対称行列の正定値性

実数を要素とする n 次の正方行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ が条件

$$A^\top = A$$

を満たすとき，A は対称行列であるという．対称行列 A が条件

$$\mathbf{0} \text{ でない任意のベクトル } \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \text{ に対して } \boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x} > 0 \tag{1}$$

を満たすとき，A は正定値であるという．ここで，$\boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x}$ のことを A の 2 次形式という．

A が正定値であるとき，$A \succ 0$ と書く．以下の四つの条件は互いに等価である：

(a) $A \succ 0$（つまり，条件 (1) が成り立つ）．

(b) A の固有値はすべて正である．

(c) ある直交行列 Q と対角要素がすべて正の対角行列 D を用いて，$A = QDQ^\top$ と書ける．

(d) ある正則行列 S を用いて，$A = SS^\top$ と書ける．

ここで，実正方行列 A に対して，スカラー λ および $\mathbf{0}$ でないベクトル $\boldsymbol{x}$ が存在して条件

$$A\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}$$

が成り立つとき，λ を A の固有値とよぶ（$\boldsymbol{x}$ は λ に対応する固有ベクトルとよばれる）．A が n 次の対称行列であれば，その固有値は実数であり，固有ベクトルは実ベクトルであり，互いに 1 次独立な固有ベクトルが n 本存在する．次に，直交行列とは，実正方行列 Q で条件

$$Q^\top Q = I$$

（I は単位行列）を満たすもののことである．また，正方行列 S が正則であるとは，S の逆行列が存在することである．なお，S が正則であることは，条件 $\det S \neq 0$（つまり，0 が S の固有値ではないこと）と等価である．$A \succ 0$ であれば，A は正則である．

対称行列 A が条件

$$\text{任意のベクトル } \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \text{ に対して } \boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x} \geq 0 \tag{2}$$

を満たすとき，A は半正定値であるという．A が半正定値であるとき，$A \succeq 0$ と書く．以下の四つの条件は互いに等価である：

(A) $A \succeq 0$（つまり，条件 (2) が成り立つ）．

(B) A の固有値はすべて非負である．

(C) ある直交行列 Q と対角要素がすべて非負の対角行列 D を用いて，$A = QDQ^\top$ と書ける．

(D) ある正方行列 S を用いて，$A = SS^\top$ と書ける．

定義より，正定値行列は半正定値でもある．

☆以下は，期末試験の範囲外☆

条件 (a), (b), (c) が互いに等価であることを説明する．n 次の対称行列 A は，対角化により，ある直交行列 Q と対角行列 D を用いて

$$A = QDQ^\top$$

と書ける．ここで，D および Q を

$$D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}, \quad Q = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_n \end{array} \right]$$

と表すと，$\lambda_i \in \mathbb{R}$ は A の固有値であり $\boldsymbol{q}_i \in \mathbb{R}^n$ はそれに対応する固有ベクトルである．A の 2 次形式は，$\boldsymbol{y} = Q^\top \boldsymbol{x}$ とおくことで

$$\boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^\top (QDQ^\top) \boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}^\top D \boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i^2$$

と表せる．Q は直交行列なので，$\boldsymbol{x}$ が $\boldsymbol{0}$ でない任意のベクトルを動くときに $\boldsymbol{y}$ も $\boldsymbol{0}$ でない任意のベクトルを動く．したがって，A が正定値であることと $\lambda_i > 0$ $(i = 1, \ldots, n)$ とは等価である．

次に，“(c) $\Rightarrow$ (d)” を示すには,

$$S = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \sqrt{\lambda_1}\boldsymbol{q}_1 & \sqrt{\lambda_2}\boldsymbol{q}_2 & \cdots & \sqrt{\lambda_n}\boldsymbol{q}_n \end{array} \right]$$

とおけばよい．一方，(d) を仮定すると，A の 2 次形式は $\boldsymbol{x}^\top A \boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}^\top S)(S^\top \boldsymbol{x}) = \|S^\top \boldsymbol{x}\|^2$ と表せる．S が正則であることから，$\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ ならば $S^\top \boldsymbol{x} \neq 0$ が成り立つので，“(d) $\Rightarrow$ (a)” が得られる．

最後に，$A \succ 0$ ならば,

$$A^{-1} = Q \begin{bmatrix} 1/\lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1/\lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1/\lambda_n \end{bmatrix} Q^\top$$

である（積 AA^{-1} を計算してみればすぐに確認できる）．つまり，$A \succ 0$ ならば A は正則である．

（以上）