

レッスン 8 シュール分解と QR 分解 Part II

このレッスンではエルミート行列の固有値問題および直交行列の固有値問題の更なる展開を学ぶ。まず、エルミート行列の固有値単調定理および分離定理、ついで固有値の **Minimax** 特徴づけである、**Courant – Fischer** の定理を学ぶ。これは部分空間に関する有名な次元等式 $\dim(S \cap T) = \dim S + \dim T - \dim(S + T)$ のよい応用例でもある。次いで、エルミート行列の単純固有値をレーリー商で近似すれば、誤差は残差ノルムの 2 乗のオーダーであることを示し、レーリー商が固有値近似に有力な手段であることを示す。次に、やや大型の問題として、弾性バネで結合された質点系の自由振動問題（連成振動）を扱い、その解法が実対称 3 重対角行列の固有値問題に還元することを示す。最後に 2 次および 3 次直交行列の標準形を詳しく学ぶ。

8.1 エルミート行列とレーリー商

この節では次節以降への準備事項を学ぶ。前節の結果を復習すると、任意の n 次エルミート行列 \mathbf{A} は $\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{D}$ 型のシュール分解を許す。ここに、 $\mathbf{Q} = [\mathbf{q}_1 \cdots \mathbf{q}_n]$ は適当なユニタリ行列

列 ($\mathbf{Q}^* \mathbf{Q} = \mathbf{I}$)、 $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \lambda_n \end{bmatrix}$ は実対角行列を表す。展開すれば、 $\mathbf{A} \mathbf{q}_i = \lambda_i \mathbf{q}_i$, $\mathbf{q}_i^* \mathbf{q}_j = \delta_{ij}$

($i, j = 1, \dots, n$) となり、実数 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ は \mathbf{A} の固有値、 $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n$ は対応する固有ベクトル、 $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n\}$ は $\mathbf{C}^{n \times 1}$ の正規直交基底を表す。シュール分解の一般論から、 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ が \mathbf{D} 中に並ぶ順序は任意に指定できる。以上は復習である。

与えられたエルミート行列 $\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{n \times n}$ と任意の $\mathbf{0} \neq \mathbf{x} \in \mathbf{C}^{n \times 1}$ から作った商 $\rho(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} / \mathbf{x}^* \mathbf{x}$ を レーリー商 **Reighleigh quotient** という。 $\mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1$ なら $\rho(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x}$ となる。また、 $\rho(\mathbf{q}_i) = \lambda_i$ に注意 ($\because \mathbf{A} \mathbf{q}_i = \lambda_i \mathbf{q}_i$, $\mathbf{q}_i^* \mathbf{q}_j = \delta_{ij}$, $i, j = 1, \dots, n$)。レーリー商はエルミート行列の固有値問題近似問題において重要な役割を果たす。次に、以下数節で必要となるレーリー商に関する補題を証明する。

補題 いま、 \mathbf{A} を n 次エルミート行列、 $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$ をその固有値、固有値—固有ベクトル関係を $\mathbf{A} \mathbf{q}_i = \lambda_i \mathbf{q}_i$, $\mathbf{q}_i^* \mathbf{q}_j = \delta_{ij}$, $i, j = 1, \dots, n$ とする。すると、(1) $\mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1$ を満たす任意の $\mathbf{x} \in \mathbf{C}^{n \times 1}$ に対して、 $\lambda_1 \leq \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} \leq \lambda_n$ が成立する。(2) $\mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1$ を満たす任意の $\mathbf{x} \in \text{span}\{\mathbf{q}_r, \mathbf{q}_s, \dots, \mathbf{q}_t\}$ ($1 \leq r < s < \dots < t \leq n$) に対して、 $\lambda_r \leq \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} \leq \lambda_t$ が成立する。

証明：(1) $\mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1$ を満たす任意の $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^{n \times 1}$ を $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n\}$ で展開し、 $\mathbf{x} = y_1 \mathbf{q}_1 + \dots + y_n \mathbf{q}_n$ とす

れば、 $\mathbf{A} \mathbf{q}_i = \lambda_i \mathbf{q}_i$, $\mathbf{q}_i^* \mathbf{q}_j = \delta_{ij}$, $i, j = 1, \dots, n$ により、 $1 = \mathbf{x}^* \mathbf{x} = |y_1|^2 + \dots + |y_n|^2$ および

$\mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} = \lambda_1 |y_1|^2 + \dots + \lambda_n |y_n|^2$ が出る。ここで $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$ を考慮すれば、 $\lambda_1 \leq \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} \leq \lambda_n$ が出る。不等式(2)も全く同様な論法で得られる。■

8.2 単調定理 Monotonicity theorem

エルミート行列 $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ が $\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{C}$ を満たすとする。 $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ の固有値 (すべて実数!) をそれぞれ $\alpha_1 \leq \dots \leq \alpha_n$, $\beta_1 \leq \dots \leq \beta_n$, $\gamma_1 \leq \dots \leq \gamma_n$ とすれば次の不等式(1)-(4)が成り立つ:

$$(1) \quad \alpha_i + \beta_1 \leq \gamma_i \leq \alpha_i + \beta_n \quad (i = 1, \dots, n)$$

$$(2) \quad |b_{ij}| \leq \varepsilon \quad (i, j = 1, \dots, n) \text{ なら } |\beta_i| \leq n\varepsilon \quad (i = 1, \dots, n) \quad \text{ここに } \mathbf{B} = [b_{ij}]$$

$$(3) \quad \alpha_j + \beta_{i-j+1} \leq \gamma_i \quad (i \geq j)$$

$$(4) \quad \gamma_i \leq \alpha_j + \beta_{i-j+n} \quad (i \leq j)$$

(1)によれば、 \mathbf{A} に \mathbf{B} を加えれば、 \mathbf{A} の各固有値はすべて少なくとも β_1 だけ増加し、 β_n 以上は増加しない。しかも(1)は \mathbf{A} と $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ の同一番目の固有値を比較している。これが(1)の値打ちであり、一般の行列に対しては成立しない関係である。(2)はエルミート行列 \mathbf{B} が小さければ、 β_i ($i = 1, \dots, n$) もすべて小さいことを示す。(3)(4)は(1)の一般化を表し、 $i = j$ と置けば(1)に戻る。

証明：次元等式を利用する。まず、前節で復習したように、固有値、固有ベクトルの関係は次のように書ける：

$$\mathbf{A} \mathbf{u}_i = \alpha_i \mathbf{u}_i, \quad \mathbf{B} \mathbf{v}_i = \beta_i \mathbf{v}_i, \quad \mathbf{C} \mathbf{w}_i = \gamma_i \mathbf{w}_i, \quad \delta_{ij} = \mathbf{u}_i^* \mathbf{u}_j = \mathbf{v}_i^* \mathbf{v}_j = \mathbf{w}_i^* \mathbf{w}_j \quad (i, j = 1, \dots, n)$$

(1)の証明 次に任意の $1 \leq i \leq n$ とし、部分空間 $S = \text{span}\{\mathbf{u}_i, \dots, \mathbf{u}_n\}$ 、 $T = \text{span}\{\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_i\}$ を考えると、次元等式により

$$\dim(S \cap T) = \dim S + \dim T - \dim(S + T) \geq (n - i + 1) + i - n = 1$$

ゆえに、 $S \cap T$ は非零ベクトルを含む。そこで、 $\mathbf{x} \in S \cap T$ かつ $\mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1$ を満たす \mathbf{x} をとれば、前節の補題により、

$$\alpha_i + \beta_1 \leq \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}^* \mathbf{B} \mathbf{x} (\because \mathbf{x} \in S, \mathbf{x} \in \mathbb{C}^{n \times 1}) = \mathbf{x}^* (\mathbf{A} + \mathbf{B}) \mathbf{x} = \mathbf{x}^* \mathbf{C} \mathbf{x} \leq \gamma_i (\because \mathbf{x} \in T)$$

すなわち、(1)の前半が出た。

次に、 $\mathbf{C} + (-\mathbf{B}) = \mathbf{A}$ に上の結果を適用すれば、シュール分解から $-\mathbf{B}$ の固有値は

$-\beta_n \leq \dots \leq -\beta_1$ ゆえ、 $\gamma_i + (-\beta_n) \leq \alpha_i$ が従う。これは(1)の後半に他ならない。

(2)の証明 前レッスン 7.9 節の結果により、 $|\beta_1|^2 + \dots + |\beta_n|^2 = \sum_{i,j=1}^n |b_{ij}|^2$ が

成り立つ。ゆえに $|\beta_i|^2 \leq \sum_{i,j=1}^n |b_{ij}|^2 \leq n^2 \varepsilon^2$ ($\because |b_{ij}| \leq \varepsilon$)。 (2)はこれから直ちに出る。

(3)の証明 $1 \leq j \leq i \leq n$ とし、

$$S = \text{span}\{\mathbf{u}_j, \dots, \mathbf{u}_n\}, T = \text{span}\{\mathbf{v}_{i-j+1}, \dots, \mathbf{v}_n\}, U = \text{span}\{\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_i\}$$

を定義すると (どれも空集合でないことに注意)、次元等式より

$$\begin{aligned} \dim(S \cap T \cap U) &= \dim(S \cap T) + \dim U - \dim((S \cap T) + U) \\ &= \dim S + \dim T - \dim(S + T) + \dim U - \dim((S \cap T) + U) \\ &\geq (n - j + 1) + (n - i + j) - n + i - n = 1 \end{aligned}$$

そこで、 $\mathbf{x} \in S \cap T \cap U$ かつ $\mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1$ を満たす \mathbf{x} をとり、前節の補題を使えば、

$$\alpha_j + \beta_{i-j+1} \leq \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} + \mathbf{x}^* \mathbf{B} \mathbf{x} \quad (\because \mathbf{x} \in S, \mathbf{x} \in T) = \mathbf{x}^* (\mathbf{A} + \mathbf{B}) \mathbf{x} = \mathbf{x}^* \mathbf{C} \mathbf{x} \leq \gamma_i \quad (\because \mathbf{x} \in U)$$

となり、(3)が得られる。

(4)の証明 $\mathbf{C} + (-\mathbf{B}) = \mathbf{A}$ に(3)を適用すれば、 $\gamma_j + (-\beta_{n-i+j}) \leq \alpha_i$ ($1 \leq j \leq i \leq n$) ($\because -\mathbf{B}$ の

小さい方から $i - j + 1$ 番目の固有値は $-\beta_{n-i+j}$) が出る。ここで i, j の役割を交換すれば、

$\gamma_i + (-\beta_{n-j+i}) \leq \alpha_j$ ($1 \leq i \leq j \leq n$) が得られる。これは不等式(4)に他ならない。 ■

例 1 $\mathbf{A} + \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 1+i \\ 1-i & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 3+i \\ 3-i & -1 \end{bmatrix} = \mathbf{C}$ の場合。

\mathbf{A} の固有値: $\alpha_1 = -3 \leq \alpha_2 = 2$

\mathbf{B} の固有値: $\beta_1 = 1 - \sqrt{2} = -0.4142 \dots \leq \beta_2 = 1 + \sqrt{2} = 2.4142 \dots$

\mathbf{C} の固有値: $\gamma_1 = -3 \leq \gamma_2 = 4$

単調定理の主張をそのままのべると:

$$\alpha_1 + \beta_1 \leq \gamma_1 \leq \alpha_1 + \beta_2 : \quad -3 - 0.4142 \dots \leq -3 \leq -3 + 2.4142 \dots$$

$$\alpha_2 + \beta_1 \leq \gamma_2 \leq \alpha_2 + \beta_2 : \quad 2 - 0.4142 \dots \leq 4 \leq 2 + 2.4142 \dots$$

$$\gamma_1 \leq \alpha_2 + \beta_1 : \quad -3 \leq 2 - 0.4142 \dots$$

$$\alpha_1 + \beta_2 \leq \gamma_2 : \quad -3 + 2.4142 \dots \leq 4$$

例 2 $\mathbf{A} + \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} = \mathbf{C}$ ($\mathbf{B}^* = \mathbf{B}$)

$$|b_{ij}| \leq \varepsilon \quad (i, j = 1, 2) \text{ なら, } \alpha_i - 2\varepsilon \leq \gamma_i \leq \alpha_i + 2\varepsilon \quad (i = 1, 2)$$

本節(1)(2)の結果は「エルミート行列の固有値は安定である」ことを意味している。すなわち、与えられた n 次エルミート行列 A にエルミート変動 $B = [b_{ij}]$ ($|b_{ij}| \leq \varepsilon$) を加えても、固有値は高々 $n\varepsilon$ 変動するに過ぎない。すなわち、エルミート行列の固有値は安定である stable (=良条件である well-conditioned)。

一般に、与えられた行列 A の計算固有値は A に小さな変動 B を加えた $A + B$ の厳密な固有値になっていることがよく知られている (後退誤差解析)。 B が小さいような算法を安定な算法 stable algorithm という。算法の安定性と固有値の安定性とは全く別概念なので混同しないこと。ゆえに、安定な算法を使って計算されたエルミート行列の計算固有値は真の固有値からわずかにずれているに過ぎない。しかし、一般の行列に対してはこのような保証はない。標準的行列計算パッケージ LAPACK、MATLAB、MTHEMATICA が高品質パッケージと呼ばれるのは、安定な算法を提供しているからである。

(参考) A, B, C をエルミート行列とし、 $A + B = C$ とする。固有値をこれまでと同じように、それぞれ、 $\alpha_1 \leq \dots \leq \alpha_n$, $\beta_1 \leq \dots \leq \beta_n$, $\gamma_1 \leq \dots \leq \gamma_n$ と記すと、ウィーランド・ホフマンの定理

$$\text{Wielandt-Hoffman's theorem } \sum_{i=1}^n (\gamma_i - \alpha_i)^2 \leq \sum_{i,j=1}^n \beta_{ij}^2 = \sum_{i,j=1}^n |b_{ij}|^2 \quad (B = [b_{ij}]) \text{ の成立することが}$$

知られている。これは明らかに単調定理と関連しているが、単調定理から導くことはできない。証明は J.H. Wilkinson, The Algebraic Eigenvalue Problem, Oxford, 1965, 104-109 参照。

8.3 分離定理 Separation theorem (コーシーの入れ子定理 Cauchy's Interlace Theorem)

いま、 $A = \begin{bmatrix} B & C \\ C^* & D \end{bmatrix}$ を n 次エルミート行列とし、 B の次数を m ($m < n$)、 A の固有値を

$\alpha_1 \leq \dots \leq \alpha_n$ 、 B の固有値を $\beta_1 \leq \dots \leq \beta_m$ とする。すると以下(1)(2)(3)が成り立つ：

(1) $\alpha_k \leq \beta_k \leq \alpha_{k+n-m}$ ($k = 1, \dots, m$)

(2) とくに $m = n-1$ の場合は、 $\alpha_1 \leq \beta_1 \leq \alpha_2 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_{n-1} \leq \alpha_n$ (入れ子構造)

(3) A が 3 重対角行列 $A = \begin{bmatrix} d_1 & e_2 & & \mathbf{0} \\ e_2 & d_2 & e_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ \mathbf{0} & & e_n & d_n \end{bmatrix}$ (ただし、 $e_i \neq 0, i = 2, \dots, n$) なら、(2)は強分離

$\alpha_1 < \beta_1 < \alpha_2 < \beta_2 < \dots < \beta_{n-1} < \alpha_n$ となり、 A の固有値はすべて相異なる。

証明 \mathbf{A}, \mathbf{B} の固有値—固有ベクトル関係を、 $\mathbf{A}\mathbf{u}_i = \alpha_i \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_i^* \mathbf{u}_j = \delta_{ij} (i, j = 1, \dots, n)$ 、

$\mathbf{B}\mathbf{v}_i = \beta_i \mathbf{v}_i, \mathbf{v}_i^* \mathbf{v}_j = \delta_{ij} (i, j = 1, \dots, m)$ とし、 $\mathbf{w}_i \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{v}_i \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbf{C}^{m \times 1} (i = 1, \dots, m)$ とおく。いま

$1 \leq k \leq m$ を満たす任意の k に対して、部分空間 $S = \text{span}\{\mathbf{u}_k, \dots, \mathbf{u}_n\}, T = \text{span}\{\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_k\}$ を定義すれば

$$\dim(S \cap T) = \dim S + \dim T - \dim(S + T) \geq (n - k + 1) + k - n = 1$$

ゆえに、 $\mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1, \mathbf{x} \in S \cap T$ を満たす $\mathbf{x} \in \mathbf{C}^{n \times 1}$ が取れる。すると、前節の補題により、

$$\begin{aligned} \alpha_k \leq \mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} (\because \mathbf{x} \in S) &= \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}^* \mathbf{A} \begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} (\because \mathbf{x} \in T, \mathbf{y} \in \text{span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}, \mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1 \rightarrow \mathbf{y}^* \mathbf{y} = 1) \\ &= \mathbf{y}^* \mathbf{B} \mathbf{y} \leq \beta_k \end{aligned}$$

これは(1)の前半の関係である。この関係を $-\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -\mathbf{B} & -\mathbf{C} \\ -\mathbf{C}^* & -\mathbf{D} \end{bmatrix}$ に適用すると、 $-\mathbf{A}$ の固有値は

$-\alpha_n \leq \dots \leq -\alpha_1, -\mathbf{B}$ の固有値は $-\beta_m \leq \dots \leq -\beta_1$ だから (小さい方から数えて同一番目にある固有値の添字の値の間には常に $n - m$ だけの差がある)、 $-\alpha_{k+n-m} \leq -\beta_k (k = 1, \dots, m)$ が得られる。これは(1)の後半の関係に他ならない。(2)は(1)において $m = n - 1$ とおいた場合である。

(3)を示す。 \mathbf{A} の k 次切断行列 (左上 $k \times k$ 小行列のこと) を $\mathbf{A}^{(k)}$ 、その特性多項式を $f_k(\lambda)$

と書けば、 $\mathbf{A}^{(n)} = \mathbf{A}, \mathbf{A}^{(n-1)} = \mathbf{B}$ であり、行列式の展開公式を使えば

$$(*) \quad \det(\mathbf{A}^{(k)} - \lambda \mathbf{I}) = f_k(\lambda) = (d_k - \lambda) f_{k-1}(\lambda) - |e_k|^2 f_{k-2}(\lambda), \quad k = 2, \dots, n \quad (f_0(\lambda) \equiv 1)$$

が出る。ここで $\alpha_1 \leq \beta_1 \leq \alpha_2 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_{n-1} \leq \alpha_n$ はすでに成立しているから、強分離性を示すには $f_n(\lambda) = 0$ と $f_{n-1}(\lambda) = 0$ が共通根 λ_0 をもつと仮定すれば矛盾が起こることを示せば十分である。(*)式に $0 = f_n(\lambda_0) = f_{n-1}(\lambda_0)$ を $k = n, \dots, 2$ の順に使うと、 $e_i \neq 0 (i = 2, \dots, n)$ ゆえ、 $f_0(\lambda_0) = 0$ が出る。これは $f_0(\lambda) = 1$ と矛盾する。■

例1 恒等関係
$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & \mathbf{0} \\ 1 & 0 & 1 & \dots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ \mathbf{0} & & & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sin x \\ \sin(2x) \\ \vdots \\ \sin(nx) \end{bmatrix} = 2 \cos x \begin{bmatrix} \sin x \\ \sin(2x) \\ \vdots \\ \sin(nx) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \sin(n+1)x \end{bmatrix} \quad (n \geq 2)$$

を考える。これは三角関数の加法定理 $\sin u + \sin v = 2 \sin\{(u+v)/2\} \cdot \cos\{(u-v)/2\}$ を使っ

て出る関係 $\sin(k-1)x + \sin(k+1)x = 2\cos x \cdot \sin kx$ ($k=1, 2, \dots$) を行列形に書き直したものに過ぎない。行列形に書いた式を見ると $(n+1)x = k\pi$ ($k=1, 2, \dots, n$) を満たす x に対して、 $\sin(n+1)x = 0$ となり、 $2\cos x$ は左辺の実 3 重対角行列 (\mathbf{T}_n と呼ぼう) の固有値となること
 がわかる ($\because (n+1)x = k\pi$ ($k=1, 2, \dots, n$) なら、 $[\sin x, \sin 2x, \dots, \sin nx]^T \neq \mathbf{0}$)。ゆえに、

$\lambda_k^{(n)} = 2\cos\{k\pi/(n+1)\}$, $k=1, 2, \dots, n$ と書けば、 \mathbf{T}_n の固有値は $\lambda_n^{(n)} < \lambda_{n-1}^{(n)} < \dots < \lambda_1^{(n)}$ によ

って与えられる。分離定理によれば $\lambda_{k+1}^{(n)} < \lambda_k^{(n-1)} < \lambda_k^{(n)}$ ($k=1, \dots, n-1$) が成立しているはずで

ある。すなわち、 $2\cos\frac{(k+1)\pi}{n+1} < 2\cos\frac{k\pi}{n} < 2\cos\frac{k\pi}{n+1}$ (に注意) が成立しているはずで

ある。 $1 > \frac{k+1}{n+1} > \frac{k}{n} > \frac{k}{n+1} > 0$ ゆえ、これは確かに真である。■

8.4 クーラン・フィッシャーの定理

与えられた n 次エルミート行列 \mathbf{A} の固有値を $\alpha_1 \leq \dots \leq \alpha_n$ とすれば、次式が成立する：

$$(1) \alpha_k = \min_{S^k} \max\{\mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} : \mathbf{x} \in S^k, \mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1\} \quad (k=1, \dots, n)$$

$$(2) \alpha_k = \max_{S^{n-k+1}} \min\{\mathbf{y}^* \mathbf{A} \mathbf{y} : \mathbf{y} \in S^{n-k+1}, \mathbf{y}^* \mathbf{y} = 1\} \quad (k=1, \dots, n)$$

ここに S^k は $\mathbf{C}^{n \times 1}$ 内の任意の k 次元部分空間を表す ($1 \leq k \leq n$)。これをクーラン・フィッシャーの定理 Courant-Fischer' Theorem または Minimax 原理 Minimax Principle という。(1)は、

任意かつ特定の k 次元部分空間 S^k について条件 $\mathbf{x} \in S^k$, $\mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1$ 下で $\mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x}$ を最大化し、その最

大値をすべての S^k について最小化すると α_k に等しくなることをいっている。(2)は、任意かつ

特定の $n-k+1$ 次元部分空間 S^{n-k+1} について条件 $\mathbf{y} \in S^{n-k+1}$, $\mathbf{y}^* \mathbf{y} = 1$ 下で $\mathbf{y}^* \mathbf{A} \mathbf{y}$ を最小化し、そ

の最小値をすべての S^{n-k+1} について最大化すると α_k に等しくなることをいっている。

証明 このよく知られた定理も次元公式を使えば簡単に出る。まず、固有値—固有ベクトル関係を $\mathbf{A} \mathbf{q}_i = \alpha_i \mathbf{q}_i$, $\mathbf{q}_i^* \mathbf{q}_j = \delta_{ij}$ ($i, j=1, \dots, n$) とする。

(1) の証明： $f(S^k) \equiv \max\{\mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{x} : \mathbf{x} \in S^k, \mathbf{x}^* \mathbf{x} = 1\} = \mathbf{x}_k^* \mathbf{A} \mathbf{x}_k$ ($\mathbf{x}_k \in S^k, \mathbf{x}_k^* \mathbf{x}_k = 1$) とする。

このような \mathbf{x}_k が実際に存在することは解析学からの結果である (レッスン 14 「内積とノルム

Part II」)。とくに、 S^k として $S^k = \text{span}\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k\}$ をとれば 7.1 節の補題により

$\alpha_1 \leq f(S^k) \leq \alpha_k$ だが、 $\mathbf{q}_k^* \mathbf{A} \mathbf{q}_k = \alpha_k$ ゆえ、 $f(S^k) = \alpha_k$ となる。

つぎに、任意の S^k に対して、 $S = \text{span}\{\mathbf{u}_k, \dots, \mathbf{u}_n\}$, $T = S^k$ とすれば、次元等式より

$\dim(S \cap T) = \dim S + \dim T - \dim(S + T) \geq n - k + 1 + k - n = 1$ が出る。ゆえに、

$\mathbf{x}_0 \in S \cap T$, $\mathbf{x}_0^* \mathbf{x}_0 = 1$ を満たす \mathbf{x}_0 が存在し、この $\mathbf{x}_0 \in S^k$ は $\mathbf{x}_0^* \mathbf{A} \mathbf{x}_0 \geq \alpha_k$ を満たす

($\because \mathbf{x}_0 \in S = \text{span}\{\mathbf{u}_k, \dots, \mathbf{u}_n\}$)。これは $f(S^k) \geq \alpha_k$ を示す。

(2)の証明： $g(S^{n-k+1}) \equiv \min\{\mathbf{y}^* \mathbf{A} \mathbf{y} : \mathbf{y} \in S^{n-k+1}, \mathbf{y}^* \mathbf{y} = 1\} = \mathbf{y}_k^* \mathbf{A} \mathbf{y}_k$ ($\mathbf{y}_k \in S^k, \mathbf{y}_k^* \mathbf{y}_k = 1$) と

する。このような \mathbf{y}_k は実際に存在する (レッスン 14 「内積とノルム Part II」)。とくに、 S^{n-k+1}

として $S^{n-k+1} = \text{span}\{\mathbf{q}_k, \dots, \mathbf{q}_n\}$ をとれば 7.1 節の補題により $\alpha_k \leq g(S^{n-k+1}) \leq \alpha_n$ だが、

$\mathbf{q}_k^* \mathbf{A} \mathbf{q}_k = \alpha_k$ ゆえ、 $g(S^{n-k+1}) = \alpha_k$ となる。

つぎに、任意の S^{n-k+1} に対して、 $S = \text{span}\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k\}$, $T = S^{n-k+1}$ とすれば、次元等式より、

$\dim(S \cap T) = \dim S + \dim T - \dim(S + T) \geq k + n - k + 1 - n = 1$ が出る。ゆえに、

$\mathbf{y}_0 \in S \cap T$, $\mathbf{y}_0^* \mathbf{y}_0 = 1$ を満たす \mathbf{y}_0 が存在し、この \mathbf{y}_0 は $\alpha_k \geq \mathbf{y}_0^* \mathbf{A} \mathbf{y}_0$ を満たす

($\because \mathbf{y}_0 \in S = \text{span}\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k\}$)。これは $g(S^{n-k+1}) \leq \alpha_k$ を示す。■

クーラン・フィッシャーの定理から単調定理 (8.2 節)、分離定理 (8.3 節) が出ることはよく知られているが、この 3 者の証明は次元等式を利用すればそれぞれ独立に行うことができるのはご覧の通りである。これらは次元等式の応用例としても面白い。

8.5 ゲルシュゴーリンの定理 (比較のため)

本節の定理は簡単ながら全く一般の行列に対して成立する実用性の高い定理である。ここでのべる理由は単調定理 (8.2 節) との対比のためである。次の定理を ゲルシュゴーリンの定理 Gerschgorin's theorem という：

$\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbf{C}^{n \times n}$ の任意の固有値 α は ゲルシュゴーリン円板 Gerschgorin disk

$G_i = \{z \in \mathbf{C} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|\}$ ($i = 1, \dots, n$) のどれか一つに含まれる。そして、 k 個の円板の

合併集合が連結集合 (=集合内の任意の 2 点をその集合内に存在する折線のみで結べるような集合) をつくり、他の円板とは共通部分がない場合、その合併集合にはちょうど k 個の固有値が含まれる (ただし、重複固有値は重複度だけ数えるものとする)。

証明 前半は簡単である。任意の固有値 α をとり、対応する固有ベクトル $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ を

$\max_{1 \leq j \leq n} |x_j| = 1$ を満たすようにとる。いま、 $|x_k| = 1$ とし、 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \alpha\mathbf{x}$ の第 k 成分を書き下すと

$a_{k1}x_1 + \dots + a_{kn}x_n = \alpha x_k$ が得られる。これを $(a_{kk} - \alpha)x_k = -\sum_{j \neq k} a_{kj}x_j$ と変形し、絶対値をとれば

$|a_{kk} - \alpha| = |a_{kk} - \alpha||x_k| \leq \sum_{j \neq k} |a_{kj}||x_j| \leq \sum_{j \neq k} |a_{kj}| \cdot 1$ が出る。これは $\alpha \in G_k$ を意味する。

後半の証明のために、 $\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{F}$, $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} a_{11} & \mathbf{0} \\ & \ddots \\ \mathbf{0} & a_{nn} \end{bmatrix}$ とおき、 $\mathbf{A}(t) = \mathbf{D} + t\mathbf{F}$ ($0 \leq t \leq 1$) を

考える。明らかに $\mathbf{A}(0) = \mathbf{D}$, $\mathbf{A}(1) = \mathbf{A}$ が成り立つ。複素関数論の教えるところによれば、 $\lambda_i(0) = a_{ii}$ ($i = 1, \dots, n$) を満たし、 $\det(\mathbf{A}(t) - \lambda) = (\lambda_1(t) - \lambda) \cdots (\lambda_n(t) - \lambda)$ を満たすような、 $0 \leq t \leq 1$ 上で連続な実変数 t の複素関数 $\lambda_i(t)$ がとれる。ここに $\lambda_1(t), \dots, \lambda_n(t)$ はいうまでもなく $\mathbf{A}(t)$ の固有値を表す。前半の結果により、変数 t の各値に対して各 $\lambda_i(t)$ はゲルシュゴーリン円

板 $G_j(t) = \{z \in \mathbf{C} : |z - a_{jj}| \leq t \sum_{i \neq j} |a_{ij}|\}$ のどれかに入っているが、 $t = 0$ のときは $G_i(0) = \{a_{ii}\}$ に

入っている。 t の値が 0 から 1 へ増大していくとき、各円板の中心は動かず、半径のみが単調増大していく。また各 $\lambda_i(t)$ は連続関数である。ゆえに、最終的に k 個の円板 $G_i = G_i(1)$ の合併集合が連結集合をつくり、他の円板とは共通部分がない場合、この合併集合の中には初期値がこれら各円板の中心に等しいような固有値のみが存在し続け、いかなる t の値に対してもこの合併集合外に出ることは不可能である。これで定理の後半が証明された。■

例 $\mathbf{A}(t) = \begin{bmatrix} 1 & -t \\ t & 2 \end{bmatrix}$ ($0 \leq t \leq 1$) とおく。すると、 $\mathbf{A}(0) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$, $\mathbf{A}(1) = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ である。

$\mathbf{A}(t)$ の固有値は、 $\lambda_1(t), \lambda_2(t) = (1/2)(3 \pm \sqrt{1 - 4t^2})$ である。すなわち、 $0 \leq t \leq 1/2$ なら、固

有値は実数、 $1/2 < t \leq 1$ なら固有値は $\lambda_1(t), \lambda_2(t) = (1/2)(3 \pm i\sqrt{4t^2 - 1})$ で与えられる。詳しく

見ると、 $\lambda_1(t)$ は $\lambda_1(0) = 2$ から出発し、実軸上を $\lambda_1(1/2) = 3/2$ まで減少し、ここから真上に折れて $\lambda_1(1) = 3/2 + i\sqrt{3}/2$ まで連続的に移動する。 $\lambda_2(t)$ は $\lambda_2(0) = 1$ から実軸上を $\lambda_2(1/2) = 3/2$ まで増加し、真下に折れて $\lambda_2(1) = 3/2 - i\sqrt{3}/2$ まで連続的に移動する。

ゲルシュゴリン円板 $G_1(t) = \{z \in \mathbf{C} : |z-1| \leq t\}$ = 「 $z=1$ を中心とする半径 t の円板」および $G_2(t) = \{z \in \mathbf{C} : |z-2| \leq t\}$ = 「 $z=2$ を中心とする半径 t の円板」は、 $0 \leq t < 1/2$ では共通部分をもたないから、すでに見た通り、それぞれ 1 個の固有値を含む。 $1/2 \leq t \leq 1$ では $G_1(t) \cup G_2(t)$ は連結集合となり、固有値 $\lambda_1(t), \lambda_2(t)$ はつねに両円周の交点上に存在する。■

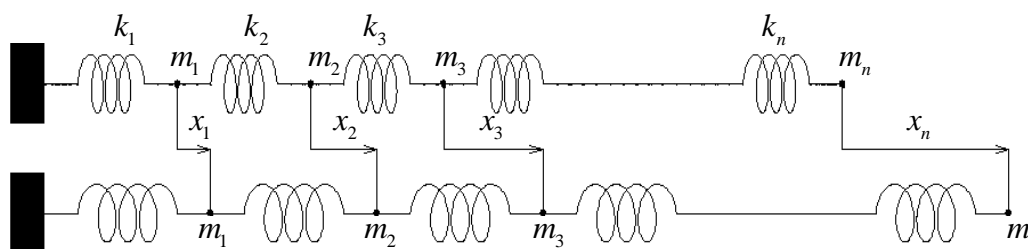
以上の一般的結果は単調定理より弱い結果である。正規行列 \mathbf{A} ($\mathbf{A}^* \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathbf{A}^*$) に限定しても、「各ゲルシュゴリン円板は、連結状態に関係なく、少なくとも 1 個の固有値を含む」ことがいえるに過ぎない (問題 8.5)。

8.6 連成振動解析

最近よく話題となる免震構造の基礎は振動解析である。構造物のもっとも簡単な振動モデルとして知られているのが変形量に比例する復元力が働くような、弾性バネで結合された質点系の振動 (連成振動) である (下図)。このモデルは分子内原子の振動モデルとしても使われる。復元力が線形でなく、変形量の指数関数であるような力学系は広範な応用をもつ戸田格子方程式として知られている。これについては、

中村佳正著「可積分系の機能数理」共立出版 (2006) 第 2 章を参照して頂きたい。

このレッスンの主題である、線形連成振動解析の核をなすのは実対称行列の固有値問題である。簡単のため自由振動 (=外力が作用しない場合の振動) のみを考える。



ここに m_1, \dots, m_n は質点の質量、 k_1, \dots, k_n はバネ定数を表す。すると、平衡点からの変位にバネ定数を乗じたものが復元力を与えることになり、各質点の運動方程式は次式で与えられる：

$$m_1 \frac{d^2 y_1}{dt^2} = -k_1 y_1 + k_2 (y_2 - y_1),$$

$$(1) \quad m_j \frac{d^2 y_j}{dt^2} = -k_j (y_j - y_{j-1}) + k_{j+1} (y_{j+1} - y_j) \quad (1 < j < n)$$

$$m_n \frac{d^2 y_n}{dt^2} = -k_n (y_n - y_{n-1})$$

ここに $y_i = y_i(t)$ は質点 m_i の平衡位置からの変位 ($i = 1, \dots, n$)、 t は時間を表す。行列形に書くと

$$\begin{bmatrix} m_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & m_n \end{bmatrix} \frac{d^2}{dt^2} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} k_1 + k_2 & -k_2 & & \mathbf{0} \\ -k_2 & k_2 + k_3 & -k_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ \mathbf{0} & & -k_n & k_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

これは定係数 2 階線形同次連立微分方程式を表す。これは簡潔に次形に書ける：

$$(2) \quad \mathbf{M} \frac{d^2 \mathbf{y}}{dt^2} = -\mathbf{K} \mathbf{y}$$

ここに、

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad (\text{未知ベクトル}), \quad \mathbf{M} = \begin{bmatrix} m_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & m_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{K} = \begin{bmatrix} k_1 + k_2 & -k_2 & & \mathbf{0} \\ -k_2 & k_2 + k_3 & -k_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ \mathbf{0} & & -k_n & k_n \end{bmatrix}$$

\mathbf{K} は実対称 3 重対角行列である。(2)はさらに次のように変形できる：

$$(3) \quad \frac{d^2 \mathbf{z}}{dt^2} = -\mathbf{L} \mathbf{z}$$

ここに、

$$\mathbf{z} = \mathbf{M}^{1/2} \mathbf{y}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{K} \mathbf{M}^{-1/2}, \quad \mathbf{M}^{1/2} \equiv \begin{bmatrix} \sqrt{m_1} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \sqrt{m_n} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{M}^{-1/2} = (\mathbf{M}^{1/2})^{-1}$$

\mathbf{L} も実対称 3 重対角行列である。

(3)は \mathbf{L} のシュール分解がわかれば解けるので、以下これを示す。実際、次の事実が成り立つ：

(I) \mathbf{K} の固有値はすべて相異なる正数である。

(II) \mathbf{L} の固有値もすべて相異なる正数である。

(III) \mathbf{L} のシュール分解を

$$(4) \quad \mathbf{L} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T = [\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n] \begin{bmatrix} \omega_1^2 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \omega_n^2 \end{bmatrix} [\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n]^T \quad (0 < \omega_1 < \dots < \omega_n)$$

とすれば元の式(1)の解は次式で与えられる：

$$(5) \quad \mathbf{y} = \mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{Q} \begin{bmatrix} C_{11} \cos \omega_1 t + C_{12} \sin \omega_1 t \\ \vdots \\ C_{n1} \cos \omega_n t + C_{n2} \sin \omega_n t \end{bmatrix}$$

ここで、 $\mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{Q} \equiv \mathbf{S} = [\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_n]$ と書けば、上式は

$$(6) \quad \mathbf{y} = \sum_{i=1}^n (C_{i1}\mathbf{s}_i \cos \omega_i t + C_{i2}\mathbf{s}_i \sin \omega_i t)$$

となる。ここに、右辺各 $\mathbf{s}_i \cos \omega_i t$, $\mathbf{s}_i \sin \omega_i t$ を 固有振動 eigenvibration、 ω_i を固有角振動数 angular eigenfrequency、 $\omega_i/(2\pi)$ を 固有振動数 eigenfrequency、 $\mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{Q}$ の各列 \mathbf{s}_i を 固有モード eigenmode という。初期条件、すなわち、 $t=0$ における各質点の位置と初速度、が与えられれば、定数 C_{11}, \dots の値はすべて確定する。

証明

(I) 分離定理 (8.3 節) により、 \mathbf{K} の固有値はすべて相異なる実数である。これを $\kappa_1 < \dots < \kappa_n$ とする。ゲルシュゴリンの定理により $0 \leq \kappa_i$ ($i=1, \dots, n$) 明らか。さらに、 \mathbf{K} は 0 固有値をもたないことを証明できる。これは「 \mathbf{K} は優対角行列であり、そのグラフは強連結である」ことから従う。詳しくは最終レッスン (レッスン 15) を見て頂きたい。

(II) \mathbf{L} は必ずしも優対角行列ではないため、(I)の方法は使えない。ここでは、任意の $\mathbf{0} \neq \mathbf{x} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$ に対して $\mathbf{x}^T \mathbf{L} \mathbf{x} > 0$ が満たされること示す (これを 正定値性 positive-definiteness という)。シュール分解を考えれば、 \mathbf{L} の正定値性は \mathbf{L} の固有値がすべて正であること、と同値であることは明らかである (検算して下さい)。実際、(I)により \mathbf{K} は正定値行列であるから、 $\mathbf{0} \neq \mathbf{x} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$ なら、 $\mathbf{x}^T \mathbf{L} \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{K} \mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{x} = (\mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{x})^T \mathbf{K} (\mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{x}) > 0$ となる。

(III) シュール分解(4)を(3)に代入すれば

$$\frac{d^2}{dt^2} (\mathbf{Q}^T \mathbf{z}) = -\mathbf{D} (\mathbf{Q}^T \mathbf{z}) = \begin{bmatrix} -\omega_1^2 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & -\omega_n^2 \end{bmatrix} (\mathbf{Q}^T \mathbf{z})$$

となる。 $\mathbf{Q}^T \mathbf{z} = \mathbf{w} = [w_1 \cdots w_n]^T$ とおけば、直前の式は $\frac{d^2 w_i(t)}{dt^2} = -\omega_i^2 w_i(t)$ ($\omega_i > 0$) 型の 単振動 simple vibration / oscillation の方程式となり、その解は $w_i(t) = C_{i1} \cos \omega_i t + C_{i2} \sin \omega_i t$ (C_{i1}, C_{i2} は任意定数) にとって与えられることがよく知られている。ゆえに、

$$\mathbf{w} = \mathbf{Q}^T \mathbf{z} = \begin{bmatrix} C_{11} \cos \omega_1 t + C_{12} \sin \omega_1 t \\ \vdots \\ C_{n1} \cos \omega_n t + C_{n2} \sin \omega_n t \end{bmatrix} \text{ となる。 } \mathbf{z} = \mathbf{M}^{1/2} \mathbf{y} \text{ を想起すれば、(5)式が得られる。(6)}$$

は(5)の簡単な書き換えに過ぎない。 ■

例 $n = 2, m_1 = 4, m_2 = 1, k_1 = 6, k_2 = 2$ の場合 (2)に対応する運動方程式は

$$\mathbf{M} \frac{d^2 \mathbf{y}}{dt^2} = -\mathbf{K} \mathbf{y}, \text{ すなわち, } \frac{d^2}{dt^2} \begin{bmatrix} 4y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 8 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

である。ここに

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}, \mathbf{K} = \begin{bmatrix} k_1 + k_2 & -k_2 \\ -k_2 & k_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix}$$

ゆえに、(3)に対応する方程式は、 $\mathbf{L} = \mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{K} \mathbf{M}^{-1/2} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}, \mathbf{z} = \mathbf{M}^{1/2} \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 2y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$ ゆえ、

$$\frac{d^2 \mathbf{z}}{dt^2} = -\mathbf{L} \mathbf{z}, \text{ すなわち, } \frac{d^2}{dt^2} \begin{bmatrix} 2y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

となる。 \mathbf{L} のシュール分解は

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \right) \equiv \mathbf{Q} \mathbf{D} \mathbf{Q}^T \quad \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega_1^2 & 0 \\ 0 & \omega_2^2 \end{bmatrix} \right)$$

であるから、未知ベクトル \mathbf{y} は次式によって与えられる：

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= \mathbf{M}^{-1/2} \mathbf{Q} \begin{bmatrix} C_{11} \cos \omega_1 t + C_{12} \sin \omega_1 t \\ C_{21} \cos \omega_2 t + C_{22} \sin \omega_2 t \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{11} \cos t + C_{12} \sin t \\ C_{21} \cos \sqrt{3}t + C_{22} \sin \sqrt{3}t \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{11} \cos t + C_{12} \sin t \\ C_{21} \cos \sqrt{3}t + C_{22} \sin \sqrt{3}t \end{bmatrix}$$

固有振動は $\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \cos t$, $\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \sin t$, $\begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix} \cos \sqrt{3}t$, $\begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix} \sin \sqrt{3}t$ である。■

8.7 重要不等式 3 つ

線形代数における重要な不等式はたくさんあるが、ここに挙げるものはとくに応用が広い。一般化はレッスン 12、14、15 で行う。

任意の $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T \in \mathbf{R}^{n \times 1}$ に対して $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2} \geq 0$ を \mathbf{x} の ノルム norm (または 2-ノルム) という。次の不等式が成り立つ:

(1) $|\mathbf{x}^T \mathbf{y}| \leq \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\|$ (コーシー・シュワルツ不等式)

(2) 任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$ に対して、 $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ (三角不等式)

(3) 任意の $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{m \times 1}$, $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m \times n}$, $\mathbf{y} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$ に対して、 $|\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y}| \leq \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\| \sqrt{\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}$

ここに、 $\lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})$ は $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ の最大固有値を表す。 $\mathbf{A} = \mathbf{I}$ なら(1)に還元する。

証明 (1) $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$ としてよい。すると(1)は $|\frac{\mathbf{x}^T \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|}| \leq 1$ と同値であり、しかも

$\|\mathbf{x} / \|\mathbf{x}\| \| = \|\mathbf{y} / \|\mathbf{y}\| \| = 1$ だから、 $\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{y}\| = 1$ の条件下で(1)を証明すれば十分である。実際、

$$0 \leq (\mathbf{x} - (\mathbf{x}^T \mathbf{y}) \mathbf{y})^T (\mathbf{x} - (\mathbf{x}^T \mathbf{y}) \mathbf{y}) = 2(1 - (\mathbf{x}^T \mathbf{y})^2) \text{ となる。}$$

(2) $(\|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|)^2 - \|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|^2 \geq 0$ を示せばよい。左辺を展開し、(2)を使えばすぐ出る。

(3) $|\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{y}| \leq \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{A} \mathbf{y}\|$ ((1)による) $= \|\mathbf{x}\| \sqrt{\mathbf{y}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{y}}$ ゆえに、 $\mathbf{y}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{y} \leq \lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \|\mathbf{y}\|^2$ を

示せばよい。 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ のシュール分解を $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{Q} \mathbf{D} \mathbf{Q}^T$ 、ここに $\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}$, $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} d_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & d_n \end{bmatrix}$ 、

とすれば、 $0 \leq (\mathbf{A} \mathbf{y})^T (\mathbf{A} \mathbf{y}) = \mathbf{y}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{Q} \mathbf{D} \mathbf{Q}^T \mathbf{y} = (\mathbf{Q}^T \mathbf{y})^T \mathbf{D} (\mathbf{Q}^T \mathbf{y}) = d_1 z_1^2 + \dots + d_n z_n^2$

が成り立つ。ただし、 $\mathbf{Q}^T \mathbf{y} \equiv \mathbf{z} = [z_1 \cdots z_n]^T$ と書いている。これより、 $d_1, \dots, d_n \geq 0$ となり、

$$\mathbf{y}^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{y} \leq \max_{1 \leq i \leq n} d_i \|\mathbf{z}\|^2 = \lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \|\mathbf{Q}^T \mathbf{y}\|^2 = \lambda_{\max}(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \|\mathbf{y}\|^2 \quad (\because \mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}) \quad \blacksquare$$

8.8 レーリー商と固有値近似

レーリー商の定義については 8.1 節参照。この節では、話を実対称行列に限定し、レーリー商は優れた固有値近似法であることを示す。そこで、 $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbf{R}^{n \times n}$ を与えられた実対称行列とし、その固有値を $\lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_n$ とする。いま、 $\mathbf{0} \neq \mathbf{v} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$ を任意の一つとり、レーリー商 $\rho(\mathbf{v}) = \mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v} / \mathbf{v}^T \mathbf{v}$ を作れば、 $\lambda_1 \leq \rho(\mathbf{v}) \leq \lambda_n$ が成り立つことはすでに知っている (8.1 節)。

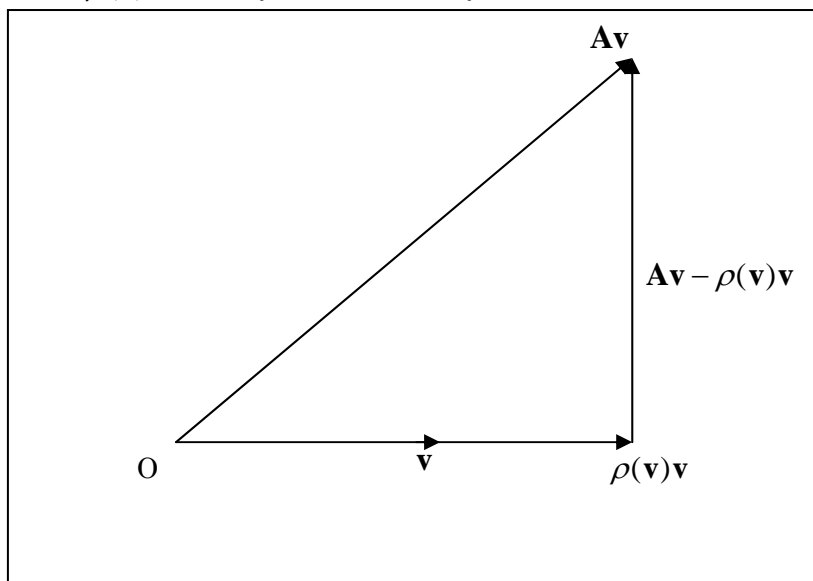
(I) レーリー商の特徴づけ $f(\lambda) \equiv \|\mathbf{A} \mathbf{v} - \lambda \mathbf{v}\|^2$ は $\lambda = \rho(\mathbf{v}) = \mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v} / \mathbf{v}^T \mathbf{v}$ のとき最小化される (\mathbf{v} がたまたま固有ベクトルなら $f(\lambda)$ の最小値は 0 であることに注意)。

証明 \mathbf{A} は実対称行列であることに注意して $f(\lambda)$ を展開すれば、

$$f(\lambda) / \|\mathbf{v}\|^2 = (\lambda - \rho(\mathbf{v}))^2 - \rho^2(\mathbf{v}) + \|\mathbf{A} \mathbf{v}\|^2 / \|\mathbf{v}\|^2$$

が出る。これより $f(\lambda)$ は $\lambda = \rho(\mathbf{v})$ のとき最小値 $\|\mathbf{A} \mathbf{v}\|^2 - (\rho(\mathbf{v}) \|\mathbf{v}\|)^2$ をとることがわかる。■

(II) 幾何学的解釈 $\mu(\mathbf{v}) \mathbf{v}$ は直線 $\{t \mathbf{v} : -\infty < t < +\infty\}$ 上への $\mathbf{A} \mathbf{v}$ のからの正射影を表す (下図)。



説明 レーリー商の定義から、 $\mathbf{v}^T (\mathbf{A} \mathbf{v} - \rho(\mathbf{v}) \mathbf{v}) = 0$ が成り立つ。これはベクトル $\mathbf{A} \mathbf{v} - \rho(\mathbf{v}) \mathbf{v}$ と \mathbf{v} の直交条件に他ならない。

(III) 誤差評価 λ_1 を $\mathbf{A} (\neq \lambda_1 \mathbf{I})$ の任意の固有値とすれば、

$$(1) \quad |\rho(\mathbf{v}) - \lambda_1| \leq \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{v} - \lambda_1\mathbf{v}\|^2 / \|\mathbf{v}\|^2}{\min_{\lambda_i \neq \lambda_1} |\lambda_i - \lambda_1|}.$$

ここに、分母 $\min_{\lambda_i \neq \lambda_1} |\lambda_i - \lambda_1|$ は λ_1 から最短距離にある他固有値までの距離を表す。

証明 $\mathbf{v}^T \mathbf{v} = 1$ と仮定してよい。すると、 $\rho(\mathbf{v}) - \lambda_1 = \mathbf{v}^T \mathbf{A}\mathbf{v} - \lambda_1 = \mathbf{v}^T (\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}) \mathbf{v}$ が出る。ここ

で、 $\mathbf{r} \equiv (\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}) \mathbf{v}$ とおく。 \mathbf{A} のシュール分解を $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T$ 、 $\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}$ 、 $\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}_1 \end{bmatrix}$

とする。ここに \mathbf{D}_1 は λ_1 とは異なる固有値をもつ対角行列を表す。すると

$$\mathbf{r} = (\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}) \mathbf{v} = \mathbf{Q}(\mathbf{D} - \lambda_1 \mathbf{I})\mathbf{Q}^T \mathbf{v} = \mathbf{Q} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}_1 - \lambda_1 \mathbf{I} \end{bmatrix} \mathbf{Q}^T \mathbf{v}$$

$$\text{ゆえに、} \rho(\mathbf{v}) - \lambda_1 = \mathbf{v}^T \mathbf{r} = \mathbf{v}^T \mathbf{Q} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}_1 - \lambda_1 \mathbf{I} \end{bmatrix} \mathbf{Q}^T \mathbf{v}$$

$$= (\mathbf{v}^T \mathbf{Q} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}_1 - \lambda_1 \mathbf{I} \end{bmatrix} \mathbf{Q}^T) (\mathbf{Q} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{D}_1 - \lambda_1 \mathbf{I})^{-1} \end{bmatrix} \mathbf{Q}^T) (\mathbf{Q} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}_1 - \lambda_1 \mathbf{I} \end{bmatrix} \mathbf{Q}^T \mathbf{v})$$

$$= (\mathbf{Q}^T \mathbf{r})^T \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{D}_1 - \lambda_1 \mathbf{I})^{-1} \end{bmatrix} (\mathbf{Q}^T \mathbf{r}) \equiv (\mathbf{Q}^T \mathbf{r})^T \mathbf{D}_2 (\mathbf{Q}^T \mathbf{r})$$

絶対値をとり、前節の不等式(3)を使うと ($\|\mathbf{Q}^T \mathbf{r}\| = \sqrt{(\mathbf{Q}^T \mathbf{r})^T \mathbf{Q}^T \mathbf{r}} = \sqrt{\mathbf{r}^T (\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T) \mathbf{r}} = \|\mathbf{r}\|$ に注意)、

$$|\rho(\mathbf{v}) - \lambda_1| = |(\mathbf{Q}^T \mathbf{r})^T \mathbf{D}_2 (\mathbf{Q}^T \mathbf{r})| \leq \|\mathbf{Q}^T \mathbf{r}\|^2 \sqrt{\lambda_{\max}(\mathbf{D}_2^T \mathbf{D}_2)} = \|\mathbf{r}\|^2 / \min\{|\lambda_i - \lambda_1| : \lambda_i \neq \lambda_1\}$$

これは証明すべき不等式(1)に他ならない。 ■

問題 8.5 によれば、 \mathbf{A} を実対称行列、 λ を任意の実数、 $\mathbf{v}^T \mathbf{v} = 1$ ($\mathbf{v} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$) とすれば、 $|\lambda - \lambda_1| \leq \|\mathbf{A}\mathbf{v} - \lambda\mathbf{v}\|$ を満たす \mathbf{A} の固有値 λ_1 が存在する。これを(1)式と比較すると、右辺の $\|\cdot\|$ のべき乗の値が違ふ。これは $\lambda = \rho(\mathbf{v})$ という特別うまい選び方のお陰といえる。

(IV) 誤差評価 (Ben Noble, Applied Linear algebra, Prentice-Hall, 1969, Theorem 12.14) い

ま、 λ_1 を \mathbf{A} の固有値、 $\mathbf{A}\mathbf{q}_1 = \lambda_1 \mathbf{q}_1$, $\|\mathbf{q}_1\| = 1$, $\|\mathbf{z}\| = 1$ ($\mathbf{q}_1, \mathbf{z} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$)、 $\mathbf{v} = \mathbf{q}_1 + \varepsilon \mathbf{z}$ とすれば、

(2) $\mathbf{A}\mathbf{v} - \lambda_1\mathbf{v} = \varepsilon(\mathbf{A}\mathbf{z} - \lambda_1\mathbf{z})$

(3) $|\rho(\mathbf{v}) - \lambda_1| \leq \frac{\varepsilon^2 \|\mathbf{A}\mathbf{z} - \lambda_1\mathbf{z}\|^2}{\min_{\lambda_i \neq \lambda_1} |\lambda_i - \lambda_1| \cdot \|\mathbf{v}\|^2}$

(4) $\rho(\mathbf{v}) - \lambda_1 = \varepsilon^2(\mu(\mathbf{z}) - \lambda_1) / \|\mathbf{v}\|^2$

証明 $\mathbf{A}\mathbf{q}_1 = \lambda_1\mathbf{q}_1$ と定義式 $\mathbf{v} = \mathbf{q}_1 + \varepsilon\mathbf{z}$ を使えば、(2)式は簡単に出る。これを(III)(1)に代入すれば不等式(3)が従う。つぎに $\|\mathbf{q}_1\| = 1$ 、 $\|\mathbf{z}\| = 1$ を考慮すると

$$\|\mathbf{v}\|^2 = \mathbf{v}^T\mathbf{v} = (\mathbf{q}_1 + \varepsilon\mathbf{z})^T(\mathbf{q}_1 + \varepsilon\mathbf{z}) = 1 + 2\alpha\varepsilon + \varepsilon^2 \quad (\alpha \equiv \mathbf{q}_1^T\mathbf{z})$$

ゆえに、

$$\begin{aligned} (\rho(\mathbf{v}) - \lambda_1)\mathbf{v}^T\mathbf{v} &= \mathbf{v}^T\mathbf{A}\mathbf{v} - \lambda_1\mathbf{v}^T\mathbf{v} = (\mathbf{q}_1 + \varepsilon\mathbf{z})^T\mathbf{A}(\mathbf{q}_1 + \varepsilon\mathbf{z}) - \lambda_1\mathbf{v}^T\mathbf{v} \\ &= \lambda_1 + 2\lambda_1\alpha\varepsilon + \varepsilon^2\mathbf{z}^T\mathbf{A}\mathbf{z} - \lambda_1(1 + 2\alpha\varepsilon + \varepsilon^2) = \varepsilon^2(\rho(\mathbf{z}) - \lambda_1) \quad \blacksquare \end{aligned}$$

(3)を見ると、 $|\varepsilon| \ll 1$ なら、 $|\rho(\mathbf{v}) - \lambda_1|$ は高々 ε^2 の定数倍で抑えられる。これは再びレーリ一商が固有値近似手段として優れていることを物語っている。では「 $\mathbf{A}\mathbf{v}_k - \rho_k\mathbf{v}_k \rightarrow 0$ 、 $\rho_k = \mathbf{v}_k^T\mathbf{A}\mathbf{v}_k \rightarrow \lambda_1$ ($k \rightarrow \infty, \mathbf{v}_k^T\mathbf{v}_k = 1$)」を満たすようなベクトル列 $\{\mathbf{v}_k\}$ をどう構築すればよいか？数値解析の専門書によれば、答えはレーリ一商逆反復法 **Rayleigh quotient inverse iteration** である（次例参照）。

例 8.6 節の例を使う。すなわち、シュール分解

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\right) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\right)^T \equiv \mathbf{QDQ}^T$$

を考えると、 \mathbf{A} の固有値は $\lambda_1 = 1, \lambda_3 = 3$ 、対応する正規直交固有ベクトル系は

$$\left\{ \mathbf{q}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7071 \\ 0.7071 \end{bmatrix}, \mathbf{q}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7071 \\ -0.7071 \end{bmatrix} \right\}$$

である。

(I) いま、試みに、 $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.8 \end{bmatrix}$ ($\|\mathbf{v}_1\| = 1$) をとると、

$$\rho_1 \equiv \rho(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T\mathbf{A}\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 0.6 & 0.8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.8 \end{bmatrix} = 1.04 \approx \lambda_1 (= 1)$$

上で証明した誤差評価式(1)を用いると

$$0.04 = |1.04 - 1| = |\mu_1 - \lambda_1| \leq \|(\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I})\mathbf{v}_1\|^2 / |1 - 3| = \left\| \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.8 \end{bmatrix} \right\|^2 / 2 = 0.04$$

ここに、「 \leq 」は実際には「 $=$ 」となっているが、これは偶然のなせるわざである。

レーリー商逆反復法によれば改良近似固有ベクトル \mathbf{v}_2 は

$$(\mathbf{A} - \rho_1 \mathbf{I})\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_1 : \begin{bmatrix} 0.99 & -1 \\ -1 & 0.99 \end{bmatrix} \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.8 \end{bmatrix}$$

の解 \mathbf{v}_2 とることになっている。計算すると

$$\mathbf{v}_2 = -\begin{bmatrix} 70.05 \\ 69.95 \end{bmatrix}, \|\mathbf{v}_2\| = \sqrt{9800} = 98.99, \frac{\mathbf{v}_2}{\|\mathbf{v}_2\|} = -\begin{bmatrix} 0.7076 \\ 0.7066 \end{bmatrix}$$

固有ベクトルのスカラー倍だけの自由度があるから、 \mathbf{v}_2 は厳密な固有ベクトル \mathbf{q}_1 に近いことがわかる。これから計算したレーリー商は

$$\rho_2 \equiv \rho(\mathbf{v}_2) = \frac{\mathbf{v}_2^T \mathbf{A} \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2^T \mathbf{v}_2} = 1.0003$$

この値は ρ_1 に比べてさらによい $\lambda_1 = 1$ の近似値となっていることは明らかである。

固有ベクトルの近似について考える。精度の目安として $\mathbf{q}_1 = (1/\sqrt{2})[1, 1]^T$ との間の角度をとると (cos の値が ± 1 に近いほどよい)

$$\mathbf{q}_1 \text{ と } \mathbf{v}_1 \text{ のなす角 : } \cos \theta_1 = \mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_1 = (1/\sqrt{2})[1, 1] \begin{bmatrix} 0.6 \\ 0.8 \end{bmatrix} = .98995$$

$$\mathbf{q}_1 \text{ と } \mathbf{v}_2 \text{ のなす角 : } \cos \theta_2 = \mathbf{q}_1^T \mathbf{v}_2 / \|\mathbf{v}_2\| = (1/\sqrt{2})[1, 1] \begin{bmatrix} -0.7076 \\ -0.7066 \end{bmatrix} = -0.99999$$

(II) 第 2 の試みとして、 $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 0.6 \\ -0.8 \end{bmatrix}$ ($\mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 = 1$) をとると、

$$\rho_1 \equiv \mathbf{v}_1^T \mathbf{A} \mathbf{v}_1 = [0.6 \quad -0.8] \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.6 \\ -0.8 \end{bmatrix} = 2.96 \approx \lambda_2 (= 3)$$

誤差評価式(1)を $\lambda_2 = 3$ を対象に使うと

$$0.04 = |2.96 - 3| = |\rho_1 - \lambda_2| \leq \|(\mathbf{A} - \lambda_2 \mathbf{I})\mathbf{v}_1\|^2 / |3 - 1| = \left\| \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.6 \\ -0.8 \end{bmatrix} \right\|^2 / 2 = 0.04$$

ここでも、「 \leq 」は実際には「 $=$ 」となっているが、これもまた偶然である。レーリー商逆反復法による改良近似固有ベクトル \mathbf{v}_2 、すなわち、

$$(\mathbf{A} - \mu_1 \mathbf{I})\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_1 : \begin{bmatrix} -0.96 & -1 \\ -1 & -0.96 \end{bmatrix} \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0.6 \\ -0.8 \end{bmatrix}$$

の解 \mathbf{v}_2 、を計算すると、

$$\mathbf{v}_2 = -\begin{bmatrix} 17.55 \\ -17.45 \end{bmatrix}, \|\mathbf{v}_2\| = \sqrt{612.5} = 24.75, \frac{\mathbf{v}_2}{\|\mathbf{v}_2\|} = \begin{bmatrix} 0.7091 \\ -0.6051 \end{bmatrix}$$

固有ベクトルのスカラー倍だけの自由度があるから、 \mathbf{v}_2 は厳密な固有ベクトル \mathbf{q}_2 に近いことがわかる。これから計算したレーリー商は

$$\rho_2 \equiv \rho(\mathbf{v}_2) = \frac{\mathbf{v}_2^T \mathbf{A} \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2^T \mathbf{v}_2} = 2.9998$$

この値は ρ_1 に比べてさらによい $\lambda_2 = 3$ の近似値となっていることがわかる。

(III) 第 3 の試みとして $\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ をとると、 $\rho_1 \equiv \rho(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T \mathbf{A} \mathbf{v}_1 = 2$

レーリー逆反復法による改良近似固有ベクトルは

$$(\mathbf{A} - \rho_1 \mathbf{I}) \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_1 : \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

解 $\mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$ である。ゆえに、改良近似固有値は

$$(21) \quad \rho_2 \equiv \rho(\mathbf{v}_2) = \frac{\mathbf{v}_2^T \mathbf{A} \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2^T \mathbf{v}_2} = 2 = \rho_1$$

すなわち、もとに戻ってしまった！これも偶然のなせるわざだが、ともかく失敗してしまった。

以上の試みから、出発ベクトルが異なれば、レーリー商と対応近似ベクトルの収束先も異なり、ときに収束しないこともわかる。本例は簡単ながら教示的である。■

固有値近似に関する話題は以上とし、これ以降は直交行列の表現論と応用を話題とする。

8.9 2 次直交行列の標準形

与えられた 2 次直交行列 \mathbf{L} はかならず次のどちらかの型に属する：

$$(I) \quad \det \mathbf{L} = 1 \text{ なら、} \mathbf{L} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} = \mathbf{Q}_1 \begin{bmatrix} \cos \theta + i \sin \theta & 0 \\ 0 & \cos \theta - i \sin \theta \end{bmatrix} \mathbf{Q}_1^T$$

(シュール分解)。ここに、 $\mathbf{Q}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{bmatrix}$ 、 $\mathbf{Q}_1^* \mathbf{Q}_1 = \mathbf{I}$ である。この場合、 \mathbf{L} は原点のま

わりに角 θ だけ回転する演算を表す。

$$(II) \quad \det \mathbf{L} = -1 \text{ なら、} \mathbf{L} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{bmatrix} = \mathbf{I} - 2\mathbf{nn}^T = \mathbf{Q}_2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{Q}_2^T \text{ (シュール分解)}$$

ここに、 $\mathbf{n}^T = [-\sin(\theta/2), \cos(\theta/2)]$ 、 $\mathbf{Q}_2 = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix}$ 、 $\mathbf{Q}_2^T \mathbf{Q}_2 = \mathbf{I}$ である。

この場合、 \mathbf{L} は原点を通り、ベクトル \mathbf{n} に垂直な直線に関する反射を表す。これは前レッスン 7.2 節で扱った反射行列の特別な場合である。

証明 $\mathbf{L} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ を与えられた直交行列とすれば、 $\mathbf{L}^T \mathbf{L} = \mathbf{I}$ より、 $a^2 + c^2 = 1$ 、 $b^2 + d^2 = 1$ 、

$ab + cd = 0$ だから、点 $P(a, c)$ 、 $Q(b, d)$ は単位円周上にあり、ベクトル \overline{OP} 、 \overline{OQ} は直交する。

ゆえに、 $a = \cos \theta$ 、 $c = \sin \theta$ 、 $b = \cos(\theta \pm \pi/2)$ 、 $d = \sin(\theta \pm \pi/2)$ と書ける。これは \mathbf{X} が(1) または(2)の形をもつことに他ならない。その他の事実の検算は練習問題とする。■

例 $\mathbf{L}_1 = (1/2) \begin{bmatrix} \sqrt{3} & -1 \\ 1 & \sqrt{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix}$ ($c = \cos(\pi/6)$, $s = \sin(\pi/6)$) とすれば、任意の

$\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{2 \times 1}$ に対して、 $\mathbf{L}_1 \mathbf{x}$ は \mathbf{x} を原点の周りに角 $\pi/6$ だけ正方向に回転したものを表す。

$\mathbf{L}_2 = (1/2) \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c & s \\ s & -c \end{bmatrix}$ ($c = \cos(\pi/3)$, $s = \sin(\pi/3)$) とすれば、任意の $\mathbf{L}_2 \mathbf{x}$ は、

原点を通り、 $\mathbf{n} = (1/2) \begin{bmatrix} -1 & \sqrt{3} \end{bmatrix}^T$ に垂直な直線に関する \mathbf{x} の鏡像を表す。■

8.10 3次直交行列の標準形

3次直交行列は剛体の運動解析やコンピュータ・グラフィックスへの応用上重要である。この節では、任意の3次直交行列 \mathbf{L} は、 $\det \mathbf{L} = 1$ なら空間の回転を表し、 $\det \mathbf{L} = -1$ なら回転と

反射の合成を表すことを学ぶ。まず、 $\mathbf{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ l_{21} & l_{22} & l_{23} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix}$ を3次実直交行列とすれば、 $\mathbf{L}^T \mathbf{L} = \mathbf{I}$ ゆ

え、 $\det \mathbf{L} = \pm 1$ である。次に事実が成り立つ：

(I) $\det \mathbf{L} = 1$ の場合 (ただし $\mathbf{L} \neq \mathbf{I}$ とする)

(A) \mathbf{L} の固有値は1、 $\cos \theta \pm i \sin \theta$ の形に表現できる。

(B) \mathbf{n} を固有値 1 に対応する単位固有ベクトルとすれば、すなわち、 $\mathbf{L} \mathbf{n} = \mathbf{n} \equiv \begin{bmatrix} n_1 & n_2 & n_3 \end{bmatrix}^T$ 、

$\mathbf{n}^T \mathbf{n} = 1$ とすれば、 \mathbf{L} は、

$$\mathbf{L} = \mathbf{n} \mathbf{n}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{n} \mathbf{n}^T) \cos \theta + \mathbf{N} \sin \theta, \quad \text{ここに} \quad \mathbf{N} \equiv \begin{bmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{bmatrix}$$

の形に書ける。また、任意の $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ x_3]^T$ に対して、 $\mathbf{N}\mathbf{x} = \mathbf{n} \times \mathbf{x} = \det \begin{bmatrix} \mathbf{i} & n_1 & x_1 \\ \mathbf{j} & n_2 & x_2 \\ \mathbf{k} & n_3 & x_3 \end{bmatrix}$

$(\mathbf{i} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{j} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{k} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix})$ 、レッスン 6、6.19 節ベクトル積参照)、 $\mathbf{x}^T \mathbf{N}\mathbf{x} = 0$ 、 $\mathbf{N}\mathbf{n} = \mathbf{0}$ 、

$\mathbf{N}^T = -\mathbf{N}$ 、 $\mathbf{N}^T \mathbf{N} = -\mathbf{N}^2 = \mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T$ が成り立つ。 \mathbf{L} を展開すれば

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} n_1^2 + (1-n_1^2)\cos\theta & n_1 n_2 (1-\cos\theta) - n_3 \sin\theta & n_1 n_3 (1-\cos\theta) + n_2 \sin\theta \\ n_1 n_2 (1-\cos\theta) + n_3 \sin\theta & n_2^2 + (1-n_2^2)\cos\theta & n_2 n_3 (1-\cos\theta) - n_1 \sin\theta \\ n_3 n_1 (1-\cos\theta) - n_2 \sin\theta & n_3 n_2 (1-\cos\theta) + n_1 \sin\theta & n_3^2 + (1-n_3^2)\cos\theta \end{bmatrix}$$

(C) \mathbf{n} , $\cos\theta$, $\sin\theta$ の計算 次式が成り立つ：

$$\mathbf{c}_1 \equiv \begin{bmatrix} 1+l_{11}-l_{22}-l_{33} \\ l_{12}+l_{21} \\ l_{13}+l_{31} \end{bmatrix} = 2(1-\cos\theta)n_1\mathbf{n}, \quad \mathbf{c}_2 \equiv \begin{bmatrix} l_{12}+l_{21} \\ 1-l_{11}+l_{22}-l_{33} \\ l_{23}+l_{32} \end{bmatrix} = 2(1-\cos\theta)n_2\mathbf{n}$$

$$\mathbf{c}_3 \equiv \begin{bmatrix} l_{13}+l_{31} \\ l_{23}+l_{32} \\ 1-l_{11}-l_{22}+l_{33} \end{bmatrix} = 2(1-\cos\theta)n_3\mathbf{n}$$

ゆえに、任意の $\mathbf{c}_i \neq \mathbf{0}$ を一つとれば、 \mathbf{n} は $\mathbf{n} = \pm \mathbf{c}_i / \sqrt{\mathbf{c}_i^T \mathbf{c}_i}$ によって定まる。ここに、ベクトル $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3$ は同時に $\mathbf{0}$ とはならない ($\because \mathbf{n} \neq \mathbf{0}, \mathbf{L} \neq \mathbf{I}$)。 $\cos\theta, \sin\theta$ は次式から定まる：

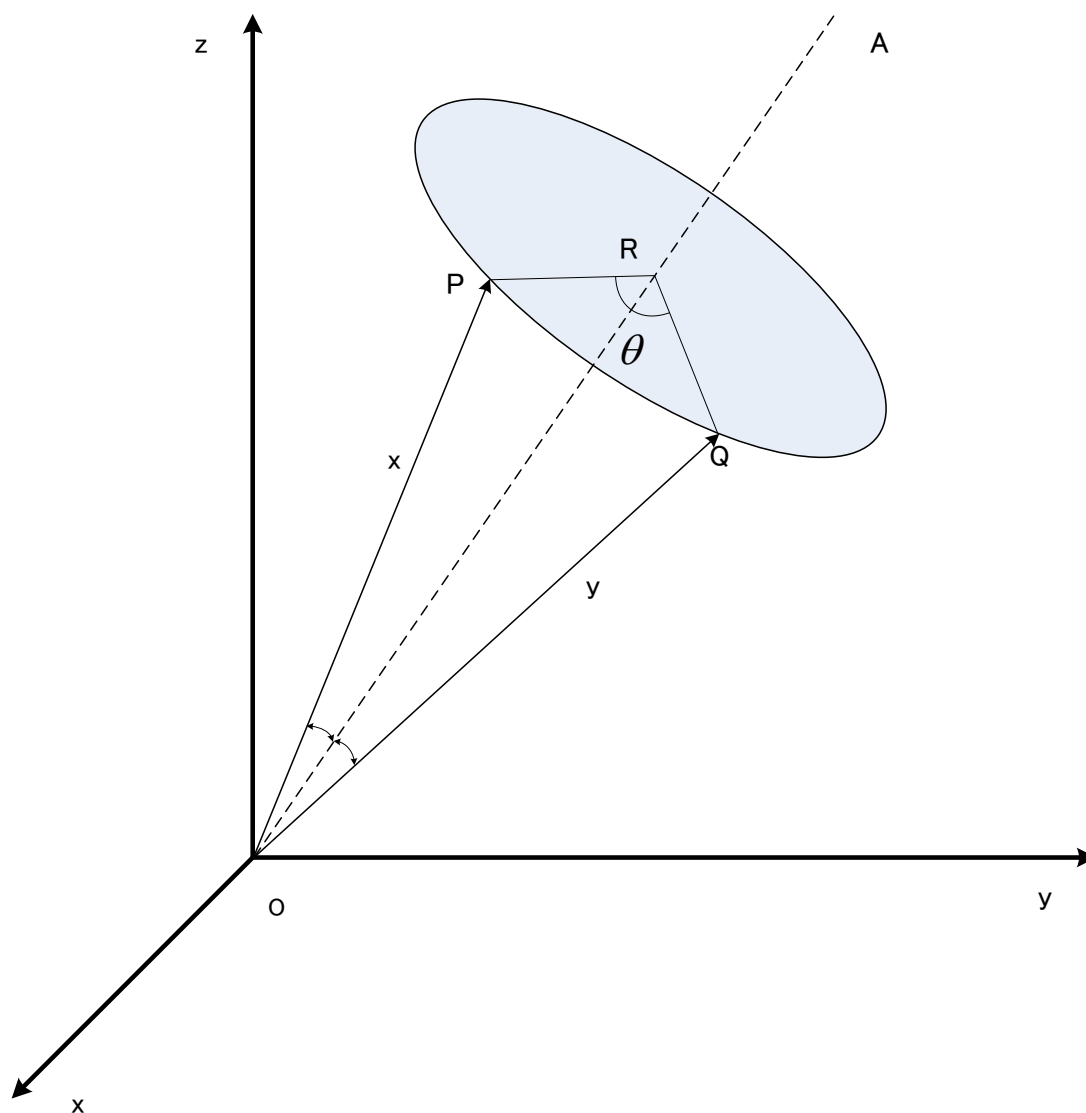
$$2\cos\theta = l_{11} + l_{22} + l_{33} - 1$$

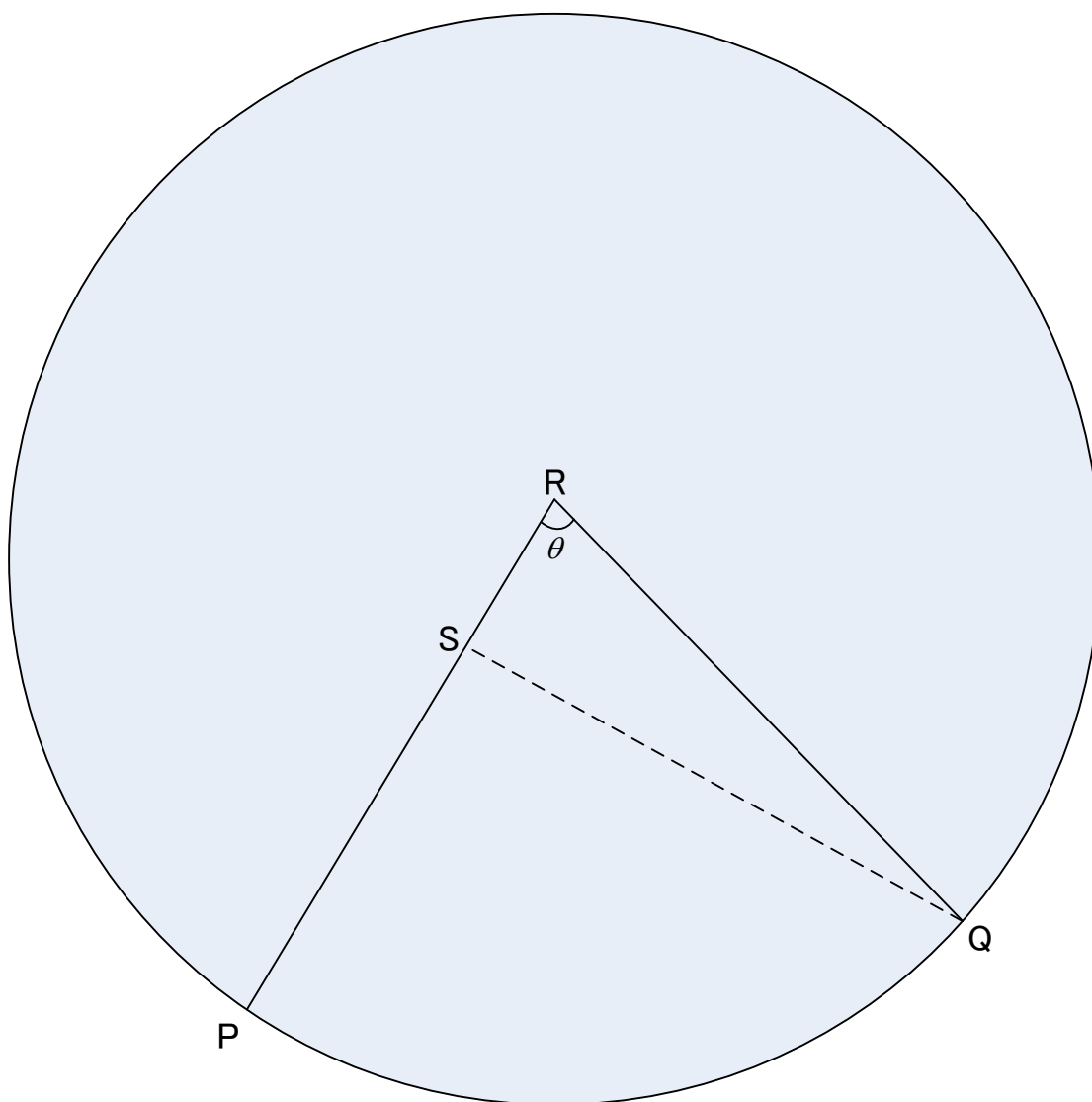
$$2n_1 \sin\theta = l_{32} - l_{23}, \quad 2n_2 \sin\theta = l_{13} - l_{31}, \quad 2n_3 \sin\theta = l_{21} - l_{12}$$

(D) 幾何学的解釈 任意の $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{3 \times 1}$ に対して $\mathbf{y} = \mathbf{L}\mathbf{x}$ は \mathbf{x} を \mathbf{n} のまわりに θ だけ回転して得られるベクトルを表す。ここに、回転の正の向きは、 \mathbf{n} の向きに右ネジを進めさせるような向きである。また、 $\mathbf{L}\mathbf{x} = \mathbf{n}(\mathbf{n}^T \mathbf{x}) + (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T)\mathbf{x}\cos\theta + \mathbf{N}\mathbf{x}\sin\theta$ における、右辺各項は直交するベクトルを表す。各項の幾何学的解釈を得るには、次の作図を行う：まず $\mathbf{x} = \overline{OP}$, $\mathbf{L}\mathbf{x} = \overline{OQ}$ により点 P, Q を定め、 P, Q を通り \mathbf{n} に垂直な平面を H と呼ぶ。そして原点を通り \mathbf{n} 方向の直線が平面 H と交わる点を R とする。次に点 Q より線分 \overline{RP} に下した垂線の足を S と定義する。すると上式の各項は次のように特定できる：

$$\mathbf{n}(\mathbf{n}^T \mathbf{x}) = \overrightarrow{OR}, \quad (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T)\mathbf{x} \cos \theta = \overrightarrow{RS}, \quad \mathbf{N}\mathbf{x} \sin \theta = \overrightarrow{SQ}, \quad \angle PRQ = \theta$$

下図参照 (Ben Noble, *Applied Linear Algebra*, Prentice-Hall, 1969, First Edition Ex.12.51, pp.421-422、による) :





PQR plane

(E) 逆 任意の $\mathbf{n} = [n_1 \ n_2 \ n_3]^T$ ($\mathbf{n}^T \mathbf{n} = 1$)、任意の θ に対して

$$\mathbf{L} = \mathbf{n}\mathbf{n}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T)\cos\theta + \mathbf{N}\sin\theta \quad \left(\mathbf{N} = \begin{bmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{bmatrix} \right) \text{ で定義さえる } \mathbf{L} \text{ は } \det \mathbf{L} = 1 \text{ を}$$

満たす直交行列を表す。

(II) $\det \mathbf{L} = -1$ の場合 腕試し問題 8.14 参照。

証明 幾何学的作図に基づく証明も知られているが、ここではシュール分解の応用として代数的証明を与える。

(A) $\det(\mathbf{L} - \mathbf{I}) = \det(\mathbf{L} - \mathbf{L}\mathbf{L}^T) = \det \mathbf{L} \det(\mathbf{I} - \mathbf{L}^T) = 1 \cdot (-1)^3 \det(\mathbf{L} - \mathbf{I})$ ($\because \det \mathbf{L} = 1$)
 これより $\det(\mathbf{L} - \mathbf{I}) = 0$ が従う。これは 1 が \mathbf{L} の固有値であることを示している。他固有値が $\cos \theta \pm i \sin \theta$ の形に書けることは次項(B)中で示す。

(B) \mathbf{n} を第 1 列にもつ任意の直交行列 $\mathbf{Q} = [\mathbf{n} \ \mathbf{a} \ \mathbf{b}]$ (ただし、 $\det \mathbf{Q} = 1$) を考えると、

直接計算により

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^T \mathbf{L} \mathbf{Q} &= \begin{bmatrix} \mathbf{n}^T \\ \mathbf{a}^T \\ \mathbf{b}^T \end{bmatrix} \mathbf{L} [\mathbf{n} \ \mathbf{a} \ \mathbf{b}] = \begin{bmatrix} \mathbf{n}^T \\ \mathbf{a}^T \\ \mathbf{b}^T \end{bmatrix} [\mathbf{L}\mathbf{n} \ \mathbf{L}\mathbf{a} \ \mathbf{L}\mathbf{b}] = \begin{bmatrix} \mathbf{n}^T \\ \mathbf{a}^T \\ \mathbf{b}^T \end{bmatrix} [\mathbf{n} \ \mathbf{L}\mathbf{a} \ \mathbf{L}\mathbf{b}] \\ &= \begin{bmatrix} 1 & c & d \\ 0 & e & f \\ 0 & g & h \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{u} \\ \mathbf{0} & \mathbf{L}_1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

\mathbf{Q}, \mathbf{L} は直交行列だから、 $\mathbf{Q}^T \mathbf{L} \mathbf{Q}$ も直交行列である。これより $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ および \mathbf{L}_1 は 2 次直交行列であることがわかる。上式の行列式をとり、 $\det \mathbf{L} = 1, \det \mathbf{Q} = 1$ を考慮すると、 $\det \mathbf{L}_1 = 1$ が得られる。従って、前節の結果により \mathbf{L}_1 は $\mathbf{L}_1 = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$ の形に書ける。以上を前式に代入し、 \mathbf{L} について解けば

$$\mathbf{L} = [\mathbf{n} \ \mathbf{a} \ \mathbf{b}] \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{n}^T \\ \mathbf{a}^T \\ \mathbf{b}^T \end{bmatrix} = \mathbf{n}\mathbf{n}^T + (\mathbf{a}\mathbf{a}^T + \mathbf{b}\mathbf{b}^T) \cos \theta + (\mathbf{b}\mathbf{a}^T - \mathbf{a}\mathbf{b}^T) \sin \theta$$

これは \mathbf{L} のシュール分解形に相当する。これより、 \mathbf{L} の固有値は $1, \cos \theta \pm i \sin \theta$ である。

さて、上式右辺から \mathbf{a}, \mathbf{b} を消去しよう。まず

$$\mathbf{I} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{n}\mathbf{n}^T + \mathbf{a}\mathbf{a}^T + \mathbf{b}\mathbf{b}^T \rightarrow \mathbf{a}\mathbf{a}^T + \mathbf{b}\mathbf{b}^T = \mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T$$

これを使えば、 \mathbf{L} は

$$\mathbf{L} = \mathbf{n}\mathbf{n}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T) \cos \theta + (\mathbf{b}\mathbf{a}^T - \mathbf{a}\mathbf{b}^T) \sin \theta$$

となる。つぎに、 $\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}^{-1} = (1/\det \mathbf{Q}) \text{Adj} \mathbf{Q} = \text{Adj} \mathbf{Q}$ ($\because \det \mathbf{Q} = 1$) ($\text{Adj} \mathbf{Q}$ は \mathbf{Q} の余因子行列を表す)、すなわち、 $\mathbf{Q} = (\text{Adj} \mathbf{Q})^T$ が成立する。第 1 列を等置すれば、

$$\mathbf{n} = [n_1 \ n_2 \ n_3]^T = [a_2 b_3 - a_3 b_2 \ a_3 b_1 - a_1 b_3 \ a_1 b_2 - a_2 b_1]^T = \mathbf{a} \times \mathbf{b} \quad (\text{ベクトル積、レッスン 7})$$

これより、 $\mathbf{b}\mathbf{a}^T - \mathbf{a}\mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{bmatrix} = \mathbf{N}$ が得られる。これを \mathbf{L} の式に代入すれば、

$\mathbf{L} = \mathbf{n}\mathbf{n}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T)\cos\theta + \mathbf{N}\sin\theta$ となり、(B)の前半が出る。後半の関係 $\mathbf{N}\mathbf{x} = \mathbf{n} \times \mathbf{x}$ はベク

トル積の定義から明らか。関係式 $\mathbf{x}^T\mathbf{N}\mathbf{x} = 0$ 、 $\mathbf{N}\mathbf{n} = \mathbf{0}$ 、 $\mathbf{N}^T = -\mathbf{N}$ 、 $\mathbf{N}^T\mathbf{N} = \mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T$ および \mathbf{L} の展開式も直接計算によって確認できる。

(C) 直接検算による。

(D) $\mathbf{L}\mathbf{x} = \mathbf{n}(\mathbf{n}^T\mathbf{x}) + (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T)\mathbf{x}\cos\theta + \mathbf{N}\mathbf{x}\sin\theta$ における右辺各項が直交することは、これまでで得られた関係式から検証できる。これと作図から幾何学的解釈 ($\mathbf{n}(\mathbf{n}^T\mathbf{x}) = \overline{OR}$, ほか) が得られる。

(E) $\mathbf{n}^T\mathbf{n} = 1$ なら任意の θ に対して $\mathbf{L} = \mathbf{n}\mathbf{n}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}^T)\cos\theta + \mathbf{N}\sin\theta$ が直交行列を表すことは $\mathbf{L}^T\mathbf{L} = \mathbf{I}$ の直接検証から確認できる。 $\det \mathbf{L} = 1$ を確かめるには、解析学の初歩的知識を使う。まず、 $f(\theta) \equiv \det \mathbf{L} = \det \mathbf{L}(\theta)$ は θ の実連続関数である。 $\mathbf{L}(\theta)$ は常に直交行列だから $f(\theta) = \pm 1$ 、また $\mathbf{L}(0) = \mathbf{I}$ ゆえ、 $f(0) = 1$ である。仮に $f(\theta_1) = -1$ となる θ_1 が存在したとすれば中間値の定理により $f(\theta_2) = 0$ となる値 θ_2 が 0 と θ_1 の間に存在しなければならない。これは常に $f(\theta) = \pm 1$ であることと矛盾する。■

例 1 $\mathbf{L} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 \\ -2 & 1 & 2 \\ -2 & -2 & -1 \end{bmatrix}$ は $\det \mathbf{L} = 1$ を満たす直交行列を表す。ゆえに、 \mathbf{L} は空間の回転を

表す。回転軸と回転角を求めてみよう。

試みに、(I)(C)における $\mathbf{c}_1 = \begin{bmatrix} 1 + l_{11} - l_{22} - l_{33} \\ l_{12} + l_{21} \\ l_{13} + l_{31} \end{bmatrix} = 2(1 - \cos\theta)n_1\mathbf{n}$ をとると

$$\mathbf{c}_1 = \left[1 + \frac{1}{3} - \frac{1}{3} + \frac{1}{3} \quad -\frac{2}{3} - \frac{2}{3} \quad \frac{2}{3} - \frac{2}{3} \right]^T = \frac{4}{3} [1 \ -1 \ 0]^T \neq \mathbf{0}$$

これが \mathbf{n} のスカラー倍だから、 \mathbf{n} として $\mathbf{n} = 1/\sqrt{2} [1 \ -1 \ 0]^T$ をとる ($\mathbf{n} = 1/\sqrt{2} [-1 \ 1 \ 0]^T$ をとってもよい)。すると、

$$\cos\theta = (l_{11} + l_{22} + l_{33} - 1)/2 = \{(1/3)(1+1-1) - 1\}/2 = -1/3 = -0.3333$$

$$\sin \theta = (l_{32} - l_{23}) / (2n_1) = (-2/3 - 2/3) / \{2(1/\sqrt{2})\} = -2\sqrt{2}/3 = -0.9428$$

以上により、 \mathbf{L} の回転軸は原点から点 $[1 \ -1 \ 0]^T$ に向かう直線で与えられ、回転角は

$\theta = -160.53^\circ$ で与えられる。■

例 2 原点より点 $[1, 1, 1]^T$ へ向かう直線のまわりの $\theta = +30^\circ$ 回転を表す直交行列を求めよう。

回転軸を表す単位ベクトルは、 $\mathbf{n} = (1/\sqrt{3})[1 \ 1 \ 1]^T$ で与えられる。すると (I) (D)により、求める行列は、 $\mathbf{L} = \mathbf{nn}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{nn}^T) \cos \theta + \mathbf{N} \sin \theta$ 、で与えられる。

$$\text{ここに、} \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{bmatrix} = (1/\sqrt{3}) \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \text{である。}$$

$$\text{以上により、} \mathbf{L} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1+\sqrt{3} & 1-\sqrt{3} & 1 \\ 1 & 1+\sqrt{3} & 1-\sqrt{3} \\ 1-\sqrt{3} & 1 & 1+\sqrt{3} \end{bmatrix} \quad \blacksquare$$

最後にひとこと：このレッスンと前レッスンはシュール分解のオンパレードであった。シュール分解は後のレッスンでもよく出てくる。正規行列 ($\mathbf{A}^* \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathbf{A}^*$) のシュール分解は対角行列であり、逆にシュール分解が対角行列なら、その行列は正規行列を表すという事実は記憶に値する。実務計算において頻出する、エルミート行列とユニタリ行列が正規行列である事実はシュール分解の実用性を保証する。以上でシュール分解の話はひとまず終わりにし、次のレッスンでは線形代数の最高峰とされるジョルダン分解の話に移る。



腕試し問題

問題 8.1 (エルミート行列の固有値単調定理) \mathbf{A} を n 次エルミート行列、 \mathbf{b} を n 次列ベクトル、 $\mathbf{B} = \mathbf{b}^* \mathbf{b}$ (これもエルミート行列)、 $\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{C}$ とする。 \mathbf{A} の固有値 (実数!) を $\alpha_1 \leq \dots \leq \alpha_n$ 、 \mathbf{C} の固有値を $\gamma_1 \leq \dots \leq \gamma_n$ とすれば、

$$\alpha_1 \leq \gamma_1 \leq \alpha_2 \leq \gamma_2 \leq \dots \leq \alpha_n \leq \gamma_n \leq \alpha_n + \mathbf{b}^* \mathbf{b}$$

が成立することを示せ。

(略証 一般公式「 $\mathbf{A} : m \times n, \mathbf{B} : n \times m$ なら $(-\lambda)^n \det(\mathbf{AB} - \lambda \mathbf{I}) = (-\lambda)^m \det(\mathbf{BA} - \lambda \mathbf{I})$ 」(レッスン 6「行列式」参照)を用いると $\det(\mathbf{bb}^* - \lambda \mathbf{I}) = (-\lambda)^{n-1}(\mathbf{b}^* \mathbf{b} - \lambda)$ 。ゆえに \mathbf{B} の固有値は $\beta_1 = \dots = \beta_{n-1} = 0 \leq \beta_n = \mathbf{b}^* \mathbf{b}$ で与えられる。これを単調定理に適用すればよい。■)

問題 8.2 (実 3 重対角行列の相似対称化) $n (\geq 2)$ 次実 3 重対角行列

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} d_1 & e_2 & & \mathbf{0} \\ f_2 & d_2 & e_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & e_n \\ \mathbf{0} & & & f_n & d_n \end{bmatrix}$$

は、 $e_i f_i > 0 (i = 2, \dots, n)$ なら、適当な可逆対角行列 \mathbf{D} をとれば、

$\mathbf{D}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{D}$ が対称行列となることを示せ。

(略証 $\mathbf{D}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{D} =$

$$\begin{bmatrix} d_1 & g_2 & & \mathbf{0} \\ g_2 & d_2 & g_3 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & g_n \\ \mathbf{0} & & & g_n & d_n \end{bmatrix}, \quad g_i = \sqrt{e_i f_i} \quad (i = 2, \dots, n)$$

を実現するような

\mathbf{D} を一つ求めよ。本問の事実は実用度が高い。■)

問題 8.3 シルベスターの惰性法則 与えられた n 次実対称行列 \mathbf{A}, \mathbf{B} が実可逆行列 \mathbf{P} を介して $\mathbf{P}^T \mathbf{A} \mathbf{P} = \mathbf{B}$ の関係にあるとき、 \mathbf{A} は \mathbf{B} に合同である congruent という。この関係は、反射性、対称性、推移性を満たすゆえ、同値関係を表す。また、 \mathbf{P} を適当に取れば、 \mathbf{B} は対角行列になることが知られている(証明略)。シルベスターの惰性法則 Sylvester's law of inertia によれば、

$$\mathbf{P}^T \mathbf{A} \mathbf{P} = \begin{bmatrix} d_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & d_n \end{bmatrix}$$

における、正の対角成分の総数 p と負の対角成分の総数 m は \mathbf{A} のみに

よって定まり、 \mathbf{P} には依存しない。これを次元等式を用いて証明せよ。

(略証 $\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$ としてよい。2つの合同対角化: $\mathbf{P}^T \mathbf{A} \mathbf{P} =$

$$\begin{bmatrix} d_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & d_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Q}^T \mathbf{A} \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \delta_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \delta_n \end{bmatrix}$$

を考え、正の対角成分の総数を p, π 、負の対角成分の総数を m, μ とする。必要があれば適当な順列行列による合同変換を行い、正の成分をすべて右上に集めることができる。そこでこの操作がすでに行われたものとし、

$$d_1, \dots, d_p > 0, \quad d_{p+1}, \dots, d_n \leq 0; \quad \delta_1, \dots, \delta_\pi > 0, \quad \delta_{\pi+1}, \dots, \delta_n \leq 0$$

とする。部分空間 $S = \text{span}\{\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_p\}$, $T = \text{span}\{\mathbf{q}_{\pi+1}, \dots, \mathbf{q}_n\}$ ($\mathbf{p}_j, \mathbf{q}_j$ は \mathbf{P}, \mathbf{Q} の第 j 列、

$j=1, \dots, n$) を定義すると、 $\mathbf{0} \neq \mathbf{x} \in S$ なら、 $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$ 、 $\mathbf{0} \neq \mathbf{x} \in T$ なら、 $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \leq 0$

ゆえに、 $S \cap T = \{\mathbf{0}\}$ が成り立つ。すると、次元等式により

$$0 = \dim(S \cap T) = \dim S + \dim T - \dim(S + T) \geq p + (n - \pi) - n = p - \pi \quad \therefore p \leq \pi$$

\mathbf{P}, \mathbf{Q} の役割を交換すると、 $\pi \leq p$ が出る。ゆえに、 $p = \pi$ 。 $p + m = \pi + \mu = \text{rank}(\mathbf{A})$ ゆえ、 $m = \mu$ も出る。■)

問題 8.4 (ゲルシュゴーリンの定理) 行列 $\mathbf{A}(t) = \begin{bmatrix} 0 & t \\ -2t & 2 \end{bmatrix}$, $0 \leq t \leq 1$ の固有値を $\lambda_1(t), \lambda_2(t)$

とする。ゲルシュゴーリン円板は、 $G_1(t) = \{z \in \mathbf{C} : |z| \leq t\}$, $G_2(t) = \{z \in \mathbf{C} : |z - 2| \leq 2t\}$ によ

って与えられる。ゲルシュゴーリンの定理によれば、固有値 $\lambda_1(t), \lambda_2(t)$ はつねに $G_1(t) \cup G_2(t)$

に含まれる。次の結果を検算せよ：

(1) $0 \leq t < 2/3$ のとき： $\lambda_1(t) = 1 - \sqrt{1 - 2t^2}$, $\lambda_2(t) = 1 + \sqrt{1 - 2t^2}$ は実数、 $G_1(t) \cap G_2(t) = \phi$ 、

$\lambda_1(t) \in G_1(t)$, $\lambda_2(t) \in G_2(t)$ である。

(2) $t = 2/3$ のとき： $\lambda_1(t) = 2/3$, $\lambda_2(t) = 4/3$ 、 $G_1(t), G_2(t)$ は一点 $z = 2/3$ において接し、 $\lambda_1(t)$ は接点上に、 $\lambda_2(t)$ は $G_2(t)$ の内部に存在する。

(3) $2/3 \leq t \leq 1/\sqrt{2}$ のとき： $\lambda_1(t) = 1 - \sqrt{1 - 2t^2}$, $\lambda_2(t) = 1 + \sqrt{1 - 2t^2}$ は実数、

$G_1(t) \cap G_2(t) \neq \phi$ ($G_1(t) \cup G_2(t)$ は連結集合)、 $G_1(t)$ は $\lambda_1(t)$ も $\lambda_2(t)$ も含まず、 $G_2(t)$ は $\lambda_1(t)$ 、 $\lambda_2(t)$ を含む。

(4) $1/\sqrt{2} < t \leq 1$ のとき： $\lambda_1(t) = 1 - i\sqrt{2t^2 - 1}$, $\lambda_2(t) = 1 + i\sqrt{2t^2 - 1}$ は複素数、

$G_1(t) \cap G_2(t) \neq \phi$ 、($G_1(t) \cup G_2(t)$ は連結集合)、 $G_1(t)$ は $\lambda_1(t)$ も $\lambda_2(t)$ も含まず、 $G_2(t)$ は $\lambda_1(t)$ 、 $\lambda_2(t)$ を含む。

ゆえに、 $2/3 < t \leq 1$ なら、2つの固有値は連結集合 $G_1(t) \cup G_2(t)$ に含まれるが、 $G_1(t)$ は固有値を全く含まず、 $G_2(t)$ が両固有値を含む。

問題 8.5 正規行列 $\mathbf{A} = [a_{ij}] \in \mathbf{C}^{n \times n}$ ($\mathbf{A}^* \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathbf{A}^*$) の各ゲルシュゴーリン円板は、連結状態

に関係なく、少なくとも 1 個の固有値を含むことを次の手順で示せ。

(1) λ を任意の複素数、 $\mathbf{v}^* \mathbf{v} = 1$ ($\mathbf{v} \in \mathbf{C}^{n \times 1}$)、 $\mathbf{r} = \mathbf{A} \mathbf{v} - \lambda \mathbf{v}$ とすると、円板

$\mathbf{D} \equiv \{z \in \mathbf{C} : |z - \lambda| \leq \sqrt{\mathbf{r}^* \mathbf{r}}\}$ は \mathbf{A} の固有値を少なくとも 1 個含む。

(2) とくに、 $\mathbf{v} = \mathbf{e}_j$ ($\mathbf{e}_1 = [10 \cdots 0]^T, \dots, \mathbf{e}_n = [0 \cdots 01]^T$)、 $\lambda = a_{jj}$ をとることにより、

$D_j \equiv \{z \in \mathbf{C} : |z - \lambda| \leq \sqrt{\mathbf{r}^* \mathbf{r}}\} = \{z \in \mathbf{C} : |z - a_{jj}| \leq \sqrt{\sum_{i,i \neq j}^n |a_{ij}|^2}\}$ は \mathbf{A} の固有値を少なくとも 1 個

含むことを示せ ($j=1, \dots, n$)。この結果を \mathbf{A}^T に適用すれば、円板

$F_i \equiv \{z \in \mathbf{C} : |z - a_{ii}| \leq \sqrt{\sum_{j \neq i}^n |a_{ij}|^2}\}$ は \mathbf{A} の固有値を少なくとも 1 個含むことがわかる。さらに、

$\sqrt{\sum_{j, j \neq i}^n |a_{ij}|^2} \leq \sum_{j, j \neq i}^n |a_{ij}|$ ゆえ、ゲルシュゴーリン円板 $G_i = \{z \in \mathbf{C} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i}^n |a_{ij}|\}$ は F_i を含む。

ゆえに、正規行列の各ゲルシュゴーリン円板は、連結状態に関係なく、少なくとも 1 個の固有値を含む。この結果は単調定理よりは弱い結果であるが、適用範囲は広がっている。

(略証 (1) λ が \mathbf{A} の固有値でないときのみを考えれば十分である。このとき $\mathbf{v}^* \mathbf{v} = 1$ に $\mathbf{v} = (\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{r}$ を代入し、これに \mathbf{A} のシュール分解 (ユニタリ相似対角化!) を代入すると、いくつかの計算後、8.7 節の不等式により、 $\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \mu| \leq \sqrt{\mathbf{r}^* \mathbf{r}}$ が出る。ここに $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ は \mathbf{A} の固有値を表す。(2) (1)の直接利用で解決する。■)

問題 8.8 3 重対角行列 $\mathbf{T} = [t_{ij}]$ が $t_{ii} = 0$ ($i=1, \dots, n$) を満たせば、 $\mathbf{D}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{D} = -\mathbf{T}$ を満たす対角行列 \mathbf{D} が存在することを示せ (ゆえに、 \mathbf{T} は $-\mathbf{T}$ に相似である)。

(略解 \mathbf{D} として、 $\mathbf{D} = \text{diag}\{-1, 1, -1, \dots\}$ 、すなわち、 $-1, 1, -1, \dots$ を対角成分とする対角行列、をとればよい。■)

問題 8.9 直交多項式の零点 (実対称 3 重対角行列の固有値問題として) 次の 3 項漸化式 three-term recurrence relation によって定義される多項式をルジャンドル多項式 Legendre polynomial という :

$$(1) P_0(x) = 1, P_1(x) = x, (k-1)P_{k-2}(x) - (2k-1)xP_{k-1}(x) + kP_k(x) = 0, k = 2, 3, \dots$$

最初のいくつかを計算すると、

$$P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x, P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8}$$

次の諸性質が知られている (証明略) :

$$\text{直交性} : \int_{-1}^1 P_i(x)P_j(x)dx = 0 \quad (i \neq j), \quad \int_{-1}^1 P_i^2(x)dx = \frac{2}{2i+1}$$

任意の n 次多項式 $p(x)$ は $P_0(x), \dots, P_n(x)$ の一次結合として一意的に表される :

$$p(x) = c_0 P_0(x) + c_1 P_1(x) + \dots + c_n P_n(x)$$

ここに係数 c_0, c_1, \dots は直交性(4)を利用すれば次式より直ちに定まる :

$$\int_{-1}^1 P_k(x)p(x)dx = 0 + \dots + 0 + c_k \frac{2}{2k+1} + 0 + \dots + 0 \quad (\text{左辺は既知量})$$

さて、応用上は各 $P_n(x)$ の零点の値を必要とすることが多い。本問ではこれを実対称 3 重対角行列固有値問題の応用として $P_n(x)$ の零点は原点に対称に分布する異なる実数であることを以下の手順で示せ。

(I) まず、(1)より

$$\frac{k-1}{2k-1}P_{k-2} + \frac{k}{2k-1}P_k = xP_{k-1}, \quad k = 2, 3, \dots \quad (P_k \equiv P_k(x), \dots)$$

$$P_1 = xP_0, \quad \frac{1}{3}P_0 + \frac{2}{3}P_2 = xP_1, \quad \frac{2}{5}P_1 + \frac{3}{5}P_3 = xP_2, \quad \frac{3}{7}P_2 + \frac{4}{7}P_4 = xP_3, \dots$$

が成り立つことを示せ。次に、これらは次の行列形に書けることを示せ：

$$(2) \quad \mathbf{T}\mathbf{p} \equiv \begin{bmatrix} 0 & e_2 & 0 & \dots & \mathbf{0} \\ f_2 & 0 & e_3 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & e_n \\ \mathbf{0} & \dots & f_n & 0 & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_0 \\ P_1 \\ \vdots \\ P_{n-1} \end{bmatrix} = x \begin{bmatrix} P_0 \\ P_1 \\ \vdots \\ P_{n-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ P_n \end{bmatrix} = x\mathbf{p} + \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ P_n \end{bmatrix} \quad (n = 2, 3, \dots)$$

ここに $e_k = \frac{k-1}{2k-3}, f_k = \frac{k-1}{2k-1} \quad (k = 2, 3, \dots)$ 。

(II) $P_n(x) = 0$ であるための必要十分条件は x が行列 \mathbf{T} の固有値を表すことであることを示せ。

(III) 問題 8.2 の結果を利用し、 \mathbf{T} は実対称 3 重対角行列に相似であることを示し、これに分離定類 (8.3 節) を適用し、 $P_n(x)$ の零点はすべて相異なる実数であることを示せ。

(IV) 前問の結果により、 \mathbf{T} は $-\mathbf{T}$ に相似であるから、 $P_n(x)$ の零点は必ず正負の対 $\pm\lambda$ の形で現れることを示せ (これは $P_n(x)$ の形からも明らか)。

(略証 (II) $P_0 = 1$ に注意すれば、必要性は(9)から読み取れる。十分性の証明： \mathbf{T} の任意の固有値 μ に対応する固有ベクトルを $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ と書けば $x_1 \neq 0$ でなければならないことを示し、漸化式より $\mathbf{x} = c [P_0, \dots, P_{n-1}]^T \quad (c \neq 0)$ を示し、これから結局 $P_n(\mu) = 0$ を導け。■)

(参考) 偶数次 $P_n(x)$ は x^2 の多項式であり、奇数次 $P_n(x)$ は $x \cdot (x^2 \text{ の多項式})$ の形をしている。この事実を考慮すると、上の方法で零点計算を行う場合は、 P_{i-2}, P_i, P_{i+2} を結ぶ漸化式 (一つ飛びの漸化式) を導き、 x^2 に相当する固有値が求め、その平方根をとればよい (詳細略)。また、3 項漸化式に基礎を置く同様の方法は、特殊関数 special function である、第一種ベッセル関数および導関数の零点計算、逆に、零点を与えて階数を計算する逆問題、マシュー関数 Mathieu functions の固有値計算と逆問題、正則クーロン波動関数および導関数の零点計算、ス

フェロイド関数の固有値計算にも応用できるが、これらは無限行列の固有値問題となる。詳しくは下記論文参照：

- (a) Y. Ikebe et. al., The eigenvalue problem for infinite compact complex symmetric matrices with application to the numerical computation of complex zeros of $J_0(z) - iJ_1(z)$ and of Bessel function of any real order m , *Linear Algebra and Its Applications* 194, 35-70 (1993).
- (b) Y. Ikebe et. al., The eigenvalue problem for infinite complex symmetric tridiagonal matrices with application, *Linear Algebra and Its Applications* 241-243, 599-618 (1996).
- (c) 浅井信吉ほか 行列算法による $zJ_\nu'(z) + HJ_\nu(z) = 0$ の数値解法、電子情報通信学会誌 A, Vol. J79-A, 1256 - 1265 (1996).
- (d) Y. Miyazaki et. al., Numerical computation of the eigenvalues for the spheroidal wave equation with accurate error estimation by matrix method, *Electronic Transactions on Numerical Analysis* 23, 329-338, 2006.

問題 8.10

$$(1) \quad \mathbf{L} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & -2 & -2 \\ -2 & 1 & -2 \\ -2 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

とする。これは第 3 列の符号を除いて 3.10 節例 1 の直交行列と同じ行列である。実際

$$(2) \quad \mathbf{L} = \mathbf{I} - 2\mathbf{nn}^T \quad (\mathbf{n} = (1/\sqrt{3})[1 \ 1 \ 1]^T) \text{ および } \det \mathbf{L} = -1$$

であることを確かめよ。次に 3.10 節の公式を使って(1)より(2)を導いてみよ。

問題 8.11 $\mathbf{n} = [n_1 \ n_2 \ n_3]^T$, $\mathbf{n}^T \mathbf{n} = 1$, $\mathbf{N} = \begin{bmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{bmatrix}$ とすれば

$e^{\theta \mathbf{N}} = \mathbf{nn}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{nn}^T) \cos \theta + \mathbf{N} \sin \theta$ であることを示せ。ここに

$$(*) \quad e^{\theta \mathbf{N}} = \mathbf{I} + \theta \mathbf{N} + (\theta \mathbf{N})^2 / 2! + (\theta \mathbf{N})^3 / 3! + \dots$$

(略証：直接計算により、 $\mathbf{N}^2 = \mathbf{nn}^T - \mathbf{I}$, $\mathbf{N}^3 = -\mathbf{N}$, $\mathbf{N}^4 = \mathbf{I} - \mathbf{nn}^T = -\mathbf{N}^2$, $\mathbf{N}^5 = \mathbf{N}$, ... を示し、よく知られた公式 $\cos \theta = 1 - \theta^2 / 2! + \theta^4 / 4! - \dots$, $\sin \theta = \theta - \theta^3 / 3! + \theta^5 / 5! - \dots$ を使う。

(*)式右辺の収束は成分ごとの収束と考えると、特定のノルムに関する収束と考えると同じである

(レッスン 14)。8.10 節(I)で学んだように、 $e^{\theta \mathbf{N}}$ は \mathbf{n} のまわりの、角 θ だけの回転を表す。)

問題 8.12 本問題は第 8.10 節「3 次直交行列」に関連し、テンソル tensor 入門である。出典：Ben Noble, *Applied Linear Algebra*, Prentice-Hall, 1969, First Edition (Ex. 12.55-56,

pp.422-424) 復習： $\mathbf{a} = [a_1 \ a_2 \ a_3]^T$, $\mathbf{b} = [b_1 \ b_2 \ b_3]^T \in \mathbf{R}^{3 \times 1}$ のベクトル積とは

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} \equiv \det \begin{bmatrix} \mathbf{i} & a_1 & b_1 \\ \mathbf{j} & a_2 & b_2 \\ \mathbf{k} & a_3 & b_3 \end{bmatrix} = (a_2 b_3 - a_3 b_2) \mathbf{i} + (a_3 b_1 - a_1 b_3) \mathbf{j} + (a_1 b_2 - a_2 b_1) \mathbf{k}$$

をいう。ここに、 $\mathbf{i} = [1 \ 0 \ 0]^T$, $\mathbf{j} = [0 \ 1 \ 0]^T$, $\mathbf{k} = [0 \ 0 \ 1]^T$ であり、 $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ は、大きさが \mathbf{a}, \mathbf{b} によって決定される平行四辺形の面積に等しく、方向が \mathbf{a}, \mathbf{b} によって決定される平面に垂直、向きが \mathbf{a} を \mathbf{b} に向かって回転するとき右ネジの進む向きであるようなベクトルを表す (レッスン 7)。次の問(I)(II)(III)を示せ：

(I) $\mathbf{L} = [\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c}]$ ($\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \in \mathbf{R}^{3 \times 1}$) を $\det \mathbf{L} = 1$ を満たす任意の直交行列とすれば、

$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \mathbf{c}$, $\mathbf{b} \times \mathbf{c} = \mathbf{a}$, $\mathbf{c} \times \mathbf{a} = \mathbf{b}$ が成り立つことを示せ。

(II) 任意の $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ x_3]^T, \mathbf{y} = [y_1 \ y_2 \ y_3]^T \in \mathbf{R}^{3 \times 1}$ に対して

$\mathbf{L}(\mathbf{x} \times \mathbf{y}) = \mathbf{Lx} \times \mathbf{Ly}$ が成立することを示せ。

(III) 任意の $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ x_3]^T \in \mathbf{R}^{3 \times 1}$ に対して

$$f(\mathbf{x}) = f\left(\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}\right) \equiv \begin{bmatrix} 0 & -x_3 & x_2 \\ x_3 & 0 & -x_1 \\ -x_2 & x_1 & 0 \end{bmatrix} = -(f(\mathbf{x}))^T$$

とすれば、 $f(\mathbf{x})\mathbf{y} = \mathbf{x} \times \mathbf{y}$ ($\mathbf{y} \in \mathbf{R}^{3 \times 1}$) および $f(\mathbf{Lx}) = \mathbf{L}f(\mathbf{x})\mathbf{L}^T$ が成立することを示せ。逆に、 $f(\mathbf{y}) = \mathbf{L}f(\mathbf{x})\mathbf{L}^T$ なら、 $\mathbf{y} = \mathbf{Lx}$ であることを示せ。

(略証：この式が成立するための必要十分条件はすべての $\mathbf{z} \in \mathbf{R}^{3 \times 1}$ に対して $f(\mathbf{Lx})\mathbf{z} = \mathbf{L}f(\mathbf{x})\mathbf{L}^T\mathbf{z}$ 、すなわち $\mathbf{Lx} \times \mathbf{z} = \mathbf{L}(\mathbf{x} \times \mathbf{L}^T\mathbf{z})$ が成立することである。この右辺は (3)により $\mathbf{Lx} \times \mathbf{LL}^T\mathbf{z}$ に等しい。)

(略証 (I) $\det \mathbf{L} = 1$ ゆえ、 $\mathbf{L}^T = \mathbf{L}^{-1} = (1/\det \mathbf{L}) \text{Adj} \mathbf{L} = \text{Adj} \mathbf{L}$ が成り立つ。左辺と最終辺の対応する成分を等置し、定義(1)を参照すれば(2)が出る。ここに、 $\text{Adj} \mathbf{L}$ は \mathbf{L} の余因子行列を表す。

(II) (I)の結果と $\mathbf{a} \times \mathbf{a} = \mathbf{b} \times \mathbf{b} = \mathbf{c} \times \mathbf{c} = \mathbf{0}$ および行列式の多重線形性を用いると

$$\mathbf{Lx} \times \mathbf{Ly} = (\mathbf{ax}_1 + \mathbf{bx}_2 + \mathbf{cx}_3) \times (\mathbf{ay}_1 + \mathbf{by}_2 + \mathbf{cy}_3) = \mathbf{ax}_1 \times \mathbf{ay}_1 + \mathbf{ax}_1 \times \mathbf{by}_2 + \cdots = \mathbf{0} + \mathbf{cx}_1 y_2 + \cdots = \mathbf{L}(\mathbf{x} \times \mathbf{y})$$

(III) 前半はこれまでの結果から出る。逆に、 $f(\mathbf{y}) = \mathbf{L}f(\mathbf{x})\mathbf{L}^T$ が真なら、直前の計算により、すべての $\mathbf{z} \in \mathbf{R}^{3 \times 1}$ に対して $\mathbf{y} \times \mathbf{z} = \mathbf{Lx} \times \mathbf{z}$ が成り立つ。 $\mathbf{z} = \mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ とすれば $\mathbf{y} = \mathbf{Lx}$ が従う。■)

(参考) テンソルとは同じ物理量の異なる座標系から観測した表現間に存在する変換法則をいう。実際には、特定の型の変換法則に従う物理量をテンソルといういい方をする。点、速度、加速度は 1階デカルトテンソル Cartesian tensor of order 1 または 物理ベクトル physical vector

の例であり、上で定義した $f(\mathbf{x})$ は 2 階デカルトテンソル Cartesian tensor of order 2 の例である。

問題 8.13 n 次 (実) 直交行列 \mathbf{L} のシュール分解は次形で与えられることを示せ :

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{L} \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \mathbf{D}_k \end{bmatrix} \equiv \mathbf{D}, \text{ここに、} \mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}, \mathbf{Q} \in \mathbf{R}^{n \times n}, \mathbf{D}_i = [1], [-1] \text{ または}$$

$$\begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \text{である。}$$

(略証 実行列のシュール分解 (7.5 節) により、適当な実直交行列 \mathbf{Q} をとれば

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{L} \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{T}_{11} & \mathbf{T}_{12} & \cdots & \mathbf{T}_{1k} \\ & \mathbf{T}_{22} & \cdots & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & \mathbf{T}_{kk} \end{bmatrix} \equiv \mathbf{T} \text{ となる。ここに、対角ブロック } \mathbf{T}_{11}, \dots, \mathbf{T}_{kk} \text{ は } 1 \times 1 \text{ または } 2 \times 2$$

実行列であり、後者の場合、その固有値は一对の共役複素数 $\alpha \pm i\beta$ (α, β は実数、 $\beta \neq 0$) である。 \mathbf{L} は直交行列だから、 \mathbf{T} も同じく直交行列である。 $\mathbf{T}^T \mathbf{T} = \mathbf{I}$ を書き下すと、

$\mathbf{T}_{ij} = \mathbf{0}$ ($i \neq j$), $\mathbf{T}_{ii}^T \mathbf{T}_{ii} = \mathbf{I}$ ($i = 1, \dots, k$) が得られる。 \mathbf{T}_{ii} が 1 次の場合は明らかに $[\pm 1]$ 、2 次の場合はその固有値は実数でないから、8.9 節の結果により

$$\begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \text{ (} \sin \theta \neq 0 \text{) の形でなければならない。■)$$

問題 8.14 3 次直交行列 \mathbf{L} の標準形 Part(II) : $\det \mathbf{L} = -1$ の場合。以下を示せ :

(A) \mathbf{L} の固有値は $-1, \cos \theta \pm i \sin \theta$ の形に表現できる。

(B) $\mathbf{L} \mathbf{n} = -\mathbf{n} \equiv -[n_1 \ n_2 \ n_3]^T$ ($\mathbf{n}^T \mathbf{n} = 1$) とすれば、 \mathbf{L} は次の形に表現できる :

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= (\mathbf{I} - 2\mathbf{nn}^T) \{ \mathbf{nn}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{nn}^T) \cos \theta + \mathbf{N} \sin \theta \} = -\mathbf{nn}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{nn}^T) \cos \theta + \mathbf{N} \sin \theta \\ &= \begin{bmatrix} -n_1^2 + (1 - n_1^2) \cos \theta & -n_1 n_2 (1 + \cos \theta) - n_3 \sin \theta & -n_1 n_3 (1 + \cos \theta) + n_2 \sin \theta \\ -n_1 n_2 (1 + \cos \theta) + n_3 \sin \theta & -n_2^2 + (1 - n_2^2) \cos \theta & -n_2 n_3 (1 + \cos \theta) - n_1 \sin \theta \\ -n_3 n_1 (1 + \cos \theta) - n_2 \sin \theta & -n_3 n_2 (1 + \cos \theta) + n_1 \sin \theta & -n_3^2 + (1 - n_3^2) \cos \theta \end{bmatrix} \end{aligned}$$

ここに、 $\mathbf{N} = \begin{bmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{bmatrix}$ であり、任意の $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ x_3]^T$ に対して、 $\mathbf{N} \mathbf{x}$ はベクトル積 $\mathbf{n} \times \mathbf{x}$

を表し、 $\mathbf{x}^T \mathbf{N} \mathbf{x} = 0$ 、 $\mathbf{N} \mathbf{n} = \mathbf{0}$ 、 $\mathbf{N}^T = -\mathbf{N}$ 、 $\mathbf{N}^T \mathbf{N} = -\mathbf{N}^2 = \mathbf{I} - \mathbf{nn}^T$ が成り立つ。

(C) \mathbf{n} , $\cos \theta$, $\sin \theta$ の計算 まず、

$$\mathbf{d}_1 \equiv \begin{bmatrix} 1-l_{11}+l_{22}+l_{33} \\ -l_{12}-l_{21} \\ -l_{13}-l_{31} \end{bmatrix} = 2(1+\cos \theta)n_1\mathbf{n}, \quad \mathbf{d}_2 \equiv \begin{bmatrix} -l_{12}-l_{21} \\ 1+l_{11}-l_{22}+l_{33} \\ -l_{23}-l_{32} \end{bmatrix} = 2(1+\cos \theta)n_2\mathbf{n}$$

$$\mathbf{d}_3 \equiv \begin{bmatrix} -l_{13}-l_{31} \\ -l_{23}-l_{32} \\ 1+l_{11}+l_{22}-l_{33} \end{bmatrix} = 2(1+\cos \theta)n_3\mathbf{n}$$

ゆえに、 \mathbf{n} は任意の $\mathbf{d}_i \neq \mathbf{0}$ を一つとり、 $\mathbf{n} = \pm \mathbf{d}_i / \sqrt{\mathbf{d}_i^T \mathbf{d}_i}$ によって定める。ここに、 $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}_3$

は同時には $\mathbf{0}$ とならない ($\because \mathbf{n} \neq \mathbf{0}, \mathbf{L} \neq \mathbf{I}$)。 $\cos \theta, \sin \theta$ は次式から定まる：

$$2 \cos \theta = l_{11} + l_{22} + l_{33} - 1$$

$$2n_1 \sin \theta = l_{32} - l_{23}, \quad 2n_2 \sin \theta = l_{13} - l_{31}, \quad 2n_3 \sin \theta = l_{21} - l_{12}$$

(D) 幾何学的解釈 任意の $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{3 \times 1}$ に対して

$$\mathbf{Lx} = (\mathbf{I} - 2\mathbf{nn}^T) \cdot \{\mathbf{n}(\mathbf{n}^T \mathbf{x}) + (\mathbf{I} - \mathbf{nn}^T)\mathbf{x} \cos \theta + \mathbf{Nx} \sin \theta\}$$

ここに、右辺の積の第 2 因子は $\det \mathbf{L} = 1$ の場合の \mathbf{Lx} と全く同一の形をもち、 \mathbf{x} を \mathbf{n} のまわりに角 θ だけ回転して得られるベクトルを表し、第 1 因子はこの回転結果を、原点を通り \mathbf{n} に垂直な平面に関して反射して得られるベクトルを表す。

(E) 逆 任意の $\mathbf{n} = [n_1 \ n_2 \ n_3]^T$ ($\mathbf{n}^T \mathbf{n} = 1$)、任意の θ に対して

$$\mathbf{L} = -\mathbf{nn}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{nn}^T) \cos \theta + \mathbf{N} \sin \theta = (\mathbf{I} - 2\mathbf{nn}^T) \{\mathbf{nn}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{nn}^T) \cos \theta + \mathbf{N} \sin \theta\}$$

は $\det \mathbf{L} = -1$ を満たす直交行列を表す。ここに \mathbf{N} は以前と同じ意味をもつ。

(略証 $\det \mathbf{L} = 1$ の場合と同様の論法を使う。)

(A) $\det(\mathbf{L} + \mathbf{I}) = \det(\mathbf{L} + \mathbf{LL}^T) = \det \mathbf{L} \det(\mathbf{I} + \mathbf{L}^T) = (-1) \det(\mathbf{I} + \mathbf{L})$ 。ゆえに、 $\det(\mathbf{L} + \mathbf{I}) = 0$ 。これは -1 が \mathbf{L} の固有値であることを示す。他固有値は 3.10 と同様に手続きをとれば、 $\cos \theta \pm i \sin \theta$ の形に表現できることがわかる。

(B) 3.10 節と同じ手続きを繰り返してもよいが、ここでは別法を示す。 $(\mathbf{I} - 2\mathbf{nn}^T)\mathbf{L} \equiv \mathbf{M}$ とおけば、 \mathbf{M} も直交行列を表し、しかも、 $\mathbf{Mn} = (\mathbf{I} - 2\mathbf{nn}^T)\mathbf{Ln} = (\mathbf{I} - 2\mathbf{nn}^T)(-\mathbf{n}) = \mathbf{n}$ 、そして $\det \mathbf{M} = \det(\mathbf{I} - 2\mathbf{nn}^T) \det \mathbf{L} = (-1)(-1) = 1$ であるから、3.10 の結果により、 \mathbf{M} は \mathbf{n} を軸とする回転を表し、 $\mathbf{M} = \mathbf{nn}^T + (\mathbf{I} - \mathbf{nn}^T) \cos \theta + \mathbf{N} \sin \theta$ と書ける。 \mathbf{M} の左から $\mathbf{I} - 2\mathbf{nn}^T$ を乗じれば、証明すべき \mathbf{L} の表現が得られる。(C)以下省略。■