二次形式と正定値行列

quadratic form　positive definite matrix

1　導入

この講義で重要なのは、二次形式は行列によって定まる二次式であり、対称行列の固有値を通じて符号を判定できるということである。

固有値は、対角化の計算だけのために存在する概念ではない。二次形式を観察すると、固有値は曲面の伸びや凸性を支配する量として確認できる。

2　用語と定義

二次形式とは、実正方行列 A によって

$$q(x) = x^T Ax$$

と定義される関数である。ここで $x \in \mathbb{R}^n$ である。

エルミート形式とは、複素の場合に

$$q(x) = x^* Ax$$

と書く量である。ここでは A をエルミート行列とする。この条件により、$x^* Ax$ は実数として符号を判定できる。

正定値行列とは、実対称行列 A が任意の $x \neq 0$ について

$$x^T Ax > 0$$

を満たすことである。非負定値は $x^T Ax \geq 0$、負定値は $x^T Ax < 0$、不定は正にも負にもなる場合である。

3　方針

方針は、二次形式を直交対角化で標準形に変換することである。対称行列 A について

$$A = QDQ^T$$

と直交対角化し、$y = Q^T x$ と置換すると

$$x^T Ax = y^T Dy = \lambda_1 y_1^2 + \cdots + \lambda_n y_n^2$$

となる。したがって符号は固有値の符号に還元される。

→ 講義 対称行列と直交対角化 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/対称行列と直交対角化-講義/

→ 講義 複素内積とユニタリ行列 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/複素内積とユニタリ行列-講義/

4 直感的な説明

二次形式は、方向ごとに値の増加の仕方を測定する装置である。正定値であれば、原点からどの方向へ移動しても値が正になる。これは原点が谷の底のように振舞うことに対応する。

不定であれば、方向によって値が正にも負にもなる。鞍点のような形状が発生する。

5 厳密な説明

5.1 1. 反対称成分は二次形式に寄与しない

任意の実正方行列 A について

$$A = \frac{A + A^T}{2} + \frac{A - A^T}{2}$$

と分解できる。$S = (A + A^T)/2$ は対称行列、$K = (A - A^T)/2$ は反対称行列である。反対称行列については

$$x^T K x = 0$$

であるため、

$$x^T A x = x^T S x$$

である。したがって二次形式では対称部分だけを考察すれば十分である。

5.2 2. 正定値性と固有値

A を実対称行列とする。このとき次は同値である。

$$\boxed{A \text{ は正定値} \iff \lambda_i > 0 \ (i = 1, \ldots, n)}$$

理由は直交対角化である。$A = QDQ^T$、$y = Q^T x$ とすると

$$x^T A x = \lambda_1 y_1^2 + \cdots + \lambda_n y_n^2$$

である。すべての λ_i が正なら、$x \neq 0$ すなわち $y \neq 0$ に対して $x^T A x > 0$ である。逆に、ある $\lambda_i < 0$ なら、その固有方向で値は負になる。

境界として、ある $\lambda_i = 0$ の場合も確認しておく。このとき、その固有値に対応する単位固有ベクトルを q_i とすれば、$q_i \neq 0$ であるにもかかわらず

$$q_i^T A q_i = 0$$

となる。したがって A は正定値ではない。つまり「$\lambda_i \geq 0$」では正定値には不足であり、すべての固有値が正であること、すなわち $\lambda_i > 0$ が必要である。

5.3 3. シルベスター判定法

実対称行列 A について、左上からの主小行列式がすべて正であることは、A が正定値であることと同値である。

$$\det A_1 > 0, \quad \det A_2 > 0, \quad \dots, \quad \det A_n > 0$$

この判定法は計算上有用である。ただし、本質は固有値の符号による判定である。

5.4 4. シルベスターの慣性法則

実対称行列 A に対して、可逆な変数変換 $x = Py$ を行うと

$$x^T Ax = y^T (P^T AP)y$$

となる。このような変換を合同変換という。対角化によって二次形式を

$$y_1^2 + \cdots + y_p^2 - y_{p+1}^2 - \cdots - y_{p+q}^2$$

のような形へ整理しても、正の平方項の個数 p、負の平方項の個数 q、0 の個数は変化しない。これをシルベスターの慣性法則という。この不変量により、二次形式の符号構造は座標選択に依存しない。

6 具体例

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

とする。二次形式は

$$x^T Ax = 2x_1^2 + 2x_1x_2 + 2x_2^2$$

である。この行列の固有値は $3, 1$ であり、どちらも正である。したがって A は正定値である。
直交対角化した座標では

$$x^T Ax = 3y_1^2 + y_2^2$$

となる。交差項 $2x_1x_2$ は、主軸に沿った座標へ変換すると消去される。

7 ヘッセ行列による極値判定

二次形式は、多変数関数の二階微分とも関係する。点 a が停留点、すなわち $\nabla f(a) = 0$ を満たすとき、ヘッセ行列 $H_f(a)$ が正定値なら a は狭義局所最小点である。負定値なら狭義局所最大点であり、不定なら鞍点になる。停留点であることを仮定しない場合、ヘッセ行列の正定値性だけでは局所極値を結論できない。

8 判定基準

- 二次形式では、対称部分だけが寄与する。
- 実対称行列の正定値性は、すべての固有値が正であることと同値である。
- 非負定値は、すべての固有値が 0 以上であることと同値である。

- 不定は、正の固有値と負の固有値が混在する状態である。
- 停留点では、ヘッセ行列の正定値性が狭義局所最小の十分条件になる。

9 どこまで成り立つか

固有値で正定値性を判定する議論は、対称行列またはエルミート行列を基本対象にする。一般の非対称行列では、二次形式に寄与するのは対称部分である。

複素では $x^T Ax$ ではなく $x^* Ax$ を使う。エルミート行列でない A に対しては、$x^* Ax$ が一般に複素数になり、正・負という判定がそのままでは意味を持たない。

10 最終形

$$\boxed{q(x) = x^T Ax}$$

$$\boxed{x^T Ax = y^T Dy = \sum_i \lambda_i y_i^2}$$

$$\boxed{A > 0 \Longleftrightarrow \lambda_i > 0 \text{ for all } i}$$

$$\boxed{A > 0 \Longleftrightarrow \det A_k > 0\ (k = 1, \ldots, n)}$$

$$\boxed{\text{合同変換では慣性指数が保存される}}$$

11 一言でいうと

- 二次形式は、対称行列の固有値によって符号と形状を判定できる二次式である。

12 演習リンク

→ 基本演習 固有値・対角化・発展 exercise math linear-algebra
https://study.bem130.com/exercise/math/linear-algebra/固有値・対角化・発展-基本演習/

13 関連リンク

→ 講義 対称行列と直交対角化 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/対称行列と直交対角化-講義/

→ 講義 複素内積とユニタリ行列 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/複素内積とユニタリ行列-講義/

→ 講義 行列式 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/行列式-講義/

→ 講義 **固有値と固有ベクトル** lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/固有値と固有ベクトル-講義/