直交行列と対称行列

1　直交行列

定義 1.1 行列 M が ${}^tM = M^{-1}$ を満たすとき、M は直交行列であると言います。

1.1　直交行列の性質

■２つの直交行列 M, N の積はまた直交行列になります：

$${}^t(MN) = {}^tN{}^tM = N^{-1}M^{-1} = (MN)^{-1}.$$

しかし、直交行列の和は直交行列とは限りません。

■当然直交行列は正則ですが、その行列式は以下の計算が示す様に ± 1 のいずれかです。

$$|M|^2 = |M||M| = |{}^tM||M| = |M^{-1}||M| = |M^{-1}M| = |E| = 1$$

■また、直交行列の表現する一次変換は、ヴェクターの大きさを変えません：

$$\|M\mathbb{a}\|^2 = M\mathbb{a}\cdot M\mathbb{a} = {}^t(M\mathbb{a})M\mathbb{a} = {}^t\mathbb{a}{}^tMM\mathbb{a} = {}^t\mathbb{a}\,\mathbb{a} = \mathbb{a}\cdot\mathbb{a} = \|\mathbb{a}\|^2$$

更に言えば、同様の計算によって、内積も不変である事が分かります：

$$M\mathbb{a}\cdot M\mathbb{b} = {}^t(M\mathbb{a})M\mathbb{b} = {}^t\mathbb{a}{}^tMM\mathbb{b} = {}^t\mathbb{a}\,\mathbb{b} = \mathbb{a}\cdot\mathbb{b}.$$

と云うことは、ヴェクターの大きさも変えず、内積も変えないわけですからこの一次変換は２つのヴェクターの成す角度も変えない事が分かります。

1.2　直交行列の例

２つのヴェクターの内積を変えない変換と云う事ですが、例えばどう云うものだろうと考えてみると、回転変換は正にそうです。２次元の角度 θ の回転変換の表現行列は $\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}$ でしたが、確かにこれは直交行列になっていますね。

また、変換の様子を思い浮かべてみれば分かる通り、ある原点を通る直線に関する折り返しもそうです（演習問題参照)。

1.3　直交行列の固有値

p が直交行列 M の固有値であって対応する固有ヴェクターが $\mathbb{w}$ であるならば、内積の不変性から

$$p^2\mathbb{w}\cdot\mathbb{w} = (p\mathbb{w})\cdot(p\mathbb{w}) = (M\mathbb{w})\cdot(M\mathbb{w}) = \mathbb{w}\cdot\mathbb{w}$$

となって、$\mathbb{w}$ はゼロヴェクターではないので $p^2 = 1$ が分かります。従って直交行列の固有値は、存在するならば ± 1 のいずれか（あるいは両方）です。

1.4　直交行列の成分

$M = \begin{pmatrix}\mathbb{a}_1 & \mathbb{a}_2 & \cdots & \mathbb{a}_n\end{pmatrix}$ を n 次の直交行列とします（$\mathbb{a}_1, \ldots, \mathbb{a}_n$ は n 本の n 次元縦ヴェクターです)。このとき、${}^tMM = E$ から、

$${}^t\begin{pmatrix}\mathbb{a}_1 & \mathbb{a}_2 & \cdots & \mathbb{a}_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbb{a}_1 & \mathbb{a}_2 & \cdots & \mathbb{a}_n\end{pmatrix} = E$$

$$\begin{pmatrix}{}^t\mathbb{a}_1 \\ {}^t\mathbb{a}_2 \\ \vdots \\ {}^t\mathbb{a}_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbb{a}_1 & \mathbb{a}_2 & \cdots & \mathbb{a}_n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & & & \text{\huge 0} \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ \text{\huge 0} & & & 1\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}\mathbb{a}_1\cdot\mathbb{a}_1 & \mathbb{a}_1\cdot\mathbb{a}_2 & \cdots & \mathbb{a}_1\cdot\mathbb{a}_n \\ \mathbb{a}_2\cdot\mathbb{a}_1 & \mathbb{a}_2\cdot\mathbb{a}_2 & \cdots & \mathbb{a}_2\cdot\mathbb{a}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbb{a}_n\cdot\mathbb{a}_1 & \mathbb{a}_n\cdot\mathbb{a}_2 & \cdots & \mathbb{a}_n\cdot\mathbb{a}_n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & & & \text{\huge 0} \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ \text{\huge 0} & & & 1\end{pmatrix}$$

となって、

$$\mathbb{a}_i\cdot\mathbb{a}_j = \begin{cases}1 & i = j \\ 0 & i \neq j\end{cases}$$

が分かります。つまり、n 本のヴェクター $\mathbb{a}_1, \mathbb{a}_2, \ldots, \mathbb{a}_n$ はすべて単位ヴェクターであり、かつ、その内の異なる２本は互いに直交していることが行列 $\begin{pmatrix}\mathbb{a}_1 & \mathbb{a}_2 & \cdots & \mathbb{a}_n\end{pmatrix}$ が直交行列であるための必要十分条件です。

この内積の様に、２つの（自然数の）添字のついたもので、$i = j$ のとき 1 になり $i \neq j$ のとき 0 になるようなものを特に記号 δ_{ij} で表して Kronecker Delta と言います：

$$\delta_{ij} = \begin{cases}1 & i = j, \\ 0 & i \neq j\end{cases}$$

添字 i, j の取りうる範囲はケースバイケースですがそれがどうであっても同じ記号を使います。これは単位行列を表していると考えても良いでしょう。

2　対称行列

定義 2.1 行列 M が ${}^tM = M$ を満たすとき、M は対称行列であると言います。また、${}^tM = -M$ を満たす時は、M は交代行列（aka 歪対称行列・反対称行列）であると言います。

2.1　対称行列の性質

■対称行列の和は対称行列です：

$${}^t(M+N) = {}^tM + {}^tN = M + N.$$

対称行列の積は対称行列になるとは限りません（交代行列についても同様です）。

■任意の行列 A に対して ${}^tAA$ は対称行列になります。

■任意の正方行列 A に対して、$\frac{A+{}^tA}{2}$ は対称行列であり、$\frac{A-{}^tA}{2}$ は交代行列です。
従って、任意の正方行列は対称行列と交代行列の和で書けることになります：

$$A = \frac{A+{}^tA}{2} + \frac{A-{}^tA}{2}.$$

■また、ヴェクターの内積に関しては、M が対称行列なら

$$\mathbb{v} \cdot (M\mathbb{w}) = {}^t\mathbb{v}M\mathbb{w} = {}^t\mathbb{v}{}^tM\mathbb{w} = {}^t(M\mathbb{v})\mathbb{w} = (M\mathbb{v}) \cdot \mathbb{w}$$

となっています。

2.2　対称行列の固有値・固有ヴェクター

2.2.1　固有値

$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$ を２次の正方行列としたとき、その固有方程式は

$$0 = |M - xE| = \begin{vmatrix} m_{11}-x & m_{12} \\ m_{21} & m_{22}-x \end{vmatrix} = x^2 - (m_{11}+m_{22})x + m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21}$$

ですから、もしも M が対称行列ならば $m_{12} = m_{21}$ であって、その判別式は

$$(m_{11}+m_{22})^2 - 4(m_{11}m_{22} - m_{12}^2) = (m_{11}-m_{22})^2 + 4m_{12}^2 \geq 0$$

となり実固有値を（重複度も込めて）２つ必ずもつ事が分かります。要するに、対称行列に関しては『(実) 固有値がない』と云う事はあり得ないわけです（３次対称行列ではどうでしょうか？考えてみて下さい）。

2.2.2　固有ヴェクター

また、２つのヴェクター $\mathbb{v}_p, \mathbb{v}_r$ が対称行列 M のそれぞれ異なる固有値 p, r に対応した固有ヴェクターであるならば、

$$\begin{aligned} & p(\mathbb{v}_p \cdot \mathbb{v}_r) \\ & \quad = (p\mathbb{v}_p) \cdot \mathbb{v}_r = (M\mathbb{v}_p) \cdot \mathbb{v}_r = {}^t\mathbb{v}_p{}^tM\mathbb{v}_r = {}^t\mathbb{v}_p(M\mathbb{v}_r) = {}^t\mathbb{v}_p(r\mathbb{v}_r) = r(\mathbb{v}_p \cdot \mathbb{v}_r) \end{aligned}$$

となり、$p \neq r$ である事から $\mathbb{v}_p \cdot \mathbb{v}_r = 0$ である事、すなわち、異なる固有値に対応した固有ヴェクター同士は垂直である事が分かります。

2.3　２次対称行列の対角化

以下 $M = (m_{ij})$ を２次の対称行列とします。

2.3.1　固有値が重複している場合

この場合は先に判別式を見た様に $m_{11} = m_{22}$, $m_{12} = m_{21} = 0$ となっているはずで、これは M が単位行列の定数倍である事、従って特に既に対角化されている事を意味しますから、この場合は対角化を考える必要はありません。

2.3.2　相異なる２つの固有値をもつ場合

２つの固有値を p, r、それぞれに対応した固有ヴェクターを $\mathbb{v}_p, \mathbb{v}_r$ とします。
このとき $Q = \begin{pmatrix} \mathbb{v}_p & \mathbb{v}_r \end{pmatrix}$ とおけば、

$$MQ = M\begin{pmatrix} \mathbb{v}_p & \mathbb{v}_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M\mathbb{v}_p & M\mathbb{v}_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p\mathbb{v}_p & r\mathbb{v}_r \end{pmatrix}$$

ですが、$\mathbb{v}_p = Q\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ などに注意すれば

$$MQ = \begin{pmatrix} pQ\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} & rQ\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q\begin{pmatrix}p\\0\end{pmatrix} & Q\begin{pmatrix}0\\r\end{pmatrix}\end{pmatrix} = Q\begin{pmatrix}p & 0\\0 & r\end{pmatrix}$$
$$Q^{-1}MQ = \begin{pmatrix}p & 0\\0 & r\end{pmatrix}$$

となって M を対角化する事が出来ます。

ここで固有ヴェクターを並べて作った行列 Q に注目すると、対称行列の異なる固有値に対応する固有ヴェクター同士は垂直であったわけですからこの $\mathbb{v}_p, \mathbb{v}_r$ も垂直です。

そこで元々 $\mathbb{v}_p, \mathbb{v}_r$ を単位ヴェクターである様に選んでおけば（定数倍するだけですからいつでも可能です）、この２本は互いに直交する単位ヴェクターですから、今日最初にお話しした様に行列 Q は直交行列になっています（従って $Q^{-1} = {}^tQ$ です）。

2.4　行列のべき乗

正方行列 M が固有ヴェクターを並べてできる正則行列 P によって

$$P^{-1}MP = D$$

と対角化できる場合、

$$M = PDP^{-1}$$
$$M^n = (PDP^{-1})^n = PD^nP^{-1}$$

となり、対角行列

$$D = \begin{pmatrix} a_1 & & & \text{\huge 0} \\ & a_2 & & \\ & & \ddots & \\ \text{\huge 0} & & & a_m \end{pmatrix}$$

のべき乗は

$$D^n = \begin{pmatrix} a_1^n & & & \text{\huge 0} \\ & a_2^n & & \\ & & \ddots & \\ \text{\huge 0} & & & a_m^n \end{pmatrix}$$

と云う風に簡単に計算されるので、右辺が計算できることになり、結果的に M^n を求めることができます。単にべき乗を求めるだけであれば、正則行列 P は直交行列である必要は全くありません。しかし、２次形式の標準形を求める場合には（M は対称行列です）直交行列を使って対角化しなければなりません。

2.5　Gram-Schmidt の直交化

３次以上の対称行列を直交行列を使って対角化するためには得られた固有ヴェクターの組を互いに直交するものに置き換えなければなりません。

例えば行列 $\begin{pmatrix}1 & -2 & -2\\-2 & 1 & -2\\-2 & -2 & 1\end{pmatrix}$ の固有値は $-3, 3$ で、固有ヴェクターは

固有値 3： $\mathbb{v}_{31} = \begin{pmatrix}-1\\1\\0\end{pmatrix}$, $\mathbb{v}_{32} = \begin{pmatrix}0\\1\\-1\end{pmatrix}$,　固有値-3： $\mathbb{v}_{-3} = \begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$

ですが、$\mathbb{v}_{31}$ と $\mathbb{v}_{32}$ が直交していないので、このまま（長さを１にしたうえで）並べても直交行列にはなりません。

固有値 3 に関する固有ヴェクターは、この２つのヴェクターの一次結合 $a\mathbb{v}_{31} + b\mathbb{v}_{32}$ の中から選ぶならばどれでも良いわけですから、互いに直交する２本を選びます。

取り敢えず $\mathbb{v}_{31}$ は使う事にして、これと $a\mathbb{v}_{31} + b\mathbb{v}_{32}$ が直交する様に定数 a, b を決定してやります。すると

$$0 = \mathbb{v}_{31}\cdot(a\mathbb{v}_{31} + b\mathbb{v}_{32}) = 2a + b$$

であれば良いわけですから、$a = -1, b = 2$ で考えれば

$$-\mathbb{v}_{31} + 2\mathbb{v}_{32} = \begin{pmatrix}1\\1\\-2\end{pmatrix}$$

が得られます。これによって互いに直交する固有ヴェクターの組：

$$\mathbb{v}_{31} = \begin{pmatrix}-1\\1\\0\end{pmatrix}, \quad \mathbb{v}_{33} = \begin{pmatrix}1\\1\\-2\end{pmatrix}, \quad \mathbb{v}_{-3} = \begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$$

が得られたので後はそれぞれを長さ１にして並べれば直交行列ができます。

Exercise

基本演習 1 対称行列 $M = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$ を直交行列によって対角化し M^n を求めて下さい。

基本演習 2 次の各対称行列を直交行列によって対角化して下さい。

(1) $\begin{pmatrix} 1 & -2 & 0 \\ -2 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 3 \end{pmatrix}$　(2) $\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$

(3) $\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$　(4) $\begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}$

基本演習 3 次の 3 本の 4 次元ヴェクターについて以下の問いに答えて下さい：

$$\mathbb{a} = {}^t\begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 & 5 \end{pmatrix}, \mathbb{b} = {}^t\begin{pmatrix} 2 & -3 & 3 & 5 \end{pmatrix}, \mathbb{c} = {}^t\begin{pmatrix} 3 & 2 & -1 & 4 \end{pmatrix}.$$

(1) $\mathbb{b} + k\mathbb{a}$ が $\mathbb{a}$ と垂直になる様な定数 k を求めて下さい。

(2) 上で求めた k を使って $\mathbb{d} = \mathbb{b} + k\mathbb{a}$ とします。このとき、$\mathbb{c} + p\mathbb{a} + r\mathbb{d}$ が $\mathbb{a}, \mathbb{d}$ の両方と垂直である様に定数 p, r を求めて下さい。

基本演習 4 (1) 平面内の原点を通る直線に関する折り返し変換の表現行列は直交行列になる事を示して下さい。

(2) 原点を通らない直線に関する折り返しは、そもそも 1 次変換でありませんが、その理由を端的に述べて下さい。

基本演習 5 2 次の直交行列は、回転行列であるか、又は回転行列と x-軸に関する折り返し変換行列の積のいずれかである事を示して下さい。

発展演習 6 3 次対称行列 $M = \begin{pmatrix} 1 & a & b \\ a & 1 & c \\ b & c & 1 \end{pmatrix}$ について以下の問いに答えて下さい。ただし、a, b, c は全て異なり、いずれも 0 でないとします。

(1) $f(x) = |M - xE|$ を求め、さらに $f(x)$ を $f'(x)$ で割った余り $h(x)$ を求めて下さい。

(2) $f'(x) = 0$ の解 α, β を求め、(1) で求めた $h(x)$ を上手く使って $f(\alpha)f(\beta)$ を求めて下さい。

(3) AM-GM 不等式を使って $f(\alpha)f(\beta) < 0$ である事を示して下さい。

(4) 以上の結果と 3 次関数 $y = f(x)$ のグラフの形に関する考察から、M は 3 つの異なる実固有値をもつ事を示して下さい。

発展演習 7 (1) 行列式の基本的な性質を使って、奇数次の交代行列の行列式は 0 である事を証明して下さい。

(2) 2 次の交代行列式は非負である事を証明して下さい。

(3) 4 次の交代行列式は $abc \neq 0$ なら

$$\begin{vmatrix} 0 & a & b & c \\ -a & 0 & d & f \\ -b & -d & 0 & g \\ -c & -f & -g & 0 \end{vmatrix} \begin{matrix} (1) \\ (2) \\ (3) \\ (4) \end{matrix} = \frac{1}{a^2b^2c^2} \begin{vmatrix} 0 & a & b & c \\ -abc & 0 & bcd & bcf \\ -abc & -acd & 0 & acg \\ -abc & -abf & -abg & 0 \end{vmatrix} \begin{matrix} (1) \\ (2) \times bc \\ (3) \times ac \\ (4) \times ab \end{matrix}$$

と変形出来る事などを使って計算し、常に非負である事を証明して下さい。

(4) 交代行列の（実）固有値は 0 のみである事を証明して下さい。