

演習問題 2.18

実対称行列 Σ を考える。この行列について、式 (2.45) の固有値の方程式が成立する。この式の複素共役から、もとの式を引いた後、固有ベクトル \mathbf{u}_i との内積をとることで、固有値 λ_i が実数になることを示せ。同様に、 Σ の対称性を用いて、2 つの固有ベクトル \mathbf{u}_i と \mathbf{u}_j が、 $\lambda_j \neq \lambda_i$ であれば、直交することを示せ。最後に、たとえいくつかの固有値が 0 であっても、一般性を失うことなく、式 (2.46) を満たす、正規直交となるような固有ベクトル集合を選ぶことが可能であることを示せ。

【 固有ベクトルの方程式 】

$$\Sigma \mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i \quad \cdots (2.45)$$

ここで、 Σ は $D \times D$ の共分散行列である。また、演習問題 2.18 より、 Σ には対称であるものを選んでよいことが示されている。

【 固有ベクトルの正規直交性 】

Σ が実数の対称行列であるため、その固有値も実数となり、2 つの固有値が $\lambda_i \neq \lambda_j$ であるとき、それに対応する固有ベクトル \mathbf{u}_i と \mathbf{u}_j は、

$$\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = \delta_{ij} \quad \cdots (2.46)$$

となる。

【 複素共役 (complex conjugation) 】

ある複素数に対し、その虚部を入れ替えたものである。つまり、ある実数 a, b があり、 i をその虚部単位とすると、

$$z = a + ib$$

に対して、

$$\bar{z} = a - ib$$

が z の複素共役な数である。複素共役を表すのには、上線 (\bar{z}) がよく使用される。上付きのアスタリスク (z^*) などでも使用されるが、行列での随伴行列などとの混乱を避けるために、あまり使用されない。

【 複素共役の基本的性質 】

- z が実数であるとき $\Rightarrow \bar{z} = z$
- z が純虚数であるとき $\Rightarrow \bar{z} = -z$
- **対合性** $\Rightarrow \bar{\bar{z}} = z$
- \bar{z} と z の絶対値が等しい $\Rightarrow |\bar{z}| = |z|$
- $z\bar{z} = |z|^2$ が成り立つ。特に、 $z^{-1} = \frac{\bar{z}}{|z|^2}$ ($z \neq 0$) である。
- $\overline{z + w} = \bar{z} + \bar{w}$
- $\overline{zw} = \bar{z} \cdot \bar{w}$

【 複素共役行列 (complex conjugate matrix) 】

行列 \mathbf{A} の各々の成分を複素共役にした行列 $\bar{\mathbf{A}}$ のことである。以下に例を

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1-i \\ 1+i & i \end{bmatrix}$$

とした場合、行列 \mathbf{A} の複素共役行列 $\bar{\mathbf{A}}$ は、

$$\bar{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \bar{a}_{11} & \bar{a}_{12} \\ \bar{a}_{21} & \bar{a}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overline{1} & \overline{-1-i} \\ \overline{1+i} & \overline{i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1+i \\ 1-i & -i \end{bmatrix}$$

複素共役行列は、**複素共範行列**、**複素行列**とも言う。

【 複素共役行列の基本的性質 】

- $\overline{(\bar{\mathbf{A}})} = \mathbf{A}$
- $\overline{\mathbf{A} + \mathbf{B}} = \bar{\mathbf{A}} + \bar{\mathbf{B}}$
- $\overline{(c\mathbf{A})} = \bar{c} \bar{\mathbf{A}}$
- $\overline{(\mathbf{AB})} = \bar{\mathbf{A}} \bar{\mathbf{B}}$

【 随伴行列 (adjoint matrix) 】

複素数を成分にとる $m \times n$ 行列 \mathbf{A} に対して、 \mathbf{A} の転置およびその成分の複素共範

(実部はそのまま虚部の符号を反転する) をとって得られる $n \times m$ 行列 \mathbf{A}^* のことである。式で書けば、行列に対し、その随伴は、 $\mathbf{A}^* = (\bar{a}_{ji})$ で与えられる。ここで、 a_{ij} は行列 \mathbf{A} の (i, j) 成分で、 $1 \leq i \leq n$ および $1 \leq j \leq m$ である。また、上付きのバーは、スカラーに対する複素共範 (すなわち、 a, b を実数として、 $\overline{a+ib} = a-ib$) である。これを $\mathbf{A}^* = \bar{\mathbf{A}}^T (= (\bar{\mathbf{A}})^T = \overline{\mathbf{A}^T})$ と書くこともできる。ただし、 \mathbf{A}^T は \mathbf{A} の転置を、 $\bar{\mathbf{A}}$ は \mathbf{A} の各成分の複素共範をとったもの (複素共範行列) を意味する。以下に例を示す。

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1-i \\ 1+i & i \end{bmatrix}$$

とした場合、行列 \mathbf{A} の随伴行列 \mathbf{A}^* は、

$$\mathbf{A}^* = \bar{\mathbf{A}}^T = \begin{bmatrix} \bar{a}_{11} & \bar{a}_{21} \\ \bar{a}_{12} & \bar{a}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overline{1} & \overline{1+i} \\ \overline{-1-i} & \overline{i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1-i \\ -1+i & -i \end{bmatrix}$$

となる。随伴は、**エルミート転置** (Hermitian transpose)、**エルミート共範**

(Hermitian conjugate)、**エルミート随伴** (Hermitian adjoint) とも言う。線型代数学では、行列 \mathbf{A} の随伴を表す記号として、 \mathbf{A}^* や \mathbf{A}^H を用いるが、量子力学では、 \mathbf{A}^\dagger を用いる。

【 随伴の基本的な注意 】

- 正方行列がエルミートまたは自己随伴である
 $\Rightarrow \mathbf{A} = \mathbf{A}^*$ すなわち $a_{ij} = \bar{a}_{ji}^*$ の状態
- 正方行列が歪エルミートまたは反エルミートである
 $\Rightarrow \mathbf{A} = -\mathbf{A}^*$ すなわち $a_{ij} = -\bar{a}_{ji}^*$ の状態
- 正方行列が正規である

$\Rightarrow \mathbf{A}\mathbf{A}^* = \mathbf{A}^*\mathbf{A}$ の状態

(行列 \mathbf{A} が正方行列でない場合にも、2つの行列 $\mathbf{A}\mathbf{A}^*$ および $\mathbf{A}^*\mathbf{A}$ はともにエルミート)
(また、2つの行列 $\mathbf{A}\mathbf{A}^*$ および $\mathbf{A}^*\mathbf{A}$ はともに正定値となる。)

○ 正方行列がユニタリである

$\Rightarrow \mathbf{A}^* = \mathbf{A}^{-1}$ の状態

当然ながら、成分がすべて実数であるような行列 \mathbf{A} の随伴を求めることは、実数の複素共役はその実数自身であるから、これは行列 \mathbf{A} の転置を求めることに還元される。

[解]

まず、式 (2.45) の複素共役から、もとの式を引いた後、固有ベクトル \mathbf{u}_i との内積をとることで、固有値 λ_i が実数になることを示す。式 (2.45) の両辺に、左側から \mathbf{u}_i の随伴である \mathbf{u}_i^* を掛けると、

$$\mathbf{u}_i^* \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i^* \mathbf{u}_i \quad \cdots ※$$

が得られる。次に、式 (2.45) の随伴を考え、右側から \mathbf{u}_i を掛けてやると、

$$\mathbf{u}_i^* \boldsymbol{\Sigma}^* \mathbf{u}_i = \lambda_i^* \mathbf{u}_i^* \mathbf{u}_i \quad \cdots ※※$$

が得られる。ただし、 λ_i^* は固有値 λ_i の複素共役である。ここで、式 ※※ から式 ※ を引くと、

$$\mathbf{u}_i^* \boldsymbol{\Sigma}^* \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_i^* \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{u}_i = \lambda_i^* \mathbf{u}_i^* \mathbf{u}_i - \lambda_i \mathbf{u}_i^* \mathbf{u}_i$$

という関係式が得られ、また、 $\boldsymbol{\Sigma}$ は実対称行列であることから、 $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}^*$ が成り立つので、

いま、 $\boldsymbol{\Sigma}$ は実対称行列 (すべての成分が実数の対称行列) である。行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ の成分を σ_{ij} で表すと、 $\boldsymbol{\Sigma}$ は、

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{1D} & \cdots & \sigma_{DD} \end{bmatrix}$$

と表せる。この随伴行列 $\boldsymbol{\Sigma}^*$ は、

$$\boldsymbol{\Sigma}^* = \overline{\boldsymbol{\Sigma}}^T = \begin{bmatrix} \overline{\sigma}_{11} & \cdots & \overline{\sigma}_{1D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \overline{\sigma}_{1D} & \cdots & \overline{\sigma}_{DD} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} \overline{\sigma}_{11} & \cdots & \overline{\sigma}_{1D} \\ \overline{\sigma}_{1D} & \cdots & \overline{\sigma}_{DD} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{1D} & \cdots & \sigma_{DD} \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Sigma}$$

となるので、行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ が実対称行列であれば、 $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{\Sigma}^*$ が成り立つことがわかる。

上記の関係式は、

$$0 = (\lambda_i^* - \lambda_i) \mathbf{u}_i^* \mathbf{u}_i$$

となる。したがって、 $\lambda_i^* = \lambda_i$ であることがわかるので、 λ_i は実数となることがわかる。

仮に、 λ が虚数であれば、 $\lambda = a + ib$ とおくと、 λ^* は $\lambda^* = \overline{\lambda}^T = \overline{\lambda} = \overline{a + ib} = a - ib$ となるので、 $\lambda^* = \lambda$ が成り立たないことがわかる。つまり、 $\lambda^* = \lambda$ が成り立つのは、 λ が実数のときだけである。

同様に、 Σ の対称性を用いて、2 つの固有ベクトル \mathbf{u}_i と \mathbf{u}_j が、 $\lambda_j \neq \lambda_i$ であれば、直交することを示す。式 (2.45) より、 j 番目の固有値 λ_j とそれに対応する固有ベクトル \mathbf{u}_j における関係式

$$\lambda_j \mathbf{u}_j = \Sigma \mathbf{u}_j$$

が得られるので、これに対し、両辺に左側から \mathbf{u}_i^T を掛けてやると、

$$\lambda_j \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = \mathbf{u}_i^T \Sigma \mathbf{u}_j$$

… ※※※

が得られる。ここで、 Σ は実対称行列であることから、 $\Sigma = \Sigma^T$ が成り立つので、上記の式の右辺は、

$$\mathbf{u}_i^T \Sigma \mathbf{u}_j = \mathbf{u}_i^T \Sigma^T \mathbf{u}_j$$

と書き直せる。また、転置の性質より、上記の式の右辺は、

$$\mathbf{u}_i^T \Sigma^T \mathbf{u}_j = (\Sigma \mathbf{u}_i)^T \mathbf{u}_j$$

と書き直せる。

[(\mathbf{AB})^T = $\mathbf{B}^T \mathbf{A}^T$ の証明]

$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$, $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}$ とすると、(\mathbf{AB})^T は、

$$\begin{aligned} (\mathbf{AB})^T &= \left(\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} \right)^T \\ &= \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{bmatrix}^T \\ &= \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} \\ a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

となり、 $\mathbf{B}^T \mathbf{A}^T$ は、

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T &= \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}^T \\ &= \begin{bmatrix} b_{11} & b_{21} \\ b_{12} & b_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} \\ a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

となるので、(\mathbf{AB})^T = $\mathbf{B}^T \mathbf{A}^T$ が成立する。

さらに、式 (2.45) を適用することにより、最終的に、上記の式の右辺は、

$$(\Sigma \mathbf{u}_i)^T \mathbf{u}_j = \lambda_i \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j$$

と書き直せる。よって、式 ※※※ が、

$$\lambda_j \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = \lambda_i \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j$$

… ※※※※

となる。ここで、 $\lambda_j \neq \lambda_i$ であり、 λ_j と λ_i がそれぞれ $\lambda_j \neq 0$ かつ $\lambda_i \neq 0$ であるとき、上記の式が成り立つのは、 $\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = 0$ のときのみとなる。このことは、 \mathbf{u}_i と \mathbf{u}_j が直交することを示している。

[$\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = 0$ の意味]

$\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j$ は、ベクトル \mathbf{u}_i とベクトル \mathbf{u}_j の内積を示している。固有ベクトルが \mathbf{u}_i と \mathbf{u}_j が単位ベクトルに正規化されているならば、内積は、

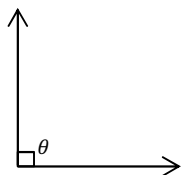
$$\cos \theta = \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j$$

と表され、これは 2 つのベクトル方向間の角度を表す。いま、 $\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = 0$ であるので、上記の式は、

$$\cos \theta = \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = 0$$

となることがわかる。つまり、ベクトル \mathbf{u}_i , \mathbf{u}_j 間の角度は $\theta = 90^\circ$ であり、ベクトル \mathbf{u}_i と \mathbf{u}_j が直交していることがわかる。

単位ベクトル ... $\mathbf{a}_1 = \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|}$



$$\cos \theta = \mathbf{a}_1^T \mathbf{b}_1 = \left(\frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|} \right)^T \left(\frac{\mathbf{b}}{\|\mathbf{b}\|} \right)$$

単位ベクトル ... $\mathbf{b}_1 = \frac{\mathbf{b}}{\|\mathbf{b}\|}$

最後に、たとえいくつかの固有値が 0 であっても、一般性を失うことなく、式 (2.46) を満たす、正規直交となるような固有ベクトル集合を選ぶことが可能であることを示す。式 (2.45) より、 $\lambda_j = \lambda_i$ であり、 λ_j と λ_i がそれぞれ $\lambda_j \neq 0$ かつ $\lambda_i \neq 0$ であるとき、

$$a \Sigma \mathbf{u}_i + b \Sigma \mathbf{u}_j = a \lambda_i \mathbf{u}_i + b \lambda_j \mathbf{u}_j$$

$$\Sigma (a \mathbf{u}_i + b \mathbf{u}_j) = \lambda (a \mathbf{u}_i + b \mathbf{u}_j)$$

と表現できるので、固有値ベクトル \mathbf{u}_i と \mathbf{u}_j のいくつかの線形結合は、固有値 $\lambda = \lambda_i = \lambda_j$ に対応する固有ベクトルで表せることがわかる。ここで、 $\mathbf{u}_i \neq \mathbf{u}_j$ であると仮定した上で、互いに直交する単位ベクトル \mathbf{u}_α , \mathbf{u}_β を以下のように定義する。

$$\mathbf{u}_\alpha = a \mathbf{u}_i + b \mathbf{u}_j$$

$$\mathbf{u}_\beta = c \mathbf{u}_i + d \mathbf{u}_j$$

\mathbf{u}_i と \mathbf{u}_j は、 \mathbf{u}_k ($k \neq i, k \neq j$) と直交であるので、 \mathbf{u}_α と \mathbf{u}_β も \mathbf{u}_k と直交である。すなわち、 \mathbf{u}_α と \mathbf{u}_β は、式 (2.46) を満たすことがわかる。ここで、もし、 $\lambda_i = 0$ であれば、 λ_i は実対称行列 Σ の成分に 0 として残るので、 Σ は特異となる。

[特異 (singular)]

特異とは、退化している行列、または方程式のことをいう。

[特異な行列]

特異な行列とは、行退化あるいは列退化した行列のことである。列退化した行列の例を以下に示す。

$$(\text{ex}) \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

上記の正方行列 Σ は、次数が 4 であるのに対し、行列の階数 (rank) が $\text{rank}(\Sigma) = 3$ であり、階数と次数の数が一致しない。このような行列は「特異である」という。特に、行列 \mathbf{A} がある体上の $m \times n$ 行列であるなら、

$$\text{rank}(\mathbf{A}) + \text{nullity}(\mathbf{A}) = n$$

が成立する。(正方行列であるならば、行退化と列退化は同値な条件である。)

【特異な方程式】

特異な方程式とは、方程式の個数と未知数の個数が等しくない連立方程式のことである。

次のような線形 (1 次) の代数方程式の組 (連立方程式) があるとする。

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1N}x_N &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2N}x_N &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{M1}x_1 + a_{M2}x_2 + a_{M3}x_3 + \cdots + a_{MN}x_N &= b_M \end{aligned}$$

ここでは、 N 個の未知数 x_j ($j = 1, 2, \dots, N$) が M 個の方程式で関連付けられている。また、係数 a_{ij} ($i = 1, 2, \dots, M; j = 1, 2, \dots, N$) と右辺 b_i ($i = 1, 2, \dots, M$) は既知の数である。ここで、もし、 $N = M$ ならば、方程式の個数と未知数の個数が等しく、解 x_j が一意に定まる可能性が十分にある。もし、 M 個の方程式のうち、ひとつでも他の方程式の線形結合である (行退化) ならば、あるいは、どの方程式にもいくつかの変数がまったく同じ線形結合となって現れる (列退化) ならば、解はひとつに定まらない。このような退化している方程式を「特異である」という。

【特異値分解 (SVD : Singular Value Decomposition)】

特異、またはそれに近い、行列や方程式を解く方法である。特異値分解は、ほとんどの線形最小二乗問題を解くための極め付けの方法である。(詳細は省略)

この場合、 \mathbf{u}_i は実対称行列 Σ の行に射影される固有ベクトルに直交となり、かつ

$\|\mathbf{u}_i\| = 1$ となる単位ベクトル \mathbf{u}_i を選ぶことができる。ゆえに、式 (2.46) は満たされる。もし、0 である固有値が 2 個以上あるとき、それらの固有値が実対称行列 Σ の行に存在することが保証される限り、固有値と対応する固有ベクトルを任意に選ぶことができる。そして、そのようなものは、式 (2.46) を満たす。

互いに直交し、単位長 $\|\mathbf{u}_i\| = 1$ を満たす D 個の固有ベクトル \mathbf{u}_i を横に並べた行列を $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_D]$ とすると、

$$\mathbf{U}^T \Sigma \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_D \end{bmatrix}$$

となり、いくつかの固有値が 0 であっても、一般性を失うことなく、式 (2.46) を満たす、正規直交となるような固有ベクトル集合を選ぶことが可能であることを示している。

以上より、たとえいくつかの固有値が 0 であっても、一般性を失うことなく、式 (2.46) を満たす、正規直交となるような固有ベクトル集合を選ぶことが可能であることを示せた。