担当教員：久本 智之　研究室：A343　E-mail:hisamoto@math.nagoya-u.ac.jp

# 正規直交基底・実対称行列

実施日：January 17, 2017

数ベクトル空間 $\mathbb{R}^n$ には内積

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y} = x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots x_ny_n$$

が備わっていた。内積の観点から見て優れた基底とは何だろうか。

## 正規直交基底

**定義 1.** $\mathbb{R}^n$ の基底 $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n$ で

$$\langle \boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j \rangle = \begin{cases} 1 & (i = j \text{ のとき}) \\ 0 & (i \neq j \text{ のとき}) \end{cases}$$

を満たすものを、$\mathbb{R}^n$ の正規直交基底と呼ぶ。

例えば、$\mathbb{R}^n$ の標準基底

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \boldsymbol{e}_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

は正規直交基底である。

**問題 1.**

(1) $\mathbb{R}^2$ の基底

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

は正規直交基底であることを確かめよ。2 つのベクトルを平面内に図示せよ。

(2) $\mathbb{R}^2$ の正規直交基底 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$ は (必要なら $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$ の順序を入れ替えて)

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \end{pmatrix}$$

と書けることを示せ。

**問題 2.** 数ベクトル $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n \in \mathbb{R}^n$ を横に並べてできる $n$ 次正方行列を $P$ と書く。このとき、次は同値であることを示せ。

(1) $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n$ は $\mathbb{R}^n$ の正規直交基底を成す。

(2) ${}^tPP = E$ が成り立つ。 (${}^tP$ は $P$ の転置行列)

担当教員：久本 智之　研究室：A343 E-mail:hisamoto@math.nagoya-u.ac.jp

(3) 勝手なベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$\langle P\boldsymbol{x}, P\boldsymbol{y}\rangle = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle$$

が成り立つ。

**問題 3.** $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n \in \mathbb{R}^n$ が正規直交基底ならば、勝手なベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ は

$$\boldsymbol{x} = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_1\rangle \boldsymbol{v}_1 + \cdots + \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_n\rangle \boldsymbol{v}_n$$

と書けることを示せ。(ヒント：まず $\boldsymbol{x} = a_1\boldsymbol{v}_1 + \cdots a_n\boldsymbol{v}_n$ と書いてから、両辺のベクトルと $\boldsymbol{v}_1$ の内積を取ってみよ。)

与えられた基底 $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n$ からスタートして、標準的な方法で正規直交基底 $\tilde{\boldsymbol{v}}_1, \dots, \tilde{\boldsymbol{v}}_n$ を作ることができる。$n = 2$ の場合で考えてみよう。まず $\boldsymbol{v}_1$ の長さを調節して

$$\tilde{\boldsymbol{v}}_1 := \frac{\boldsymbol{v}_1}{\|\boldsymbol{v}_1\|}$$

とおけば、$\tilde{\boldsymbol{v}}_1$ は $\|\tilde{\boldsymbol{v}}_1\| = \langle \tilde{\boldsymbol{v}}_1, \tilde{\boldsymbol{v}}_1\rangle = 1$ を満たす。$\boldsymbol{v}_2$ の長さを調節する前に、$\tilde{\boldsymbol{v}}_1$ と直交するように

$$\boldsymbol{v}_2' := \boldsymbol{v}_2 - \langle \boldsymbol{v}_2, \tilde{\boldsymbol{v}}_1\rangle \tilde{\boldsymbol{v}}_1$$

とおく。$\|\tilde{\boldsymbol{v}}_1\| = 1$ なので確かに $\langle \boldsymbol{v}_2', \tilde{\boldsymbol{v}}_1\rangle = 0$ が成り立っている。さらに長さを調節して

$$\tilde{\boldsymbol{v}}_2 := \frac{\boldsymbol{v}_2'}{\|\boldsymbol{v}_2'\|}$$

とおく。こうすれば、$\langle \tilde{\boldsymbol{v}}_2, \tilde{\boldsymbol{v}}_1\rangle = 0$ も $\|\tilde{\boldsymbol{v}}_2\| = 1$ も成り立つ。

**定理 1.** (Gram-Schmidt の直交化法)　$\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n$ を $V$ の基底とする。この時、次の手順に従って定まる $\tilde{\boldsymbol{v}}_1, \dots, \tilde{\boldsymbol{v}}_n$ は $V$ の正規直交基底である。

- $\tilde{\boldsymbol{v}}_1 = \dfrac{\boldsymbol{v}_1}{\|\boldsymbol{v}_1\|}$ と定める。
- $\boldsymbol{v}_2' = \boldsymbol{v}_2 - \langle \boldsymbol{v}_2, \tilde{\boldsymbol{v}}_1\rangle \tilde{\boldsymbol{v}}_1$ とおき、さらに $\tilde{\boldsymbol{v}}_2 = \dfrac{\boldsymbol{v}_2'}{\|\boldsymbol{v}_2'\|}$ と定める。
- 以下帰納的に、

$$\boldsymbol{v}_{k+1}' = \boldsymbol{v}_{k+1} - \langle \boldsymbol{v}_{k+1}, \tilde{\boldsymbol{v}}_1\rangle \tilde{\boldsymbol{v}}_1 - \langle \boldsymbol{v}_{k+1}, \tilde{\boldsymbol{v}}_2\rangle \tilde{\boldsymbol{v}}_2 - \cdots - \langle \boldsymbol{v}_{k+1}, \tilde{\boldsymbol{v}}_k\rangle \tilde{\boldsymbol{v}}_k,$$
$$\tilde{\boldsymbol{v}}_{k+1} = \frac{\boldsymbol{v}_{k+1}'}{\|\tilde{\boldsymbol{v}}_{k+1}\|} \qquad (1 \le k \le n-1)$$

と定める。

担当教員：久本 智之　研究室：A343　E-mail:hisamoto@math.nagoya-u.ac.jp

**例題 1.** $\mathbb{R}^2$ の基底 $\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ が与えられたとき、Gram-Schmidt の直交化法によって得られる正規直交基底を求めよ。

**【解答】** $\|\boldsymbol{v}_1\| = \sqrt{2}$ より、$\tilde{\boldsymbol{v}}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. 次に、$\langle \boldsymbol{v}_2, \tilde{\boldsymbol{v}}_1 \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ より、$\tilde{\boldsymbol{v}}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. $\|\tilde{\boldsymbol{v}}_2\| = \frac{1}{\sqrt{2}}$ より、$\tilde{\boldsymbol{v}}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ となる。

**問題 4.**

(1) $\mathbb{R}^2$ の基底 $\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} -3 \\ 4 \end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 7 \end{pmatrix}$ に対して Gram-Schmidt の直交化法を用い、正規直交基底 $\tilde{\boldsymbol{v}}_1, \tilde{\boldsymbol{v}}_2$ を作れ。

(2) $\mathbb{R}^3$ の基底 $\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ に対して Gram-Schmidt の直交化法を用い、正規直交基底 $\tilde{\boldsymbol{v}}_1, \tilde{\boldsymbol{v}}_2, \tilde{\boldsymbol{v}}_3$ を作れ。

(3) $\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$ を、(2) で得られた正規直交基底 $\tilde{\boldsymbol{v}}_1, \tilde{\boldsymbol{v}}_2, \tilde{\boldsymbol{v}}_3$ の一次結合で表せ。

## 実対称行列

**定義 2.** $n$ 次正方行列 $A$ の転置行列が自分自身に等しい、すなわち ${}^tA = A$ となるとき、$A$ を**対称行列**という。

2 次関数の定める行列や 2 変数関数の Hesse 行列、あるいはグラフの隣接行列など、すでに様々な場面で対称行列が現れていたことに注意せよ。次の問題が示すように、対称行列は内積と密接に関係している。

**問題 5.** $n$ 次正方行列 $A$ が対称行列であることと、勝手なベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対し

$$\langle A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \langle \boldsymbol{x}, A\boldsymbol{y} \rangle$$

が成り立つことは同値である。これを示せ。

**定理 2.** 実数を成分とする対称行列 $A$ の固有値 $\lambda_1, \ldots \lambda_n$ は全て実数で、$A$ は適当な**正規直交基底** $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ によって対角化できる。つまり、

$$A(\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n) = (\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n) \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

が成り立つ。

上の状況で $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ を横に並べてできる行列を $P$ とすると、問題 2 より ${}^tPP = E$ が成り立つ。このような行列を**直交行列**という。つまり、勝手な実対称行列 $A$ に対し適当な直交行列 $P$ が存在して

$${}^tPAP = P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

を満たす。

**例題 2.** 実対称行列 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ を直交行列によって対角化せよ。

**【解答】** まず普通に対角化してみる。固有多項式が $x(x^2-2)$ なので、$A$ の固有値は $\lambda_1 = -\sqrt{2}, \lambda_2 = 0, \lambda_1 = \sqrt{2}$. これらは確かに実数になっている。対応する固有ベクトルとして

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

が取れる。これらは $\mathbb{R}^3$ の基底を成し、$A$ は対角化できる。だが、よく見ると $\langle \boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2 \rangle = \langle \boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_3 \rangle = \langle \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3 \rangle = 0$ がすでに成り立っている！
従って、固有ベクトルの長さを調節して

$$\tilde{\boldsymbol{v}}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \tilde{\boldsymbol{v}}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \tilde{\boldsymbol{v}}_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

とすると、$\tilde{\boldsymbol{v}}_1, \tilde{\boldsymbol{v}}_2, \tilde{\boldsymbol{v}}_3$ は $\mathbb{R}^3$ の正規直交基底であり、しかも $A$ の固有値 $\lambda_1 = -\sqrt{2}, \lambda_2 = 0, \lambda_1 = \sqrt{2}$ に属する固有ベクトルである。よって

$$A(\tilde{\boldsymbol{v}}_1, \tilde{\boldsymbol{v}}_2, \tilde{\boldsymbol{v}}_3) = (\tilde{\boldsymbol{v}}_1, \tilde{\boldsymbol{v}}_2, \tilde{\boldsymbol{v}}_3) \begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

担当教員：久本 智之　研究室：A343 E-mail:hisamoto@math.nagoya-u.ac.jp

が成り立ち、$A$ は直交行列

$$P=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

によって対角化できる。

この解答で、相異なる固有値に属する固有ベクトルが互いに直交していたのは**偶然ではない**。下の問題 8 も参照せよ。ともかく、対称行列を直交行列によって対角化するときは常に、上のようなやり方が通用するのである。

**問題 6.** 次の実対称行列を直交行列によって対角化せよ。

(1) $A=\begin{pmatrix}-3 & 3\\ 3 & 5\end{pmatrix}$　(2) $A=\begin{pmatrix}1 & 0 & 2\\ 0 & 1 & 0\\ 2 & 0 & 1\end{pmatrix}$　(3) $A=\begin{pmatrix}0 & 1 & 1\\ 1 & 0 & -1\\ 1 & -1 & 0\end{pmatrix}$

**問題 7.** $N$ 個のサンプルに対して、2 種類のデータ $x_1,\dots,x_N,\ y_1,\dots,y_N$ を計測したとする。それぞれの平均を $\bar{x},\bar{y}$ としたとき、対称行列

$$\begin{pmatrix}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{x})(x_i-\bar{x}) & \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})\\ \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y}) & \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(y_i-\bar{y})(y_i-\bar{y})\end{pmatrix}$$

を**共分散行列**という。例えば $N=20$ 人の学生に対して 10 点満点の小テストを行い、次のようなデータが得られたとする。

| $i=$ 学生番号 | **01** | **02** | **03** | **04** | **05** | **06** | **07** | **08** | **09** | **10** |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $x_i=$ 数学の点数 | 5 | 7 | 5 | 4 | 9 | 4 | 4 | 6 | 6 | 5 |
| $y_i=$ 国語の点数 | 8 | 9 | 4 | 5 | 6 | 6 | 7 | 9 | 7 | 6 |
| $i=$ 学生番号 | **11** | **12** | **13** | **14** | **15** | **16** | **17** | **18** | **19** | **20** |
| $x_i=$ 数学の点数 | 6 | 5 | 6 | 6 | 7 | 6 | 8 | 6 | 9 | 6 |
| $y_i=$ 国語の点数 | 4 | 8 | 9 | 7 | 8 | 7 | 5 | 8 | 9 | 8 |

この場合の共分散行列を求め、適当な直交行列によって対角化せよ。一般に共分散行列の固有値はデータのどのような特徴を反映するか考察せよ。

担当教員：久本 智之　研究室：A343　E-mail:hisamoto@math.nagoya-u.ac.jp

**問題 8.**

(1) $n$ 次の実対称行列 $A$ の固有多項式を考える。これは重複を込めて $n$ 個の複素数根を持つ。そのうちの一つを $\lambda \in \mathbb{C}$ とする。$\lambda$ に属する固有ベクトル $\boldsymbol{v}$ は、連立方程式

$$A\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v} \tag{1.1}$$

の解と考える。$\boldsymbol{v}$ の成分が複素数であることを許せば、$\lambda$ が複素数でも $\boldsymbol{v}$ が求められる。さて問題 5 は $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^n$ に対しても

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle := x_1\bar{y}_1 + \cdots + x_n\bar{y}_n \tag{1.2}$$

とすれば成り立つことを示し、(1.1), (1.2) を用いて $\lambda$ が実数になることを示せ。

(2) 実対称行列 $A$ の相異なる固有値に対する固有ベクトルは互いに直交することを示せ。

**補足 1.** 問題 8 を見れば分かるように、たとえ実数を成分に持つ行列の性質であっても、いちど複素数の世界に飛び出すことで見通しよく理解できる。