第 5 章　行列のノルム

5.1　実 2 次形式と正定値行列

【**定義 5.1** 】実数係数 $\{a_{i,j} \in R^1\}_{i,j=1}^n$ を持つ，n 個の変数 $\{x_i\}_{i=1}^n$ に関する 2 次多項式

$$f(x_1, x_2, \ldots, x_n) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{i,j} x_i x_j$$

を**実 2 次形式**という．また，n 次元列ベクトル $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$ および実対称行列 B によって，与えられる実 2 次形式 $f(x) = x^T Bx$ を行列表現という．

【**定義 5.2** 】実 2 次形式 $f(x)$ は，全ての $x \neq 0$ で，

- $f(x) > 0$ ならば，**正定値 (positive definite)**，
- $f(x) \geq 0$ ならば，**半正定値 (positive semidefinite)**，
- $f(x) < 0$ ならば，**負定値 (negative definite)**，
- $f(x) \leq 0$ ならば，**半負定値 (negative semidefinite)**，

で類別される．

【**命題 5.1** 実 2 次形式の標準形 】実 2 次形式 $f(x) = x^T Ax$ は，A の固有ベクトルによる直交行列 $Q = [q_1|q_2|\ldots|q_n]$ による変数変換 $y = Q^T x$ によって，

$$f(y) = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i y_i^2, \quad (r = \mathrm{rank} A \leq n)$$

に変形される．これを**実 2 次形式の標準形 (real quadratic normal form)** という．

【証明】実対称行列 A のスペクトル分解より，

$$A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i q_i q_i^T.$$

したがって，

$$x^T Ax = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i x^T q_i q_i^T x = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i (q_i^T x)^T q_i^T x = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i^2. \quad \blacksquare$$

【命題 5.2 実 2 次形式の正定値条件 **】**実 2 次形式 $f(x) = x^T Ax$ が，正定値であるための必要十分条件は，A の固有値が全て正になることである．

【証明】正値であるためには，少なくとも全ての $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$ に対して，

$$f(y) = \lambda_i y_i^2 > 0.$$

したがって，固有値が全て正になることが必要である．他方，全ての固有値が正であれば，$y \neq 0$ 以外で

$$f(y) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i^2 > 0. \quad \blacksquare$$

【命題 5.3 半正定値対称行列 **】**任意の実正方行列 A によってつくられる対称行列 $A^T A$ の実固有値は非負である．また，任意のベクトル集合 $\{x_i\}_{i=1}^{D}$ によってつくられる対称行列 $\sum_{i=1}^{D} x_i x_i^T$ の実固有値は非負である．

【証明】任意の x に対して，

$$f(x) = x^T A^T Ax = (Ax)^T (Ax) \geq 0$$

より，2 次形式 $f(x)$ は半正定値である．命題 5.2 から，$A^T A$ の実固有値は非負となる．同様に，

$$g(x) = \sum_{i=1}^{D} x^T x_i x_i^T x = \sum_{i=1}^{D} (x^T x_i)(x_i^T x) \geq 0$$

より，2 次形式 $g(x)$ は半正定値より，実固有値は非負となる．$\blacksquare$

5.2　スペクトルノルム

【定義 5.3 】行列 A に関する正値

$$\| A \| = \sup_{x \neq 0} \frac{\| Ax \|}{\| x \|}$$

を行列 A の**スペクトルノルム (spectral norm)** という．

【定理 5.1 スペクトルノルム**】**スペクトルノルム $\| A \|$ は，

(1) 行列 $A^T A$ の最大固有値 λ_{max} の平方根に等しい．

(2) 行列 A のすべての固有値 $\sigma \pm i\omega \in C$ の大きさ $\sqrt{\sigma^2 + \omega^2}$ 以上である．

を満足する．

【証明】(1) スペクトルノルムの 2 乗 $\| A \|^2 = \sup_{\|e\|=1} e^T A^T A e$ に行列 $A^T A$ にスペクトル分解

$$A^T A = \lambda_1 q_1 q_1^T + \lambda_2 q_2 q_2^T + \ldots + \lambda_n q_n q_n^T$$

を代入すると

$$\| A \|^2 = \sup_{\|e\|=1} (\lambda_1 |q_1^T e|^2 + \lambda_2 |q_2^T e|^2 + \ldots + \lambda_n |q_n^T e|^2).$$

正規性 $\sum_{i=1}^{D} |q_i^T e|^2 = 1$ に注意して整理すると,

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i |q_i^T e|^2 = \lambda_1 |q_1^T e|^2 + \sum_{i=2}^{n} \lambda_i |q_i^T e|^2 = (1 - \sum_{i=2}^{n} |q_i^T e|^2)\lambda_1 + \sum_{i=2}^{n} \lambda_i |q_i^T e|^2 = \lambda_1 - \sum_{i=2}^{n} (\lambda_1 - \lambda_i)|q_i^T e|^2$$

となる．特に，命題 5.3 から，$A^T A$ の実固有値は非負であるため，対角行列 J の対角成分が大なる順

$$\lambda_{max} = \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n \geq 0$$

に整列しているとすると，その最大値は，$|q_1^T e| = 1$ かつ $|q_2^T e| = |q_3^T e| = \ldots = |q_n^T e| = 0$ のとき，最大固有値 λ_{max} となる．よって，$\| A \| = \sqrt{\lambda_{max}}$.

(2) A の実固有値 $\lambda \in R^1$ と固有ベクトル $u \in R^n$ は，定義から $Au = \lambda u$ を満足する．よって，

$$\lambda^2 = \frac{u^T A^T A u}{u^T u} \leq \sup_{x \neq 0} \frac{x^T A^T A x}{x^T x} = \| A \|^2 . \tag{5.1}$$

また，共役複素固有値 $\sigma \pm i\omega$ と複素固有ベクトル $u \pm iv$ は，定義から

$$A(u \pm iv) = (\sigma \pm i\omega)(u \pm iv)$$

を満足する．一方の転置を他方にかけることで,

$$(u^T - iv^T) A^T A (u + iv) = (\sigma^2 + \omega^2)(u^T - iv^T)(u + iv).$$

その実部は

$$u^T A^T A u + v^T A^T A v = (\sigma^2 + \omega^2)(u^T u + v^T v)$$

となり，(5.1) から，

$$\sigma^2 + \omega^2 = \frac{u^T A^T A u + v^T A^T A v}{u^T u + v^T v} = \frac{u^T u \frac{u^T A^T A u}{u^T u} + v^T v \frac{v^T A^T A v}{v^T v}}{u^T u + v^T v} \leq \frac{(u^T u + v^T v) \| A \|^2}{u^T u + v^T v} = \| A \|^2 . \quad \blacksquare$$

【命題 5.4 実対称行列のスペクトルノルム **】** 実対称行列のスペクトルノルムはその大きさが最大である固有値の絶対値に等しい.

【命題 5.5 直交行列のスペクトルノルム **】** 直交行列のスペクトルノルムは常に 1 である.

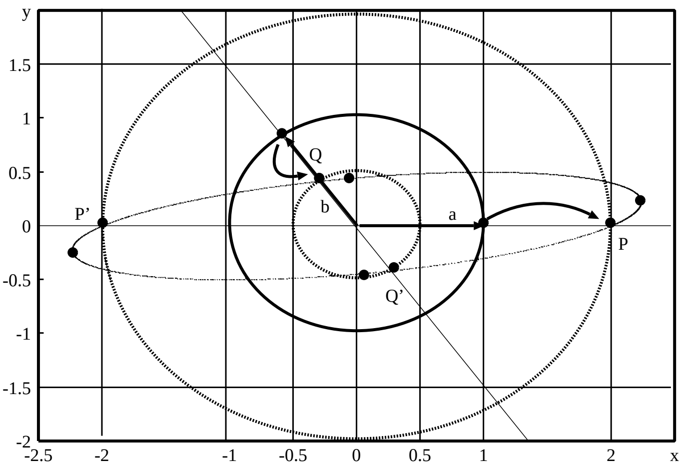

図 5.1: 線形写像による単位円周の像

5.3　線形写像とスペクトルノルム

固有値およびスペクトルノルムの知識を用いて，正則行列 A による 2 次元実平面上の線形写像 $F\ :\ x \in R^2 \mapsto Ax \in R^2$ の振舞を考えてみる．
まず，固有値 α と固有ベクトル a に関して，その定義 $Aa = \alpha a$ から，a によって張られる固有空間上の任意の点 $x = ta$ $(t \in R^1)$ は F で写像すると，$Ax = tAa = t\alpha a$ となり，$\parallel Aa \parallel = |\alpha| \parallel a \parallel$ となる．このため，像のノルムは $|\alpha|$ 倍に拡大されることに注意する．すなわち，固有値とは固有空間上における線形写像の**拡大係数**（**expanding coefficient**）を意味する．
一方，スペクトルノルム $\parallel A \parallel$ は，全ての方向で定められる拡大係数の中で最も大きなもの（**最大拡大係数**）を意味する．スペクトルノルムを与える単位方向ベクトル[1] を u とするとき，$u' = Au$ から，$\parallel u' \parallel = \parallel A \parallel$ が単位円周の像の最も原点から遠い距離を与える．他方，A^TA の最小固有値の平方根は，A の最小の拡大係数を与えることになる．

【命題 5.6 正則な線形写像による単位球面の像 **】** 線形写像 $F\ :\ x \in R^n \mapsto Ax \in R^n$ が正則であるとき，n 次元空間における単位球面

$$x^Tx = x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2 = 1$$

の像は，n 個の軸の長さが

$$2\sqrt{\lambda_1} \geq 2\sqrt{\lambda_2} \geq \ldots \geq 2\sqrt{\lambda_n}$$

である楕円面となる．ただし，$\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}$ は，実対称行列 AA^T の固有値を表す.

【例示 5.1 線形写像による単位円周の像 **】** 正則行列 $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ により，2 次元実平面上の単位円周 $S = \{(x, y)\ :\ x^2 + y^2 = 1\}$ がいかなる像に写るか調べてみる．（図 5.1 参照）まず，A は上三角行列であるため，

$$\text{固有値 } 2,\ \text{固有ベクトル } a = (1, 0)^T,\ \text{固有値 } \tfrac{1}{2},\ \text{固有ベクトル } b = (1, -\tfrac{3}{2})^T$$

[1] 定理 5.1 から，A^TA の最大固有値に対応する固有ベクトルに他ならない．

は容易に計算でき，2 つの固有ベクトルで張られる直線と像の交点 $P(P')$ および $Q(Q')$ の原点からの距離は，各固有値に一致することが分る．ここで，像は楕円となり原点から最も遠い点の距離（長径）は最大拡大係数，最も近い点の距離（短径）は最小拡大係数に等しくなる

5.4 情報処理への展開

5.4.1 スペクトルノルムと反復計算の収束性

$x \in R^n$ を未知数とする線形連立方程式 $Ax = b$ の解は，$x^* = A^{-1}b$ である．一見すると，x^* の計算には逆行列の計算が不可欠に思われるが，漸化式

$$x_{n+1} = (I - A)x_n + b$$

を反復することで解 x^* が計算できる場合がある．もし，適当な初期値 x_0 から開始される点列 $\{x_0, x_1, \ldots\}$ が極限値 x^* に収束するならば，

$$\lim_{n\to\infty}(I - A)x_n + b = \lim_{n\to\infty} x_n$$

から，x^* は，$0 = Ax^* - b$ を満足する．ここで，

$$\| x_{n+1} - x_n \| = \| (I - A)(x_n - x_{n-1}) \| \leq \| I - A \| \| x_n - x_{n-1} \| \leq \ldots \leq \| I - A \|^n \| x_1 - x_0 \|$$

から，スペクトルノルム $\| I - A \|$ が 1 よりも小さいならば，

$$\lim_{n\to\infty} \| x_{n+1} - x_n \| \leq \lim_{n\to\infty} \| I - A \|^n \| x_1 - x_0 \| \to 0$$

から，

$$\lim_{n\to\infty} x_n \to x^*$$

となる．つまり，行列をあるベクトルに繰り返し作用させる場合，極限値への収束のための十分条件は，最大拡大係数によって議論することができる．

章末問題５

【問題 5.1 実 2 次形式**】**次の 2 次多項式を標準形に変形し，正定値であるか判別せよ．

(1) $x^2 - xy + y^2$

(2) xy

(3) $x^2 - 4xy + y^2$

【問題 5.2 】2 次多項式

$$x^2 + y^2 + z^2 - xy - yz$$

は，正（負）定値か，半正（負）定値か，あるいはそのいずれでもないか判別せよ．

【問題 5.3 】実対称行列 A が，正定値であるならば，

$$A = B^T B$$

を満足する正則な（実）正方行列 B が存在することを示せ．

【問題 5.4 】 $n \times n$ 実行列 A による対称行列 $A + A^T$ が正定値となるとき，A の固有値の実部は全て正となることを証明せよ．

【問題 5.5 ヘッセ行列式との関係**】** 解析学において，２次多項式 $z = f(x, y)$ の極値はヘッセ行列式（第 9 章参照）

$$\det Hf(x, y) = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{pmatrix}$$

を用いて，

(a) $\det Hf(x, y) > 0$：極大もしくは極小である

(b) $\det Hf(x, y) < 0$：極値ではない

(c) $\det Hf(x, y) = 0$：判別不能

と判別された．２次多項式が $f(x, y) = x^T Ax$ で記述されるとき，A の固有値 $\{\lambda_1, \lambda_2\}$ とヘッセ行列式の関係式を導き，極値判別と正負定値判別との関連について考察せよ．また，問題 5.1 の (1) – (3) の２次多項式のヘッセ行列式を求め，上記の考察が正しい事を示せ．

【問題 5.6 実対称行列のスペクトルノルム**】** 命題 5.4 を証明せよ．

【問題 5.7 直交行列のスペクトルノルム**】** 命題 5.5 を証明せよ．

【問題 5.8 正則写像による単位球面の像**】** 命題 5.6 を証明せよ．（ヒント：$y = Ax$ とし，y で単位球面を表して，スペクトル分解を用いよ.）

【問題 5.9 拘束条件つき最大値問題**】** 本章の知識を用いて，拘束条件

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + \ldots x_n^2 = 1$$

の下での $|a_1 x_1 + a_2 x_2 + \ldots + a_n x_n|$ の最大値に関して議論せよ．

【問題 5.10 対称行列の数値計算上の特性**】** $n \times n$ 実正方行列 A が実固有値

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \ldots \geq |\lambda_n| \geq 0$$

とそれぞれに対応する固有ベクトル $\{v_i\}_{i=1}^n$ を持つとき，以下の設問に答えよ．

(1) ほとんど全ての *(*無作為に選択した*)* 単位ベクトル $e \in R^n$ に関して，

$$\lim_{j \to \infty} \frac{A^j e}{||A^j e||}$$

を求めよ.（ヒント：問題 4.6 (2) の結果を用いよ.）

(2) (1) から，数値計算上で利用できる有益な特性について議論せよ．