正定値行列と半正定値行列

固有値がすべて 0 以上になる対称行列は、応用上さまざまな場面で現れる

ref: 線形代数セミナー p29

ref: 応用がみえる線形代数 p137〜138

- 半正定値行列：すべての固有値が非負（正または零）である対称行列
- 正定値行列：すべての固有値が正である対称行列

正定値行列　A をエルミート行列（対称行列）とし、任意のベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$（$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$）に対して、

$$(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) > 0$$

が成り立つとき、A は正定値行列であるという

正定値性と固有値の正実性　エルミート行列 A が正定値行列であることと、A のすべての固有値が正の実数であることは同値である

証明

正定値行列 $\Longrightarrow$ 固有値が正

A の固有値を λ、対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{x}$ とすると、

$$A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$$

両辺で $\boldsymbol{x}$ との内積をとると、

$$(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \lambda(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \lambda\|\boldsymbol{x}\|^2$$

A が正定値行列であることから、$(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) > 0$ が成り立ち、

$$\lambda\|\boldsymbol{x}\|^2 > 0$$

ここで、固有ベクトルは零ベクトルではないので、$\|\boldsymbol{x}\|^2 > 0$ である

よって、$\lambda\|\boldsymbol{x}\|^2 > 0$ の両辺を $\|\boldsymbol{x}\|^2$ で割ることにより、

$$\lambda > 0$$

が得られる ■

固有値が正 $\Longrightarrow$ 正定値行列

A の固有値を $\lambda_1, \ldots, \lambda_n > 0$ とする

A はエルミート行列であることから、ユニタリ行列 U を用いて次のように対角化できる

$$A = UDU^{-1} = UDU^* = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} U^*$$

随伴による内積の表現より、

$$(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^* A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^* UDU^* \boldsymbol{x}$$

ここで、$\boldsymbol{y} = U^*\boldsymbol{x}$ とおくと、

$$\boldsymbol{y}^* = (U^*\boldsymbol{x})^* = \boldsymbol{x}^* U$$

となるので、次のように書き換えられる

$$(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{y}^* D\boldsymbol{y} = (D\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y})$$

左辺の内積を計算すると、

$$\begin{aligned}(D\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}) &= \begin{pmatrix} \lambda_1 y_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n y_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \\ &= \lambda_1 |y_1|^2 + \cdots + \lambda_n |y_n|^2\end{aligned}$$

$\lambda_1, \ldots, \lambda_n > 0$ であることから、すべての項が正になるので、

$$(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = (D\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}) > 0$$

よって、A は正定値行列である ■

半正定値行列は、正定値行列の条件に等号を含むようにしたものである

半正定値行列　A をエルミート行列（対称行列）とし、任意のベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$（$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$）に対して、

$$(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) \geq 0$$

が成り立つとき、A は半正定値行列であるという

半正定値性と固有値の非負実性　エルミート行列 A が半正定値行列であることと、A のすべての固有値が非負の実数であることは同値である

対称行列を構成する行列積

スペクトル分解は対称行列に対するものだったが、これを任意の長方行列に拡張したものが特異値分解である

ref: 線形代数セミナー p29

対称行列から任意の行列へ議論を拡張するにあたって、次の定理が重要となる

自身の随伴行列との積で構成されるエルミート行列　A を任意の複素行列（長方行列）とするとき、A^*A および AA^* はエルミート行列である

証明

積をエルミート行列にすると順序が入れ替わることに注意して、

$$(A^*A)^* = A^*(A^*)^* = A^*A$$

よって、A^*A はエルミート行列である

同様に、

$$(AA^*)^* = (A^*)^*A^* = AA^*$$

よって、AA^* もエルミート行列である ■

A を実行列とすれば、次が成り立つ

自身の転置行列との積で構成される対称行列　A を任意の実行列（長方行列）とするとき、$A^\top A$ および $AA^\top$ は対称行列である

A^*A および AA^* という形の行列には、さらに固有値に関する重要な性質がある

自身の随伴行列との積で構成される半正値行列　任意の行列 A に対して、AA^* および A^*A はともに半正値行列である

証明

エルミート行列 AA^* の固有ベクトルを $\boldsymbol{u}$ とし、その固有値を $\lambda \in \mathbb{C}$ とすると、

$$AA^*\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u}$$

両辺で $\boldsymbol{u}$ との内積をとると、

$$(\boldsymbol{u}, AA^*\boldsymbol{u}) = \lambda(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}) = \lambda\|\boldsymbol{u}\|^2$$

この左辺は、随伴公式を用いて、

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{u}, AA^*\boldsymbol{u}) &= (\boldsymbol{u}, A(A^*\boldsymbol{u})) \\ &= (A^*\boldsymbol{u}, A^*\boldsymbol{u}) \\ &= \|A^*\boldsymbol{u}\|^2 \geq 0\end{aligned}$$

外側の A に
随伴公式を適用

となるので、

$$\|A^*\boldsymbol{u}\|^2 = \lambda\|\boldsymbol{u}\|^2 \geq 0$$

ここで、固有ベクトルは零ベクトルではないので、$\|\boldsymbol{u}\|^2 > 0$ である

よって、$\lambda\|\boldsymbol{u}\|^2 \geq 0$ の両辺を $\|\boldsymbol{u}\|^2$ で割ることにより、

$$\lambda \geq 0$$

が得られる

A^*A についても同様に、

$$(\boldsymbol{u}, A^*A\boldsymbol{u}) = (A\boldsymbol{u}, A\boldsymbol{u}) = \|A\boldsymbol{u}\|^2 \geq 0$$

から、$\lambda \geq 0$ が得られる ■

⚓ **特異値と左右特異ベクトルの対応関係**　A を O でない任意の行列とするとき、$A^\top A$ と $AA^\top$ は共通の正の固有値 σ^2 を持ち、それぞれの固有ベクトル $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}$ は次の関係を満たす

$$A\boldsymbol{v} = \sigma\boldsymbol{u}, \quad A^\top\boldsymbol{u} = \sigma\boldsymbol{v}$$

証明

$AA^\top$ の固有値が σ^2 と仮定した場合

$AA^\top$ の固有値が非負の固有値 σ^2 を持ち、対応する固有ベクトルが $\boldsymbol{u}$ であるとすると、

$$AA^\top\boldsymbol{u} = \sigma^2\boldsymbol{u}$$

この両辺に左から $A^\top$ をかけて、

$$A^\top AA^\top\boldsymbol{u} = A^\top\sigma^2\boldsymbol{u}$$

ここで、$\boldsymbol{v} = \dfrac{A^\top\boldsymbol{u}}{\sigma}$ とおくと、$A^\top\boldsymbol{u} = \sigma\boldsymbol{v}$ となるので、

$$\begin{aligned} A^\top A\sigma\boldsymbol{v} &= \sigma^3\boldsymbol{v} \\ A^\top A\boldsymbol{v} &= \sigma^2\boldsymbol{v} \end{aligned}$$

よって、σ^2 は $A^\top A$ の固有値でもあり、対応する固有ベクトル $\boldsymbol{v}$ は

$$A^\top\boldsymbol{u} = \sigma\boldsymbol{v}$$

を満たす ■

$A^\top A$ の固有値が σ^2 と仮定した場合

$A^\top A$ の固有値が非負の固有値 σ^2 を持ち、対応する固有ベクトルが $\boldsymbol{v}$ であるとすると、

$$A^\top A\boldsymbol{v} = \sigma^2\boldsymbol{v}$$

この両辺に左から A をかけて、

$$AA^\top A\boldsymbol{v} = A\sigma^2\boldsymbol{v}$$

ここで、$\boldsymbol{u} = \dfrac{A\boldsymbol{v}}{\sigma}$ とおくと、$A\boldsymbol{v} = \sigma\boldsymbol{u}$ となるので、

$$\begin{aligned} AA^\top\sigma\boldsymbol{u} &= \sigma^3\boldsymbol{u} \\ AA^\top\boldsymbol{u} &= \sigma^2\boldsymbol{u} \end{aligned}$$

よって、σ^2 は $AA^\top$ の固有値でもあり、対応する固有ベクトル $\boldsymbol{u}$ は

$$A\boldsymbol{v} = \sigma\boldsymbol{u}$$

を満たす ■