付録　行列代数

データサイエンスや多変量正規分布を扱う際には，行列代数の知識が欠かせない。ここでは行列代数に現れる諸概念のアイデアや計算方法を解説する。

行列 A の第 (i, j) 成分を $A_{i,j}$ もしくは A_{ij} と表す。ここでは行列の加法・スカラー倍・乗法についてある程度慣れ親しんだものと想定して，その続きから導入していく。

B.1 零行列・単位行列・ベキ乗

定義 B.1　零行列・単位行列・正方行列のベキ乗

(i) すべての成分が 0 であるような (n, m) 行列を**零行列**とよび，$O = O_{n,m}$ と表す。特に，$n = m$ のときは $O_n = O_{n,n}$ と表す。

(ii) n 次正方行列 $E = E_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$ を (n 次) **単位行列**という。

(iii) n 次正方行列 A の**ベキ** (power) を $A^0 = E_n$，$A^2 = AA$，$A^3 = A^2A$ $(= AA^2)$, ..., $A^k = A^{k-1}A$ (ただし $k \geqq 1$) で定める。

定義 B.2　Kronecker のデルタ

整数 i, j に対して $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j \text{ のとき}) \\ 0 & (i \neq j \text{ のとき}) \end{cases}$ を **Kronecker のデルタ**という。

問 B.3　Kronecker のデルタを用いた計算 (解答 ➔ 付録)

(1) $(E_n)_{ij} = (E_n \text{ の } (i, j) \text{ 成分}) = \boxed{}$

(2) n 個の数 $a_1, \cdots, a_n$ に対して $\displaystyle\sum_{k=1}^{n} a_k \delta_{ik} = \boxed{}$

命題 B.4 (**単位行列の性質**)

(n, m) 行列 A と (m, n) 行列 B に対して $E_nA = A$ と $BE_n = B$ が成り立つ。

証明. 問 B.3 (➔ **p. 1**) を用いると，すべての (i, j) 成分について

$$(E_nA)_{ij} = \sum_{k=1}^{n}(E_n)_{ik}A_{kj} = \sum_{k=1}^{n}\delta_{ik}A_{kj} = A_{ij}, \quad (BE_n)_{ij} = \sum_{k=1}^{n}B_{ik}(E_n)_{kj} = \sum_{k=1}^{n}B_{ik}\delta_{kj} = B_{ij}$$

であり，ゆえに $E_nA = A$，$BE_n = B$ が成り立つ。 □

問 B.5　逆行列の定義のための準備 (解答 ➔ 付録)

n 次正方行列 A, X, Y が $XA = E_n = AY$ をみたすとき，$X = Y$ であることを示せ。

B.2 ブロック計算

行列の積について，次の公式が成立する。

公式 B.6 (**ブロック計算**)

以下の行列の積と，点線で分けられた各区画 (**ブロック**という) に現れる行列の積がすべて定義されるとき，次の等式が成り立つ。

$$\left(\begin{array}{c|c} A & B \\ \hline C & D \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c} E & F \\ \hline G & H \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} AE+BG & AF+BH \\ \hline CE+DG & CF+DH \end{array}\right)$$

より細かいブロックに分割されているときでも，形式的にブロック計算するときに現れるすべての行列の積が定義されていれば同様のことが成り立つ。
この事実は，より理論的な計算を行うときにしばしば現れる必須のテクニックといってもよいかもしれない。証明は設定や記号で煩雑になってしまうので省略する。

練習問題 B.7　ブロック計算の練習

行列の積 $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ に対する以下のブロック計算のうち，可能なものはどれか? 可能なものはブロック計算を実行せよ。

(1) $\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 2 & 3 \\ \hline 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 1 & 1 \\ \hline 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{array}\right)$　(2) $\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -1 \\ \hline 0 & 1 & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ \hline 0 & 1 & 0 \end{array}\right)$

(3) $\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -1 \\ \hline 0 & 1 & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 1 & 1 \\ \hline 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{array}\right)$　(4) $\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 3 \\ \hline 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ \hline 0 & 1 & 0 \end{array}\right)$

解答例　(1) ブロック計算できる。実際，

$$
\begin{aligned}
&\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 2 & 3 \\ \hline 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 1 & 1 \\ \hline 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c|c} 1\cdot 1 + (2,3)\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & 1\cdot(1,1) + (2,3)\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hline \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}\cdot 1 + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}(1,1) + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c|c} 1+0 & (1,1)+(3,-2) \\ \hline \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|cc} 1 & 4 & -1 \\ \hline 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{array}\right)
\end{aligned}
$$

(2) ブロック計算できない。実際，形式的に公式 B.6 を適用してみると

$$
\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -1 \\ \hline 0 & 1 & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ \hline 0 & 1 & 0 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\cdot 0 & * \\ \hline * & * \end{array}\right)
$$

という格好になるが，この右辺の左上のブロックに現れる行列の積は定義できない。

(3) ブロック計算できる。実際，次のように計算でき，(1) の計算結果と同じである。

$$
\begin{aligned}
&\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -1 \\ \hline 0 & 1 & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|cc} 1 & 1 & 1 \\ \hline 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c|c} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\cdot 1 + \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}(1,1) + \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hline 0\cdot 1 + (1,0)\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & 0\cdot(1,1) + (1,0)\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c|c} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hline 0+0 & (0,0)+(0,-1) \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|cc} 1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -1 \end{array}\right)
\end{aligned}
$$

(4) ブロック計算できる。実際，次のように計算でき，(1), (3) の計算結果と同じ。

$$
\begin{aligned}
&\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 2 & 3 \\ \hline 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ \hline 0 & 1 & 0 \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c|c} (1,2)\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + 3\cdot(0,1) & (1,2)\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + 3\cdot 0 \\ \hline \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}(0,1) & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}\cdot 0 \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c|c} (1,1)+(0,3) & -1+0 \\ \hline \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 4 & -1 \\ \hline 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{array}\right)
\end{aligned}
$$

例 B.8　典型的なブロック計算例 1

n 次正方行列 A と (n,m) 行列のブロック分割

$$B = \left(\begin{array}{c:c:c:c} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c:c:c:c} \boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_m \end{array}\right)$$

が与えられたとき，次の計算ができる。

$$AB = A\left(\begin{array}{c:c:c:c} \boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_m \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c:c:c:c} A\boldsymbol{b}_1 & A\boldsymbol{b}_2 & \cdots & A\boldsymbol{b}_m \end{array}\right)$$

例 B.9　典型的なブロック計算例 2

$(n,2)$ 行列 X のブロック分割

$$X = \left(\begin{array}{cc} x_{11} & x_{12} \\ \hdashline x_{21} & x_{22} \\ \hdashline \vdots & \vdots \\ \hdashline x_{n1} & x_{n2} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{x}_*^1 \\ \hdashline \boldsymbol{x}_*^2 \\ \hdashline \vdots \\ \hdashline \boldsymbol{x}_*^n \end{array}\right)$$

と 2 次元列ベクトル $\mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$ が与えられたとき，次の計算が可能である。

$$X\mathbf{w} = \left(\begin{array}{cc} x_{11} & x_{12} \\ \hdashline x_{21} & x_{22} \\ \hdashline \vdots & \vdots \\ \hdashline x_{n1} & x_{n2} \end{array}\right)\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{x}_*^1 \\ \hdashline \boldsymbol{x}_*^2 \\ \hdashline \vdots \\ \hdashline \boldsymbol{x}_*^n \end{array}\right)\mathbf{w} = \left(\begin{array}{c} \boldsymbol{x}_*^1\mathbf{w} \\ \hdashline \boldsymbol{x}_*^2\mathbf{w} \\ \hdashline \vdots \\ \hdashline \boldsymbol{x}_*^n\mathbf{w} \end{array}\right)$$

B.3 2 次正方行列の行列式と逆行列

定義 B.10　2 次正方行列に対する行列式

2 次正方行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ に対して，$\det A = ad - bc$ で定義される量を A の**行列式** (**determinant**) という。

問 B.11　行列式の計算 (解答➔付録)

(1) $\det\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 2 \end{pmatrix} = \boxed{}$　　(2) $\det\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix} = \boxed{}$

(3) $\det E_2 = \boxed{}$　　(4) $\det(-E_2) = \boxed{}$

公式 B.12 (**行列の積と行列式の関係**)

2 次正方行列 A と B に対して $\det(AB) = (\det A)(\det B)$ が成り立つ。

証明. $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix}$ のとき，次のように計算できる。

$$\begin{aligned}\det(AB) &= \det\left(\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix}\right) = \det\begin{pmatrix} ae+bg & af+bh \\ ce+dg & cf+dh \end{pmatrix} \\ &= (ae+bg)(cf+dh) - (af+bh)(ce+dg) \\ &= (acef + \underset{\sim}{adeh} + \underline{bcfg} + bdgh) - (acef + \underset{\sim}{adfg} + \underline{bceh} + bdgh) \\ &= \underset{\sim}{ad(eh-fg)} - \underline{bc(eh-fg)} \\ &= (ad-bc)(eh-fg) = \det\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\det\begin{pmatrix} e & f \\ g & h \end{pmatrix} = (\det A)(\det B)\end{aligned}$$

□

問 B.13　解答➔付録

2 次正方行列 A と B が $AB = E_2$ をみたすとき，$\det A \neq 0$ かつ $\det B \neq 0$ を示せ。

次に逆行列と正則行列の概念を定める。

定義 B.14　逆行列・正則行列

n 次正方行列 A に対して

(i) $AX = E_n = XA$ となる n 次正方行列 X が存在するとき，X を A の**逆行列** (**inverse matrix**) といい，この X を A^{-1} により表す。

(ii) A が**正則** (**regular**)[*1]であるとは，A の逆行列が存在することをいう。

正方行列 A の**逆行列は存在するとは限らない** (➔問 B.13 の対偶) が，**存在すれば** A に対して**一つだけに定まる** (問 B.5➔p. 2)。

命題 B.15 (**逆行列の性質**)

二つの n 次正方行列 A と B に対して，

(1) A と B が共に正則ならば AB もまた正則であり，かつ $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$。

(2) A が正則ならば A^{-1} もまた正則であり，$(A^{-1})^{-1} = A$ が成り立つ。

命題 B.15 の証明. **(1)** $X = B^{-1}A^{-1}$ とおくと

$$\begin{aligned} X(AB) &= (B^{-1}A^{-1})(AB) = B^{-1}(A^{-1}A)B = B^{-1}E_nB = B^{-1}B = E_n, \\ (AB)X &= (AB)(B^{-1}A^{-1}) = A(BB^{-1})A^{-1} = AE_nA^{-1} = AA^{-1} = E_n \end{aligned}$$

であるから，$X(AB) = E_n = (AB)X$ となる。ゆえに AB は正則であり，その逆行列 $(AB)^{-1}$ は $X = B^{-1}A^{-1}$ により与えられる。

(2) $X = A$ とおくと

$$XA^{-1} = AA^{-1} = E_n = A^{-1}A = A^{-1}X,$$

つまり $XA^{-1} = E_n = A^{-1}X$ が成り立つ。ゆえに A^{-1} は正則であり，その逆行列 $(A^{-1})^{-1}$ は $X = A$ で与えられる。 □

[*1] 他にも可逆 (invertible) とか非退化 (nondegenerate) ともよばれることもある。

定理 B.16 (**行列の正則性と行列式の関係,** 証明➔付録) 任意の 2 次正方行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ に対して以下は同値である。

(1) A は正則行列である。

(2) $\det A (= ad - bc) \neq 0$

(3) $XA = E_2$ となる 2 次正方行列 X が存在する。

(4) $AX = E_2$ となる 2 次正方行列 X が存在する。

さらにこのとき (3) と (4) に現れる X に関して次が成り立つ。

$$X = A^{-1} = \frac{1}{ad - bc}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} \tag{B.1}$$

連立一次方程式への応用

次の二元連立一次方程式を解くことを考えてみよう。

$$\begin{cases} ax + by = u, \\ cx + dy = v \end{cases} \tag{☆}$$

これを行列を使って書き直すと $\begin{pmatrix} ax + by \\ cx + dy \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ であり，この左辺を行列の積を用いて書き直すと次のように書き換えることができる。

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}}_{\substack{= A \\ \text{とおく。}}} \underbrace{\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}}_{\substack{= \boldsymbol{x} \\ \text{とおく。}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}}_{\substack{= \boldsymbol{b} \\ \text{とおく。}}}, \quad \text{つまり} \quad A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{★}$$

定義 B.17　係数行列・拡大係数行列

上に現れた A と $\left(A \,\vdots\, \boldsymbol{b} \right)$ を，それぞれ連立一次方程式 (☆) の**係数行列** (coefficient matrix), **拡大係数行列** (augmented matrix) とよぶ。

もし $\det A \neq 0$ **ならば**，定理 B.16 より A は正則となるので，その逆行列 A^{-1} が存在することになる。そこで (★) の両辺に左から A^{-1} を掛けることで次のことがわかる。

公式 B.18　連立一次方程式 (☆) および (★) において，$\det A \neq 0$ ならば解は

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b} = \frac{1}{ad - bc}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

により与えられる。

➔ 特に $\det A \neq 0$ ならば，(★) の解は上式で表される $\boldsymbol{x}$ だけしかない!

一方で，連立一次方程式 (★) において $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$ の場合，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ は必ず (★) の解になっていることに注意しよう。

定義 B.19　連立一次方程式の自明な解

次の連立一次方程式において，下記の用語を導入する。

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \tag{★}$$

(i) $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ を (★) の**自明な解**という。

(ii) $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \neq \boldsymbol{0}$ であるような解を (★) の**自明でない解**という。

➔ つまり x と y のうち少なくとも一方は 0 でないということ。

公式 B.18 (➔p. 6) について，$\det A = 0$ の場合を考えてみよう。A が零行列の場合は，いかなるベクトル $\boldsymbol{x}$ に対しても $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ が成り立つ。$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ が零行列でない場合は，次の二通りに分けられる。

- a もしくは b が零でない場合，$\begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix} \neq \boldsymbol{0}$ かつ

$$A\begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ ad - bc \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \det A \end{pmatrix} = \boldsymbol{0},$$

  つまり $\begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix}$ は連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ の自明でない解である。

- c もしくは d が零でない場合，同様に $\begin{pmatrix} d \\ -c \end{pmatrix}$ は連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ の自明でない解であることが確かめられる。

これに加えて，公式 B.18 の対偶をとることで次がわかる。

Point: (行列式) $= 0$ は自明でない解の存在と同値です!

2 次正方行列 A に対して次が成り立つ。

$$\left.\begin{array}{c} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \text{ 以外にも } A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \\ \text{をみたす解 } \boldsymbol{x} \text{ が存在する} \end{array}\right\} \Longleftrightarrow \det A = 0$$

公式 B.18 (➔p. 6) より，連立方程式 (☆) の係数行列 A が $\det A \neq 0$ を場合の解法を示してくれているが，一方で $\det A = 0$ の場合はどうすればよいのかを以降で考えてみよう。

問 B.20　基本変形—その 1(解答なし!)

$(2,m)$ 行列 $A=\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_m \end{pmatrix}$ に**左から**行列 $\begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & l \end{pmatrix}$ を掛けると...

$$\begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & l \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_m \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boxed{\quad} & \boxed{\quad} & \cdots & \boxed{\quad} \\ \boxed{\quad} & \boxed{\quad} & \cdots & \boxed{\quad} \end{pmatrix}$$

つまり，行列 A の

「1 **行目を** $\boxed{\quad}$ **倍，**2 **行目を** $\boxed{\quad}$ **倍することになる。**」

さらに $\boldsymbol{k},\boldsymbol{l}$ **が共に** 0 **でないとき**は $\det\begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & l \end{pmatrix}=\boxed{\quad}\neq 0$ であるから，上の両辺に左から
さらに

$$\begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & l \end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix} \boxed{\quad} & \boxed{\quad} \\ \boxed{\quad} & \boxed{\quad} \end{pmatrix}$$

を左から掛けることでもとの行列 A が復元される。

問 B.21　基本変形—その 2(解答なし!)

$(2,m)$ 行列 $A=\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_m \end{pmatrix}$ に**左から**行列 $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ を掛けると...

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_m \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boxed{\quad} & \boxed{\quad} & \cdots & \boxed{\quad} \\ \boxed{\quad} & \boxed{\quad} & \cdots & \boxed{\quad} \end{pmatrix}$$

つまり，行列 A の

「1 **行目と** 2 **行目を** $\boxed{\quad}$ **ことになる。**」

また $\det\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}=\boxed{\quad}\neq 0$ であるから，上の二式に行列

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{-1}=\begin{pmatrix} \boxed{\quad} & \boxed{\quad} \\ \boxed{\quad} & \boxed{\quad} \end{pmatrix}$$

を掛けるともとの行列 A が復元される。

問 B.22　基本変形――その 3(**解答なし!**)

$(2,m)$ 行列 $A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_m \end{pmatrix}$ に**左から**行列 $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ k & 1 \end{pmatrix}$ を掛けると...

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ k & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_m \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \boxed{} & \boxed{} & \cdots & \boxed{} \\ \boxed{} & \boxed{} & \cdots & \boxed{} \end{pmatrix}$$

つまり，行列 A の

「1 **行目の** k **倍を** 2 **行目に** $\boxed{}$ **ことになる。**」

また $\det\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ k & 1 \end{pmatrix} = \boxed{} \neq 0$ であるから，上の二式にさらに行列

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ k & 1 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \boxed{} & \boxed{} \\ \boxed{} & \boxed{} \end{pmatrix}$$

を左から掛けるともとの行列 A が復元される。

一方で行列 $\begin{pmatrix} 1 & k \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ を掛けると...

$$\begin{pmatrix} 1 & k \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_m \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \boxed{} & \boxed{} & \cdots & \boxed{} \\ \boxed{} & \boxed{} & \cdots & \boxed{} \end{pmatrix}$$

つまり，行列 A の

「2 **行目の** k **倍を** 1 **行目に** $\boxed{}$ **ことになる。**」

これに，さらに行列 $\begin{pmatrix} \boxed{} & \boxed{} \\ \boxed{} & \boxed{} \end{pmatrix}$ を左から掛けると，もとの行列 A が復元される。

以上の問 B.20, B.21, B.22 からわかったことを以下にまとめておこう。

要点 B.23 (**行列の行基本変形操作**)

行列 A に「**適当な**」行列を**左から**掛けると次の**可逆な操作**が実現できる。

(1) A の各行を 0 でない定数倍する

(2) A の異なる二つの行を入れ替える

(3) A の各行の定数倍を，他の行に加える

この三つの操作を行列の (行の) **基本変形**という。

その「適当な」行列自体は覚えてなくてもよい!

- 行の基本変形とは，適当な正則行列 Q を**左から**掛けることに他ならない。
- 具体的に Q がどのような行列であるかは覚えなてなくてよい。実際，その行列を具体的に知りたいときは次のようにすればよいからである。

$$A \xrightarrow{\text{基本変形}} B = \underbrace{Q}_{\substack{\text{この行列 } Q \text{ を思い} \\ \text{出したいときは...}}} A$$

... 行列 A の右に単位行列を置いた新たな行列 $\left(\begin{array}{c:c} A & E_2 \end{array}\right)$ に**同じ**変形を施す。

$$\left(\begin{array}{c:cc} A & 1 & 0 \\ & 0 & 1 \end{array}\right) \xrightarrow[\text{基本変形}]{\textbf{上と同じ}} \underbrace{\left(\begin{array}{c:cc} B & * & * \\ & * & * \end{array}\right)}_{\substack{\textbf{この点線の右側に現れる} \\ \textbf{行列が } Q \textbf{ に等しい。}}}$$

- 特に $B = E_2 =$ (単位行列) となったとき，$QA = B = E_2$ であるから A は正則であり，$A^{-1} = Q$ と結論できる (定理 B.16 ➔ p. 6)。つまり，式 (B.1) (➔ p. 6) を覚えていなくても，基本変形によって逆行列を求めることができるのである。

行列の基本変形のゴールとなる形を以下に導入しておこう。

定義 B.24　簡約行列

次の形の行列を (行) **簡約階段行列**という:

$$\left(\begin{array}{c|cccccccc}
 & 1 & *\cdots* & 0 & & & & 0 & \\
 & & & 1 & *\cdots & & & 0 & \\
 & & & & & \ddots & & \vdots & \\
O & & & & & & \cdots * & 0 & \\
 & & & O & & & & 1 & *\cdots \\
 & & & & & & & & \ddots
\end{array}\right) \tag{B.2}$$

ただし，

(1) 実線より左側の零行列でできたブロックは現れないこともありうる。
(2)「$*$」は「何か数字がある」ということを意味している。
　←「$*$」にすべて同じ数字が入るとは限らない!
(3) 各ステップ $\begin{array}{ccc} 1 & * \cdots * & 0 \\ & & 1 \end{array}$ の「$*\cdots*$」の部分はなく，$\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ & 1 \end{array}$ となっていることもありうる。
(4) 破線で出来た階段の下には零のみが並び，**縦**破線の右隣りには必ず 1 が現れる。
　→ つまり左上から階段を辿っていくとき，新たな段差は「1」によって作られる。
(5) さらに，(4) において 1 が現れた列に注目すると，その 1 の上には零のみが並ぶ。

この簡約行列は，次の意味で行列の基本変形のゴールとして設定してよい。

命題 B.25 任意の行列は基本変形によって一意的な簡約階段行列へと変形される。

行列を基本変形 (要点 B.23 ➔ p. 10) によって簡約階段行列へと変形することを，行列の**簡約化** (reduction) あるいは **Gauss の掃き出し法** (Gaussian elimination) という。

定義 B.26 階数

行列 A を簡約化したときに現れる，零でない行ベクトルの個数を A の**階数** (rank) といい，$\operatorname{rank} A$ により表す。← つまり簡約化された行列に現れた階段の段数のこと!

階数の定義と簡約行列の定義 B.7 により，次のことがわかる。

命題 B.27 (n, m) 行列 A に対して次が成り立つ。

$$\operatorname{rank} A \leqq n = (A \text{ の行の数})$$

← 天井から床に向かう階段の数が行列の高さ (行の数) n を上回ることはあり得ないから。

例えば $(2,3)$ 行列を簡約化すると，以下のいずれかの形が現れることになる。

$\begin{pmatrix} 1 & 0 & * \\ 0 & 1 & * \end{pmatrix}$ (← 階数は 2 で確定する。)

$\begin{pmatrix} 1 & * & * \\ 0 & 0 & * \end{pmatrix}$ (←「$*$」の部分に現れる数次第で階数は 1 か 2 になる。)

$\begin{pmatrix} 0 & 1 & * \\ 0 & 0 & * \end{pmatrix}$ (←「$*$」の部分に現れる数次第で階数は 1 か 2 になる。)

$\begin{pmatrix} 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & * \end{pmatrix}$ (←「$*$」の部分に現れる数次第で階数は 0 か 1 になる。)

練習問題 B.28　簡約化の練習 1

次の行列を簡約階段行列へと基本変形せよ。

(1) $\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$　　(2) $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix}$

解答例　基本変形の手順を簡潔に表すために，

$$A \xrightarrow{\substack{① \to ① \\ ② \to ② + 3 \times ①}} B$$

というような記号を用いてみよう。これは，A を基本変形して B を作る際「A の 1 行目には何もせず，それをそのまま B の 1 行目とした。A の 2 行目には A の 1 行目を 3 倍したものを加えて，それを B の 2 行目とした」という意味である。ⓚ は変形前の行列の k 行目を表している。変形後の行列の k 行目には「ⓚ →」の直後の記号で表されるものが入る。基本変形の仕方によって記号の並びには様々なバリエーションがあるが，必ず基本変形 (要点 B.23 ➲ p. 10) のいずれかしか許されない。

ここでは，基本変形を実行する間に，その後の変形で変更する必要のない確定した成分の背景を灰色にしていく。

(1) $\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\substack{① \to ① \\ ② \to ② + ①}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\substack{① \to ① + ② \\ ② \to ②}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

(2) $\begin{pmatrix} 3 & 6 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\substack{① \to ② \\ ② \to ①}} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix} \xrightarrow{\substack{① \to ① \\ ② \to ② - 3 \times ①}} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

基本変形 (要点 B.23 ➲ p. 10) は $(2, m)$ 型の行列だけでなく，どんな型の行列に対してもそのまま適用できる。

練習問題 B.29　簡約化の練習 2

次の行列を簡約階段行列へと基本変形せよ。

(1) $\left(\begin{array}{ccc:c} 4 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 3 & 0 \end{array}\right)$　　(2) $\left(\begin{array}{ccc:c} 1 & 3 & 1 & 3 \\ 3 & 9 & 4 & 10 \\ 2 & 6 & 3 & 7 \end{array}\right)$

(3) $\left(\begin{array}{ccc:c} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 2 & 4 & 6 & 2 \\ 7 & 14 & 21 & 7 \end{array}\right)$　　(4) $\left(\begin{array}{ccc:c} 1 & 2 & 1 & 6 \\ 2 & 2 & 2 & 12 \\ 1 & 4 & 1 & 8 \end{array}\right)$

解答例　基本変形の手順を示すために，練習問題 B.28 (➲ p. 12) の解答例で用いたような記号を用いることにする。

(1)

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 3 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} - \text{③} \\ \text{②} \to \text{②} \\ \text{③} \to \text{③} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -2 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 3 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} \\ \text{②} \to \text{②} - 2 \times \text{①} \\ \text{③} \to \text{③} - 3 \times \text{①} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & -1 & 4 & -2 \\ 0 & -2 & 9 & -3 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} \\ \text{②} \to (-1) \times \text{②} \\ \text{③} \to \text{③} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & -4 & 2 \\ 0 & -2 & 9 & -3 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} - \text{②} \\ \text{②} \to \text{②} \\ \text{③} \to \text{③} + 2 \times \text{②} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & -4 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} - 2 \times \text{③} \\ \text{②} \to \text{②} + 4 \times \text{③} \\ \text{③} \to \text{③} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -3 \\ 0 & 1 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

(2)

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & 1 & 3 \\ 3 & 9 & 4 & 10 \\ 2 & 6 & 3 & 7 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} \\ \text{②} \to \text{②} - 3 \times \text{①} \\ \text{③} \to \text{③} - 2 \times \text{①} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 3 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} - \text{②} \\ \text{②} \to \text{②} \\ \text{③} \to \text{③} - \text{②} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 3 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(3)

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 2 & 4 & 6 & 2 \\ 7 & 14 & 21 & 7 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} \\ \text{②} \to \text{②} - 2 \times \text{①} \\ \text{③} \to \text{③} - 7 \times \text{①} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(4)

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 6 \\ 2 & 2 & 2 & 12 \\ 1 & 4 & 1 & 8 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} \\ \text{②} \to \text{②} - 2 \times \text{①} \\ \text{③} \to \text{③} - \text{①} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 6 \\ 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} \\ \text{②} \to -\frac{1}{2} \times \text{②} \\ \text{③} \to \text{③} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 6 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} - 2 \times \text{②} \\ \text{②} \to \text{②} \\ \text{③} \to \text{③} - 2 \times \text{②} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 6 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} \\ \text{②} \to \text{②} \\ \text{③} \to \frac{1}{2} \times \text{③} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 6 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\begin{subarray}{l} \text{①} \to \text{①} - 6 \times \text{③} \\ \text{②} \to \text{②} \\ \text{③} \to \text{③} \end{subarray}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

さて，ここで基本変形に基づいた連立方程式の解法についてその手順を次にまとめよう。

要点 B.30 (**基本変形による連立一次方程式の解法**)

(1) 次の連立方程式を解きたいとする。

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{★}$$

(2) (★) の拡大係数行列 $\left(\begin{array}{c:c} A & \boldsymbol{b} \end{array}\right)$ を簡約化して作った簡約行列は，ある**正則**行列 Q を用いて $\left(\begin{array}{c:c} QA & Q\boldsymbol{b} \end{array}\right)$ と書けるのであった (**Point ➔ p. 10**)。

(3) n 次正方行列 Q は正則なので次の構図が成り立つ。

$$\begin{tikzcd}[column sep=huge] A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \arrow[r, Leftrightarrow] \arrow[r, bend left, "\text{両辺に左から } Q \text{ を掛ける}"] & QA\boldsymbol{x} = Q\boldsymbol{b} \arrow[l, bend left, "\text{両辺に左から } Q^{-1} \text{ を掛ける}"] \end{tikzcd} \tag{★}$$

そこで $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解くために $QA\boldsymbol{x} = Q\boldsymbol{b}$ を解く。

上の (3) において，$QA\boldsymbol{x} = Q\boldsymbol{b}$ を解こうと考えるのは，行列 QA は A を簡約化したものであるから，もとの $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ よりも $QA\boldsymbol{x} = Q\boldsymbol{b}$ の方が簡単な形になっていると期待できるからである。

定義 B.31　一次結合

m 個の n 次元ベクトル $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{v}_m$ が与えられているとする。n 次元ベクトル $\mathbf{v}$ が $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{v}_m$ の ($\mathbb{R}$ 上) **一次結合**であるとは，うまく (実) 数 $c_1, c_2, \cdots, c_m$ を選ぶと，$\mathbf{v}$ が次のように表現できることをいう。

$$\mathbf{v} = c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 + \cdots + c_m\mathbf{v}_m$$

任意の 2 次元実ベクトル $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ は

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ x_2 \end{pmatrix} = x_1\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

のように，二つの 2 次元ベクトル $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ の一次結合として表すことができる。これらのベクトルは $\mathbb{R}^2$ の**基本ベクトル**とよばれる。

問 B.32　解答 ➔ 付録

a, b, c を任意パラメータとするとき，次のベクトルをこれらのパラメータを含まないベクトルの一次結合として表せ。

(1) $\begin{pmatrix} c \\ c \\ c \end{pmatrix}$　(2) $\begin{pmatrix} a \\ b+c \\ 0 \end{pmatrix}$　(3) $\begin{pmatrix} a+3c \\ 2b+a \\ c+a+2b \end{pmatrix}$

連立方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解 $\boldsymbol{x}$ は，問 B.32 のように任意定数を含まないベクトルたちの一次結合で表す習慣をつけておこう。

練習問題 B.33　基本変形による連立方程式の解法手順

次の連立方程式の解をすべて求めよ。

(1) $\begin{cases} 4x+2y+z=1, \\ 2x+y=0, \\ 3x+y+3z=0 \end{cases}$　(2) $\begin{cases} x+3y+z=3, \\ 3x+9y+4z=10, \\ 2x+6y+3z=7 \end{cases}$

(3) $\begin{cases} x+2y+3z=1, \\ 2x+4y+6z=2, \\ 7x+14y+21z=7 \end{cases}$　(4) $\begin{cases} x+2y+z=6, \\ 2x+2y+2z=12, \\ x+4y+z=8 \end{cases}$

解答例　(1) の拡大係数行列 $\left(\begin{array}{ccc|c} 4 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 3 & 0 \end{array}\right)$ を簡約化すると $\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & -3 \\ 0 & 1 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{array}\right)$ であった (練習問題 B.29–(1) ➔ p. 12)。そこでこれを拡大係数行列にもつ連立方程式

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 6 \\ 1 \end{pmatrix}$$

を解くと $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 6 \\ 1 \end{pmatrix}$ となる。この解の表現に必要なパラメータの個数は 0 であり，これは (係数行列の列数) $-$ rank(係数行列) $= 3-3$ に一致している。

(2) の拡大係数行列 $\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 3 & 1 & 3 \\ 3 & 9 & 4 & 10 \\ 2 & 6 & 3 & 7 \end{array}\right)$ を簡約化すると $\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 3 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$ であった。(練習問題 B.29–(2) ➔ p. 12) そこでこれを拡大係数行列にもつ次の連立方程式を解く。

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{つまり} \quad \begin{cases} x+3y=2, \\ z=0 \end{cases}$$

z の値は $z=0$ に決まる。x と y の方に注目すると，式 $x+3y=2$ より x と y のどちらかの値が決まれば，他方も決まる。そこで数 c を任意として $y=c$ とおく。すると

$x=-3y+2=-3c+2$ と決まる。ゆえに c を任意定数として，解は次のように表せる。

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ -3c+2 \\ 0 \end{pmatrix} = c\begin{pmatrix} 1 \\ -3 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

(数 c を任意に選ぶごとに異なる解を与えることになるので，解は無限にたくさんある。)
この場合も，パラメータの個数と階数の関係 $1=3-2$ が成り立つ。

(3) の拡大係数行列 $\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 2 & 4 & 6 & 2 \\ 7 & 14 & 21 & 7 \end{array}\right)$ を簡約化すると $\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$ であった (**練習問題 B.29–(3) ➲ p. 12**)。そこでこれを拡大係数行列にもつ次の連立方程式を解く。

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{つまり} \quad x+2y+3z=1$$

この式は x，y，z のうちどれか二つの値が決まれば，残る一つも決まることを示している。そこで数 c_1，c_2 を任意として $y=c_1$，$z=c_2$ とおく。すると x の値は $x=-2y-3z+1=-2c_1-3c_2+1$ に決まる。ゆえに解は次のように表せる。

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2c_1-3c_2+1 \\ c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = c_1\begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2\begin{pmatrix} 0 \\ -3 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

この場合もパラメータの個数と階数の関係 $2=3-1$ が成り立つ。

(4) の解が存在したとする。(4) の拡大係数行列 $\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 6 \\ 2 & 2 & 2 & 12 \\ 1 & 4 & 1 & 8 \end{array}\right)$ を簡約化すると $\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ であった (**練習問題 B.29–(4) ➲ p. 12**)。ゆえにこれを拡大係数行列にもつ連立方程式

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

が成り立つことになるが，これは $\begin{cases} x+z=0, \\ y=0, \\ 0=1, \end{cases}$ 特に $0=1$ という矛盾を起こす。ゆえに (4) に解は存在しない。

コメント　これらの例からもわかる通り，一般に連立方程式を解く際に次が成り立つ。

$$\begin{pmatrix} \text{すべての解を表現するために} \\ \text{必要最小限のパラメータの個数} \end{pmatrix} = (\text{係数行列の列数}) - \mathrm{rank}(\text{係数行列})$$

B.4 固有値・固有ベクトル・対角化可能性

B.4.1　固有値と固有ベクトル

定義 B.34　固有値・固有ベクトル

A を n 次正方行列とする。複素数 λ が A の**固有値** (eigenvalue) であるとは，

$$A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x} \tag{B.1}$$

をみたす**零ベクトルでない** n 次元ベクトル $\boldsymbol{x}$ が存在することをいう。この $\boldsymbol{x}$ を，固有値 λ に関する A の**固有ベクトル** (eigenvector) という。

定義から，$\mathbf{0}$ は固有ベクトルではないことに注意せよ。またベクトル $\boldsymbol{x}$ の成分は一般に複素数であるかもしれない。式 (B.1) は「$\boldsymbol{x}$ の方向を考えると，A はちょうど λ 倍の効果をもたらす」ことを表す。これは一般に，ベクトル $\boldsymbol{y}$ に A を掛けると元の $\boldsymbol{y}$ の方向からずれたベクトルになることが多い中，固有ベクトルの場合はその方向からずれないという特殊な状況を表しているのである。

A が 2 次正方行列の場合に式 (B.1) の右辺を移項して書き換えると次が成り立つ。

$$(A - \lambda E_2)\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \tag{B.2}$$

ここで E_2 は 2 次の単位行列である。これは (B.1) と同値な式であるから，次の同値性が得られた。

$$\lambda \text{ が } A \text{ の固有値} \iff \begin{array}{c}\text{連立方程式 } (A - \lambda E_2)\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \\ \text{が自明でない解 } \boldsymbol{x} \text{ をもつ}\end{array}$$

この右側の条件について **Point** (➲p. 7) を思い出すと次のことがわかる。

定理 B.35　2 次正方行列 A と複素数 λ に対して以下は同値である。

(1)　λ は A の固有値である。

(2)　λ は $\det(A - \lambda E_2) = 0$ をみたす。

上の (2) に現れた等式を λ に関する方程式と考えるとき，これを A の**固有方程式**とよぶ。

この定理により，正方行列 A の固有値と固有ベクトルをすべて知るには，以下の手順を踏めばよいことがわかる。

Point: 固有値と固有ベクトルを求める手順

① **A の固有方程式 $\det(A - \lambda E_2) = 0$ の解 λ をすべて求める。**

← こうして求めた λ がすべて固有値である。

② **各固有値 λ について，連立一次方程式 $(A - \lambda E_n)\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$ の解をすべて求める。**

← 要点 B.30 (➲p. 14) を参考にしてこの連立方程式を解くことになる。

練習問題 B.36　行列の固有値と固有ベクトルをすべて求めてみよう

次の正方行列 A の固有値とそれぞれの固有ベクトルをすべて求めよ。

(1) $A = \begin{pmatrix} 5 & -4 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}$　(2) $A = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}$

(3) $A = \begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$　(4) $A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

解答例　(1) $A = \begin{pmatrix} 5 & -4 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}$ のとき，$\det(A - \lambda E_2)$ は次のように計算できる。

$$\begin{aligned}\det(A - \lambda E_2) &= \det\left(\begin{pmatrix} 5 & -4 \\ 3 & -2 \end{pmatrix} - \lambda\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right) \\ &= \det\begin{pmatrix} 5-\lambda & -4 \\ 3 & -2-\lambda \end{pmatrix} \\ &= (5-\lambda)(-2-\lambda) - (-4)\cdot 3 \\ &= \lambda^2 - 3\lambda + 2 = (\lambda - 1)(\lambda - 2)\end{aligned}$$

ゆえに A の固有方程式 $\det(A - \lambda E_2) = 0$ を解くと $\lambda = 1, 2$。固有値は 1 と 2 である。

次に固有値 $\lambda = 1$ に関する A の固有ベクトル $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ を求める。このためには連立一次方程式 $(A - E_2)\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$ を解けばよいから，そこで要点 B.30 (➲ p. 14) の手順に従おう。拡大係数行列 $\left(\begin{array}{c:c} A - E_2 & \mathbf{0} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cc:c} 4 & -4 & 0 \\ 3 & -3 & 0 \end{array}\right)$ を簡約化すると $\left(\begin{array}{cc:c} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$ となる。

コメント　固有ベクトルを求めるために用いる拡大係数行列は，縦点線の右には 0 しか現れないのでこの部分は省略して書いても (つまり係数行列を基本変形しても) 計算結果には差し支えない。

これを拡大係数行列にもつ方程式は $x - y = 0$ と同値になる。これは x と y のどちらかの値が決まれば他方の値も決まるので，数 c を任意として $y = c$ とおくと $x = y = c$ である。ゆえに $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ c \end{pmatrix} = c\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ となる。以上から，固有値 1 に関する固有ベクトルは $c\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ である。ただし，c はゼロでない任意定数とした。

コメント　定義 B.10 (➲ p. 17) より，零ベクトル $\mathbf{0}$ は固有ベクトルではないので，$c = 0$ を除いた。

念の為に検算しておくと，

$$\begin{pmatrix} 5 & -4 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

となり，正しいことがわかる。

次に固有値 $\lambda = 2$ に関する A の固有ベクトル $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ を求める。このためには連立一次方程式 $(A - 2E_2)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ を解けばよい。係数行列 $A - 2E_2 = \begin{pmatrix} 3 & -4 \\ 3 & -4 \end{pmatrix}$ を基本変形すると $\begin{pmatrix} 3 & -4 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ となる。これを係数行列にもつ方程式は $3x - 4y = 0$ と同値になる。これは x と y のどちらかの値が決まれば他方の値も決まるので，数 c を任意として $y = c$ とおくと $x = \dfrac{4}{3}y = \dfrac{4}{3}c$ となる。ゆえに

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{3}c \\ c \end{pmatrix} = \frac{c}{3}\begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix}$$

である。以上から，固有値 1 に関する固有ベクトルは $c\begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix}$ である (ただし c はゼロでない任意定数)。

> **コメント**　数 c が数直線内を隅々まで動くとき，$\dfrac{c}{3}$ もまたそうなる。つまり $\dfrac{c}{3}$ もまた勝手な数を表現できるので，これを改めて任意定数 c と置きなおした。

念の為に検算しておくと，

$$\begin{pmatrix} 5 & -4 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 6 \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix}$$

となり，正しいことがわかる。

(2) $A = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}$ の固有値は 1 のみで，その固有ベクトルは $c\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ である (ただし c はゼロでない任意定数)。

(3) $A = \begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ の固有値は $3 \pm \sqrt{7}$ で，これらに関する固有ベクトルは $c\begin{pmatrix} \pm\sqrt{7} \\ 1 \end{pmatrix}$ である (複合同順)。ただし，c はゼロでない任意定数とした。

(4) $A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ の固有値は $\pm\mathrm{i}$ で，これらに関する固有ベクトルはそれぞれ $c\begin{pmatrix} \pm\mathrm{i} \\ 1 \end{pmatrix}$ である (複合同順)。ただし，c はゼロでない任意定数とした。

B.4.2　対角化可能性

定義 B.37　対角化可能な行列

n 次正方行列 A が**対角化可能** (diagonalizable) であるとは，

$$W^{-1}AW = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & O \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ O & & & \lambda_n \end{pmatrix} \tag{B.3}$$

となる n 次正則行列 W と数 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ が存在することをいう。このことを，A は**正則行列 W によって対角化される**ということもある。

W を列ベクトル表記して $W = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \ldots, \mathbf{w}_n)$ (ただし $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \ldots, \mathbf{w}_n$ は n 次元列ベクトル) を式 (B.3) の両辺に**左から**掛けると次の関係式が得られる。

$$\underbrace{A(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \ldots, \mathbf{w}_n)}_{\substack{\parallel \\ (A\mathbf{w}_1, A\mathbf{w}_2, \ldots, A\mathbf{w}_n)}} = \underbrace{(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \ldots, \mathbf{w}_n)\begin{pmatrix} \lambda_1 & & & O \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ O & & & \lambda_n \end{pmatrix}}_{\substack{\parallel \\ (\lambda_1\mathbf{w}_1, \lambda_2\mathbf{w}_2, \ldots, \lambda_n\mathbf{w}_n)}}$$

これより次のことがわかる。

Point: 対角化可能性と固有値・固有ベクトルの関係

正則行列 W を列ベクトル表記して $W = (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \ldots, \mathbf{w}_n)$ と書いておくと，

$$W^{-1}AW = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & O \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ O & & & \lambda_n \end{pmatrix} \iff \underbrace{A\mathbf{w}_i = \lambda_i\mathbf{w}_i,\ \ i = 1, 2, \ldots, n}_{\substack{\text{各 } \lambda_i \text{ は } A \text{ の固有値であり，} \\ \mathbf{w}_i \text{ は固有値 } \lambda_i \text{ に関する} \\ A \text{ の固有ベクトルということ。}}}$$

例 B.38　すべての正方行列が対角化可能であるとは限らない!

2 次正方行列 A が対角化可能であれば，適当な 2 次正則行列 W を用いて

$$W^{-1}AW = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

という形になる。特に λ_1, λ_2 は A のすべての固有値なのであった。これらの固有値が等しい，つまり $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ とすると $W^{-1}AW = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \lambda E_2$ となっ

てしまう。そこでこの両辺に**左から** W を，**右から** W^{-1} を掛けると

$$\underbrace{W(W^{-1}AW)W^{-1}}_{=A} = W(\lambda E_2)W^{-1} = \lambda WW^{-1} = \lambda E_2 = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$$

となるので，A は対角行列となってしまう。

逆にいえば，**対角行列でない** A **の固有値がすべて等しいとき，**A **は対角化可能ではない**のである。

問 B.39　**解答** ➲ 付録

行列 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ が対角化可能であるか判定せよ。

命題 B.40　2 次正方行列は，相異なる二つの固有値をもつならば対角化可能。

証明．2 次正方行列 A の相異なる固有値 λ_1，λ_2 ごとに少なくとも 1 個ずつ固有ベクトル $\mathbf{w}_1$，$\mathbf{w}_2$ が取れる。そこで 2 次正方行列 $W = \left(\mathbf{w}_1 \;\vdots\; \mathbf{w}_2 \right)$ を考える。$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ についての連立方程式

$$W\boldsymbol{x} = \mathbf{0} \tag{B.4}$$

が自明な解しかもたないことを示すことができれば，**Point** (➲ p. 7) より $\det W \neq 0$ となり，ゆえに定理 B.16 (➲ p. 6) より W が正則となる。すると **Point** (➲ p. 20) の事情により対角化ができる。
そこで以下では，方程式 (B.4) が自明な解のみをもつことを示す。式 (B.4) の両辺に左から行列 $A - \lambda_1 E_2$ を掛けてみると，

$$\begin{aligned}
\mathbf{0} &= (A - \lambda_1 E_2)W\boldsymbol{x} = (AW - \lambda_1 W)\boldsymbol{x} \\
&= \Big(A\left(\mathbf{w}_1 \;\vdots\; \mathbf{w}_2 \right) - \lambda_1\left(\mathbf{w}_1 \;\vdots\; \mathbf{w}_2 \right)\Big)\boldsymbol{x} \\
&= \Big(\left(A\mathbf{w}_1 \;\vdots\; A\mathbf{w}_2 \right) - \left(\lambda_1\mathbf{w}_1 \;\vdots\; \lambda_1\mathbf{w}_2 \right)\Big)\boldsymbol{x} \\
&= \Big(\left(\lambda_1\mathbf{w}_1 \;\vdots\; \lambda_2\mathbf{w}_2 \right) - \left(\lambda_1\mathbf{w}_1 \;\vdots\; \lambda_1\mathbf{w}_2 \right)\Big)\boldsymbol{x} \\
&= \left(\mathbf{0} \;\vdots\; (\lambda_2 - \lambda_1)\mathbf{w}_2 \right)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = y(\lambda_2 - \lambda_1)\mathbf{w}_2
\end{aligned}$$

となる。$\mathbf{w}_2$ は固有ベクトルであるから零ベクトルではない。ゆえに $y(\lambda_2 - \lambda_1) = 0$ とならなければならないが，仮定より $\lambda_1 \neq \lambda_2$ なので $y = 0$ となる。同様に $A - \lambda_2 E_2$ を式 (B.4) の両辺に左からかけると $x = 0$ が導かれる。
以上から $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \mathbf{0}$ となる。よって，方程式 (B.4) は自明な解しかもたない。

□

同様にして**一般に，正方行列は次数個の相異なる固有値をもてば対角化可能である。**

練習問題 B.41　行列の対角化の練習

次の行列が対角化可能であるか判定し，可能な場合には対角化せよ。

(1) $A=\begin{pmatrix} 5 & -4 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}$　(2) $A=\begin{pmatrix} -1 & 2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}$　(3) $A=\begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$

解答例　(1) $A=\begin{pmatrix} 5 & -4 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}$ の固有値は 1 と 2 であり，$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix} 4 \\ 3 \end{pmatrix}$ はそれぞれの固有値に関する固有ベクトルである (**練習問題 B.36–(1)** ➲ **p. 18**)。特に，A は異なる固有値をもつので，命題 B.40 (➲ **p. 21**) より対角化可能である。実際に対角化すると，次式を得る。

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}^{-1}}_{\substack{\| \\ \frac{1}{-1}\begin{pmatrix} 3 & -4 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}}} \underbrace{\begin{pmatrix} 5 & -4 \\ 3 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}}_{\substack{\| \\ \begin{pmatrix} 1 & 8 \\ 1 & 6 \end{pmatrix}}} = \frac{1}{-1}\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

(2) $A=\begin{pmatrix} -1 & 2 \\ -2 & 3 \end{pmatrix}$ の固有値は 1 のみである。ゆえに対角化できない (**例 B.38** ➲ **p. 20**)。

(3) $A=\begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ の固有値は $3\pm\sqrt{7}$ で，$\begin{pmatrix} \pm\sqrt{7} \\ 1 \end{pmatrix}$ はそれぞれの固有値に関する固有ベクトルである (**練習問題 B.36–(3)** ➲ **p. 18**)。特に，A は異なる固有値をもつので，命題 B.40 より対角化可能である。実際に対角化すると，次を得る。

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \sqrt{7} & -\sqrt{7} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}^{-1}}_{\substack{\| \\ \frac{1}{2\sqrt{7}}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{7} \\ -1 & \sqrt{7} \end{pmatrix}}} \underbrace{\begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{7} & -\sqrt{7} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}_{\substack{\| \\ \begin{pmatrix} 7+3\sqrt{7} & 7-3\sqrt{7} \\ 3+\sqrt{7} & 3-\sqrt{7} \end{pmatrix}}}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\sqrt{7}}\begin{pmatrix} (7+3\sqrt{7})+\sqrt{7}(3+\sqrt{7}) & (7-3\sqrt{7})+\sqrt{7}(3-\sqrt{7}) \\ -(7+3\sqrt{7})+\sqrt{7}(3+\sqrt{7}) & -(7-3\sqrt{7})+\sqrt{7}(3-\sqrt{7}) \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{7}}\begin{pmatrix} 14+6\sqrt{7} & 0 \\ 0 & -14+6\sqrt{7} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{7}}\begin{pmatrix} 7+3\sqrt{7} & 0 \\ 0 & -7+3\sqrt{7} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3+\sqrt{7} & 0 \\ 0 & 3-\sqrt{7} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

B.4.3　実対称行列の対角化

定義 B.42　転置行列・行列の複素共役

(n,m) 行列 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}$ の対角にある成分 $a_{11}, a_{22}, \ldots$ を通る対角線を軸にして成分の位置を反転させてできる (m,n) 行列を A の**転置行列** (transposed matrix) とよび，左下のように $A^\top$ で表す。また A のすべての成分の複素共役を取ってできる行列を，右下のように $\overline{A}$ で表す。

$$A^\top = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{1m} & a_{2m} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad \overline{A} = \begin{pmatrix} \overline{a_{11}} & \overline{a_{12}} & \cdots & \overline{a_{1m}} \\ \overline{a_{21}} & \overline{a_{22}} & \cdots & \overline{a_{2m}} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \overline{a_{n1}} & \overline{a_{n2}} & \cdots & \overline{a_{nm}} \end{pmatrix}$$

例 B.43　転置行列と複素共役の例

(1) $(1,2,3)^\top = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$, $\overline{(1,2,3)} = (\overline{1}, \overline{2}, \overline{3}) = (1,2,3)$

(2) $\begin{pmatrix} 1 & 2+\mathrm{i} & 3 \\ 4 & 5-3\mathrm{i} & 6 \end{pmatrix}^\top = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 2+\mathrm{i} & 5-3\mathrm{i} \\ 3 & 6 \end{pmatrix}$

(3) $\overline{\begin{pmatrix} 1 & 2+\mathrm{i} & 3 \\ 4 & 5-3\mathrm{i} & 6 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 1 & 2-\mathrm{i} & 3 \\ 4 & 5+3\mathrm{i} & 6 \end{pmatrix}$

(4) $\overline{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}^\top} = \overline{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} \overline{a_{11}} & \overline{a_{21}} \\ \overline{a_{12}} & \overline{a_{22}} \end{pmatrix}$

問 B.44　転置行列の成分 (解答 ➔ 付録)

一般に行列 M の第 (i,j) 成分を M_{ij} とかくとき，行列 A に対して

(1) $(A^\top)_{ij} = \boxed{}$, $(\overline{A})_{ij} = \boxed{}$

(2) $(\overline{A^\top})_{ij} = \boxed{}$, $(\overline{A}^\top)_{ij} = \boxed{}$

← $\overline{A^\top}$ は行列 A の転置を取った後に複素共役を取ったもの。一方で $\overline{A}^\top$ は行列 A の複素共役を取った後に転置を取ったもの。

この問 B.44–(2) により，どんな行列 A に対しても $\overline{A^\top} = \overline{A}^\top$ が成り立つことがわかる。次の公式が成り立つことは容易に確かめられる。

公式 B.45 (n,m) 行列 A と (m,l) 行列 B に対して
(1) $(A^\top)^\top = A$, $\quad \overline{(\overline{A})} = A$, $\quad$ (2) $(AB)^\top = B^\top A^\top$, $\quad \overline{AB} = \overline{A}\,\overline{B}$

問 B.46　転置正方行列の行列式 (解答➔付録)

2 次正方行列 A に対して次を示せ。

(1) $\det(A^\top) = \det A$

(2) A が正則ならば $A^\top$ もまた正則であり，$(A^{-1})^\top = (A^\top)^{-1}$

定義 B.47　対称行列・実行列・直交行列

A を n 次正方行列とする。

(i) A が**対称行列** (symmetric matrix) であるとは，$A = A^\top$ が成り立つことをいう。

(ii) A が**実** (real) であるとは，A のすべての成分が実数であることをいう。

(iii) A が**直交行列** (orthogonal matrix) であるとは, A が実であり, かつ $AA^\top = E_n = A^\top A$ が成り立つことをいう。(➔ このとき A は正則かつ $A^{-1} = A^\top$。)

例 B.48　「回転」と「直線に関する折り返し」の効果をもたらす直交行列たち

実数 θ に対して，$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$ は 2 次直交行列となる。実際,

$$\begin{aligned} R(\theta)^\top R(\theta) &= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2\theta + \sin^2\theta & 0 \\ 0 & (-\sin\theta)^2 + \cos^2\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = E_2 \end{aligned}$$

となるからである。座標平面内の点 $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ の極座標表示を $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r\cos\varphi \\ r\sin\varphi \end{pmatrix}$ として，行列 $R(\theta)$ を左から掛けると次が得られる。

$$\begin{aligned} R(\theta)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} r\cos\varphi \\ r\sin\varphi \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} r\{(\cos\theta)(\cos\varphi) - (\sin\theta)(\sin\varphi)\} \\ r\{(\sin\theta)(\cos\varphi) + (\cos\theta)(\sin\varphi)\} \end{pmatrix} \overset{\substack{\text{三角関数の} \\ \text{加法定理}}}{=} \begin{pmatrix} r\cos(\varphi+\theta) \\ r\sin(\varphi+\theta) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

ゆえに $R(\theta)$ は点 $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ を原点中心に**反時計回り**に角度 θ だけ回転させる効果をもたらす。このことからも

$$\begin{aligned} (R(\theta))^{-1} &= (\textbf{「反時計回りに角度 } \theta \textbf{ だけ回転させる効果」の逆の効果をもたらす行列}) \\ &= (\textbf{時計回りに角度 } \theta \textbf{ だけ回転させる}) \\ &= R(-\theta) = \begin{pmatrix} \cos(-\theta) & -\sin(-\theta) \\ \sin(-\theta) & \cos(-\theta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} = R(\theta)^\top \end{aligned}$$

となり，$R(\theta)$ が直交行列であることが納得できるであろう。

一般に $R = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ を 2 次直交行列とすると，条件 $R^{\top}R = E_2$ より関係式 $a^2+c^2 = 1$，$b^2+d^2=1$，$ab+cd=0$ が得られる。$a=\cos\theta$，$b=\sin\eta$ とおくと，三つの関係式から $R = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\eta \\ \pm\sin\theta & \mp\cos\eta \end{pmatrix}$ (復号同順) であり，特に三つ目の関係式より $\eta = \pm\theta + n\pi$ (n は自然数)。$\eta = -\theta+n\pi$ のとき $R = R(\theta)$ または $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} R(\theta)$，$\eta = \theta + n\pi$ のとき $R = R(-\theta)$ または $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} R(-\theta)$。

ゆえに，任意の 2 次直交行列は適当な θ を用いて $R(\theta)$ または $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} R(\theta)$ の形で表される。ここに現れた $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ は明らかに直交行列であるが，これは $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \end{pmatrix}$ の計算から，座標平面上の点 $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ を，x 軸に関して折り返した点 $\begin{pmatrix} x \\ -y \end{pmatrix}$ へ写す効果をもたらす。

問 B.49　解答➔付録

$R_2(\theta) = R(-\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$ とおくとき，$n \geqq 2$ と実数 $\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_{n-1}$ に対して n 次正方行列 R_n を $R_2 = R_2(\theta_1)$，$k \geqq 3$ に対しては帰納的に次式により定める。

$$R_k = \begin{array}{rc} & \begin{array}{cc} \overbrace{\hphantom{R_{k-1}R_{k-1}}}^{(k-1)\text{ 列}} & \overbrace{\hphantom{00}}^{1\text{ 列}} \end{array} \\ \begin{array}{r} (k-1)\text{ 行} \\ 1\text{ 行} \end{array} & \left(\begin{array}{c:c} R_{k-1} & \mathbf{0} \\ \hdashline \mathbf{0} & 1 \end{array}\right) \end{array} \begin{array}{cl} \begin{array}{cc} \overbrace{\hphantom{E_{k-2}E_{k-2}}}^{(k-2)\text{ 列}} & \overbrace{\hphantom{R_2(\theta)}}^{2\text{ 列}} \end{array} & \\ \left(\begin{array}{c:c} E_{k-2} & O \\ \hdashline O & R_2(\theta_{k-1}) \end{array}\right) & \begin{array}{l} (k-2)\text{ 行} \\ 2\text{ 行} \end{array} \end{array}$$

このとき，R_n が n 次直交行列であり，次の形をしていることを示せ。

$$R_n = \left(\begin{array}{c:c:c:c} & & & (\sin\theta_1)(\sin\theta_2)\cdots(\sin\theta_{n-1}) \\ & & & (\cos\theta_1)(\sin\theta_2)\cdots(\sin\theta_{n-1}) \\ & & & (\cos\theta_2)(\sin\theta_3)\cdots(\sin\theta_{n-1}) \\ * & \cdots & * & \vdots \\ & & & (\cos\theta_{n-2})(\sin\theta_{n-1}) \\ & & & \cos\theta_{n-1} \end{array}\right)$$

定義 B.50　内積

二つの n 次元ベクトル $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$ に対して，

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = x_1\overline{y}_1 + x_2\overline{y}_2 + \cdots + x_n\overline{y}_n = (x_1, x_2, \cdots, x_n)\begin{pmatrix} \overline{y_1} \\ \overline{y_2} \\ \vdots \\ \overline{y_n} \end{pmatrix} = \boldsymbol{x}^{\top}\overline{\boldsymbol{y}}$$

で定まる数を $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の**内積** (inner product) という。

以下に内積の基本的な性質をまとめておく。

公式 B.51 (証明 ➔ 付録) n 次元ベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}$，$n$ 次正方行列 A と数 c に対して次が成り立つ。

(1) $\langle A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \langle \boldsymbol{x}, \overline{A}^\top \boldsymbol{y} \rangle$

➔「 , 」の前方/後方のうち，片方の先頭にある行列が邪魔なら，その行列を転置して複素共役をとることでもう片方に押し付けることができる。

(2) $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \overline{\langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{x} \rangle}$

➔ 内積において「 , 」の前方/後方をひっくり返した後で複素共役を取れば，もとの内積に等しい。

(3) $\langle \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \rangle = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{z} \rangle + \langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \rangle$，$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z} \rangle = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle + \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{z} \rangle$

➔「 , 」の前方/後方のどちらかを固定すれば，もう片方の足し算に関してはバラバラにできる。

(4) $\langle c\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = c\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle$，$\langle \boldsymbol{x}, c\boldsymbol{y} \rangle = \overline{c}\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle$

➔「 , 」の前方のスカラー倍はそのまま内積の外に出る。「 , 」の後方のスカラー倍は複素共役を取って内積の外に出る。

(5) $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle \geqq 0$ であり，

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = 0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

➔ 自分自身との内積は非負の実数となる。さらに，それが 0 になることと自分自身が零ベクトル $\boldsymbol{0}$ になることは同値である。

実対称行列について，まず次の性質をおさえておこう。

命題 B.52 任意の n 次実対称行列 A の固有値はすべて実数であり，すべての成分が実数からなる固有ベクトルをもつ。

証明. A が実行列であるから $\overline{A} = A$ であり，さらに A は対称行列でもあるから，次が成立する。

$$\overline{A}^\top = A^\top = A$$

そこで λ を A の固有値，n 次元ベクトル $\boldsymbol{x}$ をその固有ベクトルとすると (特に $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ に注意!) $A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$ であり，この両辺の複素共役をとると (A が実であることに注意して) $A\overline{\boldsymbol{x}} = \overline{\lambda}\overline{\boldsymbol{x}}$ となる。ゆえに，次の式変形ができる。

$$\begin{aligned} \lambda\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle &\overset{\substack{\text{公式 B.51–(4)} \\ (\text{➔ p. 26})}}{=} \langle \lambda\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = \langle A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle \\ &\overset{\substack{\text{公式 B.51–(1)} \\ (\text{➔ p. 26})}}{=} \langle \boldsymbol{x}, \overline{A}^\top \boldsymbol{x} \rangle \\ &\overset{\text{上式}}{=} \langle \boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x} \rangle = \langle \boldsymbol{x}, \lambda\boldsymbol{x} \rangle \overset{\substack{\text{公式 B.51–(4)} \\ (\text{➔ p. 26})}}{=} \overline{\lambda}\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle \end{aligned}$$

これを整理して $(\lambda - \overline{\lambda})\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = 0$ を得る。ここで $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ であるから公式 B.51–(5) (➔ p. 26) より $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle \neq 0$ となる。ゆえに $\lambda = \overline{\lambda}$，つまり λ は実数である。このとき $\mathbf{v} = \boldsymbol{x} + \overline{\boldsymbol{x}}$ は n 次元実列ベクトルであり，さらに λ の固有値ベクトルでもある。 □

n 次正方行列 $A=(A_{ij})_{1\leqq i,j\leqq n}=(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n)$ に対して

$$(A^\top A)_{ij}=\sum_{k=1}^{n}(A^\top)_{ik}A_{kj}=\sum_{k=1}^{n}A_{ki}A_{kj}=\langle\boldsymbol{a}_i,\boldsymbol{a}_j\rangle$$

となることを念頭において直交行列の定義を確認すると，次のことがわかる。

命題 B.53 (**行列の直交性と内積の関係**)

列ベクトル表記された n 次実正方行列 $R=(\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\cdots,\mathbf{u}_n)$ に対して以下は同値。

(1) R は直交行列である。

(2) すべての $i,j=1,2,\cdots,n$ に対して $\langle\mathbf{u}_i,\mathbf{u}_j\rangle=\begin{cases}1 & (i=j\text{ のとき})\\ 0 & (i\neq j\text{ のとき})\end{cases}$

証明. 上の式を $A=R$ に対して適用すれば次が得られる。

$$R^\top R=\begin{pmatrix}\langle\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_1\rangle & \langle\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2\rangle & \cdots & \langle\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_n\rangle\\ \langle\mathbf{u}_2,\mathbf{u}_1\rangle & \langle\mathbf{u}_2,\mathbf{u}_2\rangle & \cdots & \langle\mathbf{u}_2,\mathbf{u}_n\rangle\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle\mathbf{u}_n,\mathbf{u}_1\rangle & \langle\mathbf{u}_n,\mathbf{u}_2\rangle & \cdots & \langle\mathbf{u}_n,\mathbf{u}_n\rangle\end{pmatrix}$$

(1) が成り立つとき，この左辺が n 次単位行列 E_n となるから，問 B.3–(1) (➲ p. 1) より $\langle\mathbf{u}_i,\mathbf{u}_j\rangle=\delta_{ij}$，つまり (2) が従う。逆に (2) が成り立つなら $(R^\top R)_{ij}=\delta_{ij}$，つまり $R^\top R=E_n$ となる。 □

この公式 B.51–(5) (➲ p. 26) の性質から，次の量を定めることができる。

定義 B.54　ベクトルのノルム

n 次元ベクトル $\boldsymbol{x}$ の**ノルム** (norm) を

$$\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle}$$

と定める。

問 B.55　解答 ➲ 付録

(1) 2 次元実列ベクトル $\mathbf{u}$ が $\|\mathbf{u}\|=1$ をみたすとき，実数 θ をうまくとることで $\mathbf{u}=\begin{pmatrix}\sin\theta\\ \cos\theta\end{pmatrix}$ と表現できることを示せ。

(2) $n\geqq 2$ とする。n 次元実列ベクトル $\mathbf{u}$ が $\|\mathbf{u}\|=1$ をみたすとき，$(n-1)$ 個の実数 $\theta_1,\theta_2,\ldots,\theta_{n-1}$ をうまくとることで

$$\mathbf{u}=\begin{pmatrix}(\sin\theta_1)(\sin\theta_2)\cdots(\sin\theta_{n-1})\\ (\cos\theta_1)(\sin\theta_2)\cdots(\sin\theta_{n-1})\\ (\cos\theta_2)(\sin\theta_3)\cdots(\sin\theta_{n-1})\\ \vdots\\ (\cos\theta_{n-2})(\sin\theta_{n-1})\\ \cos\theta_{n-1}\end{pmatrix}$$

と表現できることを示せ。

➔ 問 B.49 (➲ p. 25) と合わせると，$\|\mathbf{u}\|=1$ なる任意の n 次元列ベクトル $\mathbf{u}$ に対して，$R=(*,*,\ldots,\mathbf{u})$ の形の n 次直交行列 R が取れることがわかる!

定理 B.56 (**実対称行列はいつでも適当な直交行列により対角化可能!**) n 次実正方行列 A に対して，以下は同値である。

(1) A は対称行列である。

(2) A は直交行列により対角化できる。つまり，

$$R^\top AR = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & O \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ O & & & \lambda_n \end{pmatrix} \tag{B.5}$$

となるような n 次直交行列 R と実数 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ が存在する。

➔ **つまり実対称行列は対角化可能であり，すべての固有値は実数かつそれらは実ベクトルからなる固有ベクトルをもつ!** (**Point ➲ p. 20**)

これにより，実対称行列について次の解釈が得られる。

実対称行列 ＝ 回転 (＋ 折返)＋ 各成分方向への伸縮 ＋ 逆 (折返 ＋) 回転

行列をベクトル $\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$ に掛ける操作について次のことを次のことを思い出そう。

- ∘ 直交行列を掛ける ➔ $\boldsymbol{y}$ を回転 (＋ 折返) させる効果 (**例 B.48 ➲ p. 24**)
- ∘ 対角行列 $\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$ を掛ける ➔ 各成分方向への伸縮の効果

このとき，式 (B.5) より 2 次実対称行列 A をベクトル $\boldsymbol{x}$ に掛けるという操作は次のように捉えることができる。

$$\underbrace{A\boldsymbol{x}}_{\substack{\text{① 実対称行列 } A \text{ を} \\ \boldsymbol{x} \text{ に掛けることは...}}} = \underbrace{R \overbrace{\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \underbrace{R^\top \boldsymbol{x}}_{\substack{\text{② } \boldsymbol{x} \text{ を直交行列} \\ R^\top \text{ の分だけ} \\ \text{回転させて...}}}}^{\substack{\text{③ ... そうしてできた} \\ \text{ベクトルを各第 } i \text{ 成分方向} \\ \text{に } \lambda_i \text{ 倍だけ伸縮させて...}}}}_{\substack{\text{④ 最後に，手順 ② とは逆の向きに} \\ R = (R^\top)^{-1} \text{ だけ回転させる} \\ \text{ことと同じ効果をもたらす。}}}$$

定理 B.56 の証明 ($n = 2$ **の場合)**. 数 λ を A の固有値とすると，A の実対称性より λ は実数であり，また λ に関する A の固有ベクトル $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ で，a, b は共に実数となるものが取れる (**命題 B.52 ➲ p. 26**)。このとき，$\mathbf{u}/\|\mathbf{u}\|$ を改めて $\mathbf{u}$ とおくことで，あらかじめ $\mathbf{u}$ の成分 a, b は $a^2 + b^2 = 1$ をみたすと仮定してよい。

このとき座標平面内の点 (b, a) の極座標表示 $(b, a) = (\cos\theta, \sin\theta)$ を用いて次の直交行列

$$R = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b & a \\ -a & b \end{pmatrix} \quad \left(= \begin{pmatrix} \mathbf{v} & \mathbf{u} \end{pmatrix} \text{ とおく} \right)$$

を考える ($\mathbf{v} = \begin{pmatrix} b \\ -a \end{pmatrix}$ とおいたということ)。このとき

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u}\|^2 &= \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = a^2 + b^2 = 1, \\ \langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle &= ba + (-a)b = 0, \\ \|\mathbf{v}\|^2 &= \langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle = b^2 + (-a)^2 = 1 \end{aligned} \tag{B.6}$$

が成り立っている。そこで

$$R^\top AR = \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{v} & \mathbf{u} \end{pmatrix}^\top}_{\begin{pmatrix} \mathbf{v}^\top \\ \mathbf{u}^\top \end{pmatrix}} \underbrace{A\begin{pmatrix} \mathbf{v} & \mathbf{u} \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} A\mathbf{v} & A\mathbf{u} \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}^\top A\mathbf{v} & \mathbf{v}^\top A\mathbf{u} \\ \mathbf{u}^\top A\mathbf{v} & \mathbf{u}^\top A\mathbf{u} \end{pmatrix}$$

をさらに計算してみると

$$\begin{aligned} R^\top AR &= \begin{pmatrix} \mathbf{v}^\top A\mathbf{v} & \mathbf{v}^\top A\mathbf{u} \\ \mathbf{u}^\top A\mathbf{v} & \mathbf{u}^\top A\mathbf{u} \end{pmatrix} \overset{\substack{\text{定義 B.14} \\ (\text{p. 25})}}{=} \begin{pmatrix} \langle \mathbf{v}, A\mathbf{v} \rangle & \langle \mathbf{v}, A\mathbf{u} \rangle \\ \langle \mathbf{u}, A\mathbf{v} \rangle & \langle \mathbf{u}, A\mathbf{u} \rangle \end{pmatrix} \\ &\overset{\substack{\text{公式 B.51–(1)} \\ (\text{p. 26})}}{=} \begin{pmatrix} \langle \mathbf{v}, A\mathbf{v} \rangle & \langle \mathbf{v}, A\mathbf{u} \rangle \\ \langle \overline{A}^\top \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle & \langle \mathbf{u}, A\mathbf{u} \rangle \end{pmatrix} \overset{A\text{ の実対称性}}{=} \begin{pmatrix} \langle \mathbf{v}, A\mathbf{v} \rangle & \langle \mathbf{v}, A\mathbf{u} \rangle \\ \langle A\mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle & \langle \mathbf{u}, A\mathbf{u} \rangle \end{pmatrix} \\ &\overset{\substack{A\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u} \\ \text{であるから}}}{=} \begin{pmatrix} \langle \mathbf{v}, A\mathbf{v} \rangle & \langle \mathbf{v}, \lambda\mathbf{u} \rangle \\ \langle \lambda\mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle & \langle \mathbf{u}, \lambda\mathbf{u} \rangle \end{pmatrix} \overset{\substack{\text{公式 B.51–(4)} \\ (\text{p. 26})}}{=} \begin{pmatrix} \langle \mathbf{v}, A\mathbf{v} \rangle & \lambda\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle \\ \lambda\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle & \lambda\|\mathbf{u}\|^2 \end{pmatrix} \overset{\substack{\text{式 (B.6)} \\ (\text{p. 29})}}{=} \begin{pmatrix} \langle \mathbf{v}, A\mathbf{v} \rangle & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \end{aligned}$$

ゆえに A は直交行列 R によって対角化された。 □

定理 B.56 の証明 ($n = 3$ の場合). 3 次実対称行列 A が直交行列で対角化できることを示そう。
数 λ を A の固有値とすると，λ は実数であり (命題 B.52 p. 26)，λ に関する A の固有ベクトル $\mathbf{u} = (a, b, c)^\top$ で，a, b, c は共に実数となるものが取れる (命題 B.52 p. 26)。このとき，$\mathbf{u}/\|\mathbf{u}\|$ を改めて $\mathbf{u}$ とおくことで，あらかじめ $\mathbf{u}$ の成分 a, b, c は $a^2 + b^2 + c^2 = 1$ をみたすと仮定してよい。
次に，以下の形の直交行列 R' を考えよう。

$$\begin{aligned} R' &= \left(\begin{array}{cc:c} \cos\theta_1 & \sin\theta_1 & 0 \\ -\sin\theta_1 & \cos\theta_1 & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c:cc} 1 & 0 & 0 \\ \hdashline 0 & \cos\theta_2 & \sin\theta_2 \\ 0 & -\sin\theta_2 & \cos\theta_2 \end{array}\right) \\ &= \left(\begin{array}{c:c:c} \cos\theta_1 & (\sin\theta_1)(\cos\theta_2) & (\sin\theta_1)(\sin\theta_2) \\ -\sin\theta_1 & (\cos\theta_1)(\cos\theta_2) & (\cos\theta_1)(\sin\theta_2) \\ 0 & -\sin\theta_2 & \cos\theta_2 \end{array}\right) \end{aligned}$$

ここで θ_1, θ_2 の値は関係式

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\sin\theta_1)(\sin\theta_2) \\ (\cos\theta_1)(\sin\theta_2) \\ \cos\theta_2 \end{pmatrix}$$

が成り立つように決めておく。このとき R' の列ベクトル表記を

$$R' = \left(\begin{array}{c:c:c} \cos\theta_1 & (\sin\theta_1)(\cos\theta_2) & (\sin\theta_1)(\sin\theta_2) \\ -\sin\theta_1 & (\cos\theta_1)(\cos\theta_2) & (\cos\theta_1)(\sin\theta_2) \\ 0 & -\sin\theta_2 & \cos\theta_2 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c:c:c} \mathbf{w} & \mathbf{v} & \mathbf{u} \end{array}\right)$$

としておくと，R' が直交行列であることから次が成り立つ。

$$\|\mathbf{w}\|^2 = \|\mathbf{v}\|^2 = \|\mathbf{u}\|^2 = 1, \quad \langle \mathbf{w}, \mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{v}, \mathbf{u}\rangle = \langle \mathbf{u}, \mathbf{w}\rangle = 0$$

このとき $R'^{\top}AR'$ を計算してみると

$$\begin{aligned}
R'^{\top}AR' &= \left(\begin{array}{c:c:c} \mathbf{w} & \mathbf{v} & \mathbf{u} \end{array}\right)^{\top} A \left(\begin{array}{c:c:c} \mathbf{w} & \mathbf{v} & \mathbf{u} \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c} \mathbf{w}^{\top} \\ \hdashline \mathbf{v}^{\top} \\ \hdashline \mathbf{u}^{\top} \end{array}\right) \left(\begin{array}{c:c:c} A\mathbf{w} & A\mathbf{v} & A\mathbf{u} \end{array}\right) \\
&= \begin{pmatrix} \langle \mathbf{w}, A\mathbf{w}\rangle & \langle \mathbf{w}, A\mathbf{v}\rangle & \langle \mathbf{w}, A\mathbf{u}\rangle \\ \langle \mathbf{v}, A\mathbf{w}\rangle & \langle \mathbf{v}, A\mathbf{v}\rangle & \langle \mathbf{v}, A\mathbf{u}\rangle \\ \langle \mathbf{u}, A\mathbf{w}\rangle & \langle \mathbf{u}, A\mathbf{v}\rangle & \langle \mathbf{u}, A\mathbf{u}\rangle \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc:c} \langle \mathbf{w}, A\mathbf{w}\rangle & \langle \mathbf{w}, A\mathbf{v}\rangle & 0 \\ \langle \mathbf{w}, A\mathbf{v}\rangle & \langle \mathbf{v}, A\mathbf{v}\rangle & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & \lambda \end{array}\right)
\end{aligned}$$

となる。そこで，この左上のブロックを

$$B = \begin{pmatrix} \langle \mathbf{w}, A\mathbf{w}\rangle & \langle \mathbf{w}, A\mathbf{v}\rangle \\ \langle \mathbf{w}, A\mathbf{v}\rangle & \langle \mathbf{v}, A\mathbf{v}\rangle \end{pmatrix}$$

とおくと，これは 2 次の実対称行列であり，2 次の実対称行列が直交行列により対角化されることは前に示したから，適当な 2 次直交行列 Q を用いて次式が成り立つ。

$$Q^{\top}BQ = \begin{pmatrix} \nu & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix}, \quad \text{つまり} \quad B = Q\begin{pmatrix} \nu & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix}Q^{\top}$$

このとき，

$$\begin{aligned}
R'^{\top}AR' &= \left(\begin{array}{cc:c} \multicolumn{2}{c:}{B} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hdashline 0 & 0 & \lambda \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c:c} Q\begin{pmatrix} \nu & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix}Q^{\top} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hdashline 0 \quad 0 & \lambda \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{cc:c} \multicolumn{2}{c:}{Q} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hdashline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc:c} \nu & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & \lambda \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc:c} \multicolumn{2}{c:}{Q^{\top}} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hdashline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{cc:c} \multicolumn{2}{c:}{Q} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hdashline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc:c} \nu & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & \lambda \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc:c} \multicolumn{2}{c:}{Q} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hdashline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)^{\top}
\end{aligned}$$

であるから，次が成り立つ。

$$\left(\begin{array}{cc:c} \multicolumn{2}{c:}{Q} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hdashline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)^{\top} R'^{\top}AR' \left(\begin{array}{cc:c} \multicolumn{2}{c:}{Q} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hdashline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cc:c} \nu & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & \lambda \end{array}\right)$$

そこで R を，$R = R'\left(\begin{array}{cc:c} \multicolumn{2}{c:}{Q} & \begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix} \\ \hdashline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ により定めると，

$$R^{\top}AR = \begin{pmatrix} \nu & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix}$$

が成り立ち，さらに次の計算により R は直交行列であることが確認できる。

$$
\begin{aligned}
R^\top R &= \left(R'\left(\begin{array}{cc|c} \multicolumn{2}{c|}{\multirow{2}{*}{Q}} & 0 \\ & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)\right)^\top R'\left(\begin{array}{cc|c} \multicolumn{2}{c|}{\multirow{2}{*}{Q}} & 0 \\ & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \\
&\overset{\substack{\text{公式 B.45–(2)} \\ (\text{➔p. 24})}}{=} \left(\begin{array}{cc|c} \multicolumn{2}{c|}{\multirow{2}{*}{Q}} & 0 \\ & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)^\top \underbrace{R'^\top R'}_{=E_3}\left(\begin{array}{cc|c} \multicolumn{2}{c|}{\multirow{2}{*}{Q}} & 0 \\ & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{cc|c} \multicolumn{2}{c|}{\multirow{2}{*}{$Q^\top$}} & 0 \\ & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)\left(\begin{array}{cc|c} \multicolumn{2}{c|}{\multirow{2}{*}{Q}} & 0 \\ & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cc|c} \multicolumn{2}{c|}{\multirow{2}{*}{$Q^\top Q$}} & 0 \\ & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \overset{\substack{Q\text{ が直交行列} \\ \text{であるから}}}{=} \left(\begin{array}{cc|c} \multicolumn{2}{c|}{\multirow{2}{*}{E_2}} & 0 \\ & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right) = E_3
\end{aligned}
$$

以上から，3 次実対称行列 A が直交行列 R により対角化された。

□

一般の n の場合にも，上に現れた R' を問 B.49 (➔**p. 25**) における，$\theta_{n-1} = 0$ の場合の R_n に置き換えて数学的帰納法を用いることにより示すことができる。

練習問題 B.57　実対称行列を直交行列で対角化する練習

実対称行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ を直交行列で対角化せよ。

解答例　計算すると，$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ の固有値は -1 と 3 で，$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ はそれぞれの固有値に関する固有ベクトルであることがわかる。これらの固有ベクトルについて，

$$
\left\| \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\|^2 = (-1)^2 + 1^2 = 2,
$$
$$
\left\| \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\|^2 = 1^2 + 1^2 = 2
$$

となっている。これらの平方根で自身を割ったベクトルを並べてできる行列

$\begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ は，次の関係式が成り立つことから，直交行列であることが確認できる。

$$\begin{aligned}
&\begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{-1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{-1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

また

$$\begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

であることが確かめられる。

以上から，$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ が直交行列 $\begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ により対角化された。

問 B.58　中心化行列 Q(解答 ➔ 付録)

自然数 n に対して n 次正方行列 Q を $Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} \end{pmatrix}$ (すべての成分が $\frac{1}{n}$) により定める。n 次の零行列と単位行列をそれぞれ O_n と E_n により表す。

(1) 行列 Q は固有値 1 をもち，かつ rank $Q = 1$ であることを示せ。

(2) ある n 次直交行列 R で $R^\top QR = \begin{pmatrix} O_{n-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & 1 \end{pmatrix}$ となることを示せ。

(3) 前問 (2) の記号の下で $R^\top (E_n - Q)R = \begin{pmatrix} E_{n-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & 0 \end{pmatrix}$ を確かめよ。

定義 B.59　正定値行列

n 次の実正方行列 A が**正定値** (positive-definite) であるとは，A が対称であり，かつ零ベクトルでないすべての n 次元実ベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して $\langle \boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x} \rangle > 0$ が成り立つことをいう。また最後の不等式を $\langle \boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x} \rangle \geqq 0$ に置き換えた条件が成り立つとき，A は**非負定値** (nonnegative-definite) であるという。

定理 B.60　n 次非負定値行列 A のすべての固有値は非負である。つまり，

$$R^\top AR = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & O \\ & & \ddots & \\ O & & & \lambda_n \end{pmatrix} \tag{B.7}$$

なる n 次直交行列 R と，$\lambda_1 \geqq \lambda_2 \geqq \cdots \geqq \lambda_n \geqq 0$ なる実数 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ が存在する。さらに，A が正定値ならば $\lambda_n > 0$ である。

➔ $n = 2$ のとき，公式 **B.12** (➔**p. 4**) と $R^\top R = E_2$ より，式 **(B.7)** において行列式をとれば $\det A = \lambda_1\lambda_2 > 0$，ゆえに正定値行列は正則である。(**定理 B.16**➔**p. 6**)

定理 B.60 の証明．正定値行列 A は定義により実対称なので，定理 B.56 より適当な直交行列 $R' = (\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_2)$ を用いて，次のように対角化できるのであった。

$$R'^\top AR' = \begin{pmatrix} \lambda'_1 & & & \\ & \lambda'_2 & & O \\ & & \ddots & \\ O & & & \lambda'_n \end{pmatrix}$$

各 $i = 1, 2, \ldots, n$ について $A\mathbf{u}'_i = \lambda'_i\mathbf{u}'_i$ が成り立つ (**Point**➔**p. 20**) が，A の非負定値性より $0 \leqq \langle \mathbf{u}'_i, A\mathbf{u}'_i \rangle = \langle \mathbf{u}'_i, \lambda'_i\mathbf{u}'_i \rangle = \lambda'_i\langle \mathbf{u}'_i, \mathbf{u}'_i \rangle = \lambda'_i\|\mathbf{u}'_i\|^2 = \lambda'_i$ である。ゆえに $\lambda'_i \geqq 0$ である (A が正定値の場合は $\lambda_i > 0$ と結論できる)。最後に $\lambda'_1, \lambda'_2, \ldots, \lambda'_n$ を大きい順に並べ替えて $\lambda_1 \geqq \lambda_2 \geqq \cdots \geqq \lambda_n$ と表し，この並べ替えに合わせて $\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_2, \ldots, \mathbf{u}'_n$ を並べ替えたものを $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ と表すと，$R = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n)$ (命題 B.53➔p. 27 の観点から，これは直交行列である) が式 (B.7) を与える。　□

B.4.4　特異値分解

定理 B.61　階数 r の実 (m, n) 行列 A に対して，次をみたす m 次直交行列 Q と n 次直交行列 R が存在する。

$$Q^\top AR = \begin{array}{r c} & \overbrace{\hphantom{\sigma_1 \quad \sigma_2 \quad \ddots \quad \sigma_r}}^{r\ \text{列}} \ \overbrace{\hphantom{O}}^{(n-r)\ \text{列}} \\ \begin{array}{r} r\ \text{行} \left\{ \vphantom{\begin{array}{c} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \ddots \\ \sigma_r \end{array}} \right. \\ (m-r)\ \text{行} \left\{ \vphantom{O} \right. \end{array} & \left(\begin{array}{cccc:c} \sigma_1 & & & & \\ & \sigma_2 & & & O \\ & & \ddots & & \\ & & & \sigma_r & \\ \hdashline & & O & & O \end{array} \right) \end{array}$$

ただし，$\sigma_1 \geqq \sigma_2 \geqq \cdots \geqq \sigma_r > 0$ である。

上式，またはこれを A について解いた式を A の**特異値分解**という。

行に対する基本変形操作に加えて，列に対しても同様の操作を行う列基本変形を考えることに

より，任意の (m,n) 行列 A について次が成り立つことがわかる。

$$\operatorname{rank} A = r \iff \begin{array}{c} \text{次式をみたす } m \text{ 次正則行列 } Q_1 \text{ と } n \text{ 次正則行列 } Q_2 \text{ が存在する。} \\ Q_1 A Q_2 = \left(\begin{array}{c:c} E_r & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right) \end{array}$$

特に，$\operatorname{rank} A = \operatorname{rank} A^\top$ が成り立つ。これを用いて上の証明を与えよう。

定理 B.61 の証明. $A^\top A$ は実対称行列である。実際，実行列であることは明らかであり，$(A^\top A)^\top = A^\top (A^\top)^\top = A^\top A$ となるからである。さらに，すべての n 次元実ベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して，

$$\langle A^\top A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}\rangle = \langle A\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}\rangle = \|A\boldsymbol{x}\|^2 \geqq 0$$

が成り立つから，$A^\top A$ は非負定値の実対称行列である。同様にして，$AA^\top$ もまた非負定値の実対称行列であることがわかる。

ここで，n 次元実ベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \Leftrightarrow A^\top A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ であることに注意しよう。実際，$\Rightarrow$ は明らかであり，逆に $A^\top A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ を仮定すると，

$$\|A\boldsymbol{x}\|^2 = \langle A\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}\rangle = \langle A^\top A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}\rangle = \langle \boldsymbol{0}, \boldsymbol{x}\rangle = 0,$$

ゆえに $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ が成り立つからである。このことから，

$$\begin{aligned} & n - \operatorname{rank}(A^\top A) \\ & = (\text{方程式 } A^\top A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \text{ のすべての解を表すのに必要な任意パラメータの個数}) \\ & = (\text{方程式 } A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \text{ のすべての解を表すのに必要な任意パラメータの個数}) \\ & = n - \operatorname{rank} A \end{aligned}$$

であり，よって $\operatorname{rank}(A^\top A) = \operatorname{rank} A = r$ が成り立つ。

以上から，適当な n 次直交行列 R を用いて $A^\top A$ は次のように対角化されることがわかる。

$$R^\top A^\top AR = \begin{array}{r l} & \begin{array}{cc} \overbrace{\hphantom{\lambda_1 \quad \lambda_2 \quad \ddots \quad \lambda_r}}^{r\text{ 列}} & \overbrace{\hphantom{O}}^{(n-r)\text{ 列}} \end{array} \\ \begin{array}{r} r\text{ 行}\left\{\vphantom{\begin{matrix}1\\1\\1\\1\end{matrix}}\right. \\ (n-r)\text{ 行}\left\{\vphantom{1}\right. \end{array} & \left(\begin{array}{cccc:c} \lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \ddots & & O \\ & & & \lambda_r & \\ \hdashline & & O & & O \end{array}\right) \end{array}$$

この右辺の左上のブロックに現れた対角行列に関連して，次のようにおく。

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & O \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ O & & & \lambda_r \end{pmatrix}, \quad \sqrt{D} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & O \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ O & & & \sigma_r \end{pmatrix}, \quad \sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$$

一方で，左辺に現れた AR に関して，次のようなブロック分割をしておく (実は，$(AR)^\top(AR) =$

$R^\top A^\top AR$ の右下のブロックが O であることから，右側の $*$ は零行列となる)。

$$AR = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} \overbrace{\hspace{6em}}^{r\text{ 列}} & \overbrace{\hspace{6em}}^{(n-r)\text{ 列}} \end{array} \\ m\text{ 行}\left\{\right. & \left(\begin{array}{c:c} \quad Q_1\sqrt{D} \quad & \quad * \quad \end{array}\right) \end{array}$$

本証明の 2 段落目と同様の議論を繰り返して，$\mathrm{rank}(AA^\top) = \mathrm{rank}\, A^\top = \mathrm{rank}\, A = r$ を得る。ゆえに，実対称行列 $AA^\top$ は適当な m 次直交行列 R' を用いて次の形に対角化されることがわかる。

$$R'^\top AA^\top R' = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} \overbrace{\hspace{3em}}^{r\text{ 列}} & \overbrace{\hspace{3em}}^{(m-r)\text{ 列}} \end{array} \\ \begin{array}{r} r\text{ 行}\left\{\right. \\ (m-r)\text{ 行}\left\{\right. \end{array} & \left(\begin{array}{c:c} * & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right) \end{array}$$

ここに現れた m 次直交行列 R' を次のようにブロック分割しておく。

$$R' = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} \overbrace{\hspace{5em}}^{r\text{ 列}} & \overbrace{\hspace{5em}}^{(m-r)\text{ 列}} \end{array} \\ m\text{ 行}\left\{\right. & \left(\begin{array}{c:c} \quad * \quad & \quad Q_2 \quad \end{array}\right) \end{array}$$

このとき，$(A^\top R')^\top (A^\top R') = R'^\top AA^\top R'$ の右下のブロックが O であることから，$A^\top Q_2 = O$ となることがわかる。
いま，m 次正方行列 Q を

$$Q = \begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} \overbrace{\hspace{5em}}^{r\text{ 列}} & \overbrace{\hspace{5em}}^{(m-r)\text{ 列}} \end{array} \\ m\text{ 行}\left\{\right. & \left(\begin{array}{c:c} \quad Q_1 \quad & \quad Q_2 \quad \end{array}\right) \end{array}$$

により定めると，Q は m 次直交行列である。実際，

$$Q^\top Q = \left(\begin{array}{c:c} Q_1 & Q_2 \end{array}\right)^\top \left(\begin{array}{c:c} Q_1 & Q_2 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} Q_1^\top \\ \hdashline Q_2^\top \end{array}\right)\left(\begin{array}{c:c} Q_1 & Q_2 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c:c} Q_1^\top Q_1 & Q_1^\top Q_2 \\ \hdashline Q_2^\top Q_1 & Q_2^\top Q_2 \end{array}\right)$$

であるが，ここで R の列ベクトル表示を $R = (\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_r, \ldots, \mathbf{v}_n)$ としておくと，

$$Q_1 = (\sigma_1^{-1} A\boldsymbol{x}_1, \sigma_2^{-1} A\boldsymbol{x}_2, \ldots, \sigma_r^{-1} A\boldsymbol{x}_r)$$

と表される。一方で，$Q_2 = (\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_{m-r})$ と表しておくと，$Q_1^\top Q_2$ の第 (i,j) 成分は

$$(Q_1^\top Q_2)_{i,j} = (\sigma_i^{-1} A\boldsymbol{x}_i)^\top \boldsymbol{y}_j = \langle \sigma_i^{-1} A\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{y}_j \rangle = \sigma_i^{-1} \langle \boldsymbol{x}_i, A^\top \boldsymbol{y}_j \rangle = \sigma_i^{-1} \langle \boldsymbol{x}_i, \mathbf{0} \rangle = 0,$$

ゆえに $Q_1^\top Q_2 = O$ である。この転置行列をとれば $Q_2^\top Q_1 = O$ であることもわかる。また $R' = \left(\begin{array}{c:c} * & Q_2 \end{array}\right)$ は直交行列であるから，$Q_2^\top Q_2 = E_{m-r}$ である。以上を合わせて，次の計算により Q が

直交行列であることが確かめられる。

$$
\begin{aligned}
Q^\top Q &= \left(\begin{array}{c|c} Q_1^\top Q_1 & O \\ \hline O & E_{m-r} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} Q_1^\top Q_1 & O \\ \hline O & O \end{array}\right) + \left(\begin{array}{c|c} O & O \\ \hline O & E_{m-r} \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c|c} \sqrt{D}^{-1}(Q_1\sqrt{D})^\top Q_1\sqrt{D}\sqrt{D}^{-1} & O \\ \hline O & O \end{array}\right) + \left(\begin{array}{c|c} O & O \\ \hline O & E_{m-r} \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c|c} \sqrt{D}^{-1} & O \\ \hline O & O \end{array}\right) \underbrace{\left(\begin{array}{c} (Q_1\sqrt{D})^\top \\ \hline O \end{array}\right)}_{=(AR)^\top} \underbrace{\left(\begin{array}{c|c} Q_1\sqrt{D} & O \end{array}\right)}_{=AR} \left(\begin{array}{c|c} \sqrt{D}^{-1} & O \\ \hline O & O \end{array}\right) + \left(\begin{array}{c|c} O & O \\ \hline O & E_{m-r} \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c|c} \sqrt{D}^{-1} & O \\ \hline O & O \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} D & O \\ \hline O & O \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} \sqrt{D}^{-1} & O \\ \hline O & O \end{array}\right) + \left(\begin{array}{c|c} O & O \\ \hline O & E_{m-r} \end{array}\right) \\
&= \left(\begin{array}{c|c} E_r & O \\ \hline O & O \end{array}\right) + \left(\begin{array}{c|c} O & O \\ \hline O & E_{m-r} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} E_r & O \\ \hline O & E_{m-r} \end{array}\right) = E_m
\end{aligned}
$$

上で示したように，$Q_2^\top Q_1 = O$ に注意すると，次の計算もまた同様にして確かめられる。

$$
\begin{aligned}
Q^\top AR &= \left(\begin{array}{c} Q_1^\top \\ \hline Q_2^\top \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} Q_1\sqrt{D} & O \end{array}\right) \overset{Q_2^\top Q_1 = O\ \text{より}}{=} \left(\begin{array}{c|c} Q_1^\top Q_1\sqrt{D} & O \\ \hline O & O \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} Q_1^\top Q_1 & O \\ \hline O & O \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} \sqrt{D} & O \\ \hline O & O \end{array}\right) \\
&\overset{\text{上の計算より}}{=} \left\{ \underbrace{Q^\top Q}_{=E_m} - \left(\begin{array}{c|c} O & O \\ \hline O & E_{m-r} \end{array}\right) \right\} \left(\begin{array}{c|c} \sqrt{D} & O \\ \hline O & O \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} E_r & O \\ \hline O & O \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|c} \sqrt{D} & O \\ \hline O & O \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} \sqrt{D} & O \\ \hline O & O \end{array}\right)
\end{aligned}
$$

□

連立方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の最小二乗解

実 (m, n) 行列 A と m 次元実ベクトル $\boldsymbol{b}$ に対して，方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ が常に解をもつとは限らない (**練習問題 B.33–(4) ➲ p. 15**)。そこで，$A\hat{\boldsymbol{x}}$ と $\boldsymbol{b}$ が可能な限り近くなるような n 次元実ベクトル $\hat{\boldsymbol{x}}$ を得る方法を考えよう。例えば，$\|A\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}\|^2 = \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} \|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2$ をみたすような $\hat{\boldsymbol{x}}$ を得ることを考えるのである。

命題 B.62　実 (m, n) 行列 A と m 次元実ベクトル $\boldsymbol{b}$ が与えられたとき，n 次元実ベクトル $\hat{\boldsymbol{x}}$ について以下は同値である。

(i) $\|A\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}\|^2 = \min_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n} \|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2$

(ii) $A^\top A\hat{\boldsymbol{x}} = A\boldsymbol{b}$

さらに，このいずれか (したがって両方) をみたす n 次元実ベクトル $\hat{\boldsymbol{x}}$ は存在する。

上の $\hat{\boldsymbol{x}}$ を，方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の**最小二乗解**という。$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解はいつでも存在するとは限らないが，最小二乗解の意味では必ず存在するのである。また (ii) の式を **$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の正規方程式**とよぶ。

命題 B.62 の証明. A の特異値分解が次のように与えられたとする。

$$A = Q\left(\begin{array}{c:c} \sqrt{D} & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right)R^\top, \quad \sqrt{D} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & O \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ O & & & \sigma_r \end{pmatrix}$$

このとき，$A^\top A = R\left(\begin{array}{c:c} D & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right)R^\top$ である。n 次元実ベクトル $\boldsymbol{x}$ を任意とすると，

$$\|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2 = \|Q\left(\begin{array}{c:c} \sqrt{D} & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right)R^\top \boldsymbol{x} - QQ^\top \boldsymbol{b}\|^2 \overset{\substack{Q\text{ が直交}\\ \text{行列より}}}{=} \|\left(\begin{array}{c:c} \sqrt{D} & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right)\underbrace{R^\top \boldsymbol{x}}_{\substack{=\boldsymbol{y}\\ \text{とおく。}}} - \underbrace{Q^\top \boldsymbol{b}}_{\substack{=\boldsymbol{c}\\ \text{とおく。}}}\|^2$$

そこで $\boldsymbol{y} = (y_1, \ldots, y_r, \ldots, y_n)^\top$，$\boldsymbol{c} = (c_1, \ldots, c_r, \ldots, c_m)^\top$ と表すと，

$$\|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2 = \|\left(\begin{array}{c:c} \sqrt{D} & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right)\boldsymbol{y} - \boldsymbol{c}\|^2 = \sum_{i=1}^{r}(\sigma_i y_i - c_i)^2 + \sum_{i=r+1}^{m}(c_i)^2$$

であるからこの量には最小値が存在し，最小性の必要十分条件は次で与えられる。

$$y_i = \sigma_i^{-1} c_i, \quad 1 \leqq i \leqq r \tag{B.8}$$

一方で，$y_{r+1}, \ldots, y_n$ に制限はなく，任意の実数でよい。この条件 (B.8) は次のように変形できる。

$$\begin{aligned} \text{(B.8)} &\iff \sigma_i^2 y_i = \sigma_i c_i, \quad 1 \leqq i \leqq r \\ &\iff \left(\begin{array}{c:c} D & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right)\underbrace{\boldsymbol{y}}_{= R^\top \hat{\boldsymbol{x}}} = \left(\begin{array}{c:c} \sqrt{D} & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right)\underbrace{\boldsymbol{c}}_{= Q^\top \boldsymbol{b}} \\ &\overset{\substack{R\text{ は正則}\\ \text{行列より}}}{\iff} \underbrace{R\left(\begin{array}{c:c} D & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right)R^\top}_{= A^\top A}\hat{\boldsymbol{x}} = \underbrace{R\left(\begin{array}{c:c} \sqrt{D} & O \\ \hdashline O & O \end{array}\right)Q^\top}_{= A^\top}\boldsymbol{b} \iff A^\top A\hat{\boldsymbol{x}} = A^\top \boldsymbol{b} \end{aligned}$$

□

証明に現れた条件 (B.8) に戻ると，最小二乗解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ は次式により与えられることがわかる。

$$\hat{\boldsymbol{x}} = R\boldsymbol{y} = R\begin{pmatrix} \sigma_1^{-1}c_1 \\ \sigma_2^{-1}c_2 \\ \vdots \\ \sigma_r^{-1}c_r \\ \hdashline * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix} = R\left(\begin{array}{c:c} \sqrt{D}^{-1} & O \\ \hdashline O & E_{n-r} \end{array}\right)\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_r \\ \hdashline * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix}$$

$r < n$ の場合には右辺の「$*$」には合計 $(n-r)$ 個の任意の実数が縦に並び，$\hat{\boldsymbol{x}}$ は無数に存在

する。$r=n$ の場合には「$*$」の部分は現れず，次式により $\hat{\boldsymbol{x}}$ はただ一つに定まる。

$$\hat{\boldsymbol{x}} = R\sqrt{D}^{-1}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_r \end{pmatrix} = R\sqrt{D}^{-1}\left(\begin{array}{c:c} E_r & O \end{array} \right)\boldsymbol{c} = R\left(\begin{array}{c:c} \sqrt{D}^{-1} & O \end{array} \right)Q^\top \boldsymbol{b}$$

いまの $r=n$ の場合には，A の特異値分解は $A = Q\left(\begin{array}{c} \sqrt{D} \\ \hdashline O \end{array} \right)R^\top$ により与えられているが，上式に現れた $R\left(\begin{array}{c:c} \sqrt{D}^{-1} & O \end{array} \right)Q^\top$ は，A の「逆行列もどき」の役割を持つことがわかる。

例 B.63　最小二乗解としての回帰直線

2 次元データ $(x_i, y_i),\ i=1,2,\dots,n$ に対して，$x=(x_1,x_2,\dots,x_n)$, $y=(y_1,y_2,\dots,y_n)$ とおく。これに付随する回帰直線の方程式 $\widehat{Y} = \hat{a}X + \hat{b}$ は，$L_2(a,b) = \dfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))^2$ を最小化するような $a=\hat{a}$，$b=\hat{b}$ を選んだのであった (2.2.2 項➲p. 23)。ここで，

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i-(ax_i+b))^2 = \left\| \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \right\|^2$$

と書き直せることに注意すると，これを最小化する a，b は対応する次の正規方程式を解くことで求められることがわかる。

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

両辺を n で割って，係数行列を少し計算すると，次のようになる。

$$\begin{pmatrix} v_x + (\overline{x})^2 & \overline{x} \\ \overline{x} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{x,y} + \overline{x}\,\overline{y} \\ \overline{y} \end{pmatrix}$$

x の分散 v_x が 0 でないとき，この係数行列が正則となり，これを解くと，次のようにしてやはり回帰直線の傾きと切片が得られる (公式 2.16➲p. 24)。

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b} \end{pmatrix} &= \frac{1}{v_x}\begin{pmatrix} 1 & -\overline{x} \\ -\overline{x} & v_x + (\overline{x})^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} s_{x,y} + \overline{x}\,\overline{y} \\ \overline{y} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{v_x}\begin{pmatrix} s_{x,y} \\ \overline{y}\cdot v_x - \overline{x}\cdot s_{x,y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{s_{x,y}}{v_x} \\ \overline{y} - \dfrac{s_{x,y}}{v_x}\overline{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \overline{y} - \hat{a}\,\overline{x} \end{pmatrix} \end{aligned}$$