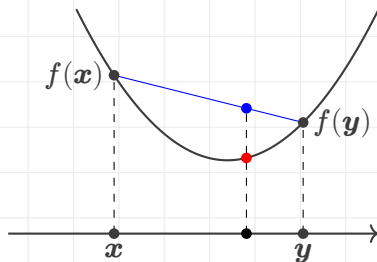
定義 (凸関数)

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

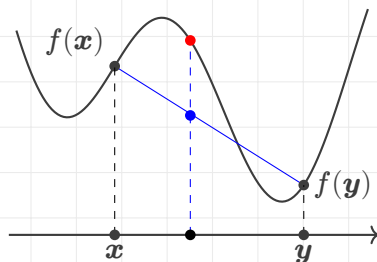
$$f(\theta x + (1 - \theta)y) \leq \theta f(x) + (1 - \theta)f(y) \quad (1)$$

が成り立つとき, f を凸関数という.

凸関数



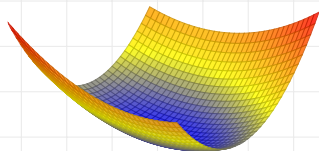
非凸関数



定理 (2 次形式が凸関数であることの必要十分条件)

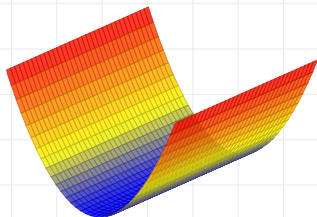
A を n 次実対称行列として, 関数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ を $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x}$ と定義する. このとき

f は凸関数 $\iff A$ は半正定値行列.



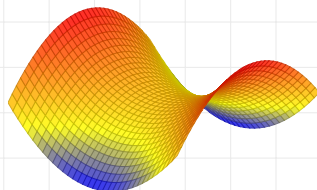
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 \\ 1/2 & 3 \end{pmatrix} \text{ (半正定値)}$$

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,

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

- 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.