多変数の微分積分学1 第19回

桂田 祐史

2011年7月7日 (木)

この授業用のWWWページは
http://www.math.meiji.ac.jp/~mk/lecture/tahensuu1-2011/

1 対称行列の符号の判定

例 1.1 (2次元の場合の2次形式の簡単な例) $\vec{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$

(1) $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. 固有値が 1 (重根) で明らかに正値である。実際、

$$(A\vec{x}, \vec{x}) = x^2 + y^2 > 0 \quad (\vec{x} \neq \vec{0}).$$

(2) $A = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. 固有値が -1 (重根) で明らかに負値である。実際、

$$(A\vec{x}, \vec{x}) = -x^2 - y^2 < 0 \quad (\vec{x} \neq \vec{0}).$$

(3) $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. 固有値が 1, -1 で明らかに不定符号である。実際、

$$(A\vec{x}, \vec{x}) = x^2 - y^2 \quad (\vec{x} \neq \vec{0})$$

は正負両方の値をとる。■

実対称行列 A が正値であるとは、定義によれば A の固有値がすべて 0 であることだが、A の特性方程式 $\det(\lambda I - A) = 0$ の解がすべて正であることと同値である。残念ながら特性方程式は解くのが大変な場合が多く、3 次方程式の場合で既に難しい。

定理 1.2 (首座小行列式の符号による正値性、負値性の判定) n 次実対称行列 $A = (a_{ij})$ に対して、p A_k を A の k 次首座行列とするとき、以下の (1), (2) が成り立つ。

(1) A が正値 $\iff \forall k \in \{1, \cdots, n\} \quad \det A_k > 0.$

(2) A が負値 $\iff \forall k \in \{1, \cdots, n\} \quad (-1)^k \det A_k > 0.$ ($\det A_1$, $\det A_2$, $\ldots$, $\det A_n$ の符号が交互に負, 正, 負, 正,...)

証明　(線形代数の本を見よ。) ■

連立 1 次方程式の解法に、「Gauss の消去法」と呼ばれるものがある。数学の授業では習わないかも知れないが、コンピューター関係の授業ではしばしば紹介される (A 節を見よ)。この方法の前半部分は行列の変形を行うが、それを対称行列の符号の判定に利用できる。

定理 1.3 (Gauss の消去法による正値性、負値性の判定法) n 次実対称行列 $A=(a_{ij})$ に対して、以下の (1), (2) が成り立つ。

(1) A が正値 $\Longleftrightarrow$ A が行交換なしの Gauss の消去法で上三角行列に変形され、その対角成分がすべて正となる。

(2) A が負値 $\Longleftrightarrow$ A が行交換なしの Gauss の消去法で上三角行列に変形され、その対角成分がすべて負となる。

証明　(あまりストレートに書いていないので、この定理の証明だけが欲しい人には強く勧められないが、桂田 [1] にはとりあえず書いてある。) ■

実は、Gauss の消去法は、平方完成と関係がある。実対称行列 A を係数とする 2 次形式を、(係数) $\times$ (多項式)^2 の和の形に変形したときの、係数が Gauss の消去法で得られた上三角行列の対角成分となっている。証明はしないが、例を見てもらおう。

例 1.4

$$A=\begin{pmatrix}1&0&2\\0&1&2\\2&2&-1\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}1&0&2\\0&1&2\\0&2&-5\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}1&0&2\\0&1&2\\0&0&-9\end{pmatrix}.$$

正値でも負値でもない。また行列式は 0 でない (-9 に等しい)。ゆえに不定符号である (実際固有値は $\lambda=1,1,-1$ である)。A を係数とする 2 次形式を平方完成してみよう。

$$\begin{aligned}x^2+y^2-z^2+4xz+4yz&=(x+2z)^2-4z^2+y^2-z^2+4yz\\&=(x+2z)^2+y^2+4yz-5z^2\\&=(x+2z)^2+(y+2z)^2-9z^2.\end{aligned}$$

係数の 1, 1, -9 に注目。

もう一つ、

$$A=\begin{pmatrix}2&1&1\\1&2&1\\1&1&2\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}2&1&1\\0&\dfrac{3}{2}&\dfrac{1}{2}\\0&\dfrac{1}{2}&\dfrac{3}{2}\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}2&1&1\\0&\dfrac{3}{2}&\dfrac{1}{2}\\0&0&\dfrac{4}{3}.\end{pmatrix}$$

$\det A_1=2>0$, $\det A_2=2^2-1^2=3>0$, $\det A_3=\det A=4>0$ であるから、これは正値で

ある (固有値は 4, 1, 1)。2 次形式の平方完成は

$$
\begin{aligned}
2x^2+2y^2+2z^2+2xy+2yz+2zx &= 2(x^2+(y+z)x)+2y^2+2z^2+2yz \\
&= 2\left(x+\frac{y+z}{2}\right)^2-\frac{(y+z)^2}{2}+2y^2+2z^2-2yz \\
&= 2\left(x+\frac{y+z}{2}\right)^2+\frac{3y^2}{2}+yz+\frac{3z^2}{2} \\
&= 2\left(x+\frac{y+z}{2}\right)^2+\frac{3}{2}\left(y^2+\frac{2}{3}yz\right)+\frac{3z^2}{2} \\
&= 2\left(x+\frac{y+z}{2}\right)^2+\frac{3}{2}\left(y+\frac{z}{3}\right)^2-\frac{z^2}{6}+\frac{3z^2}{2} \\
&= 2\left(x+\frac{y+z}{2}\right)^2+\frac{3}{2}\left(y+\frac{z}{3}\right)^2+\frac{4}{3}z^2.
\end{aligned}
$$

係数 2, 3/2, 4/3 が、やはり上の Gauss の消去法の結果の対角成分として現れている。■

与えられた行列が正値か、負値か、不定符号か、あるいはそのいずれでもないか、判定する必要が生じることがある。

- 与えられた行列が対角行列ならば、対角成分が固有値なので、判定は簡単である。

$$
A=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&3\end{pmatrix}
$$

  は対角行列で、固有値は 1, 2, 3 でいずれも正なので A は正値。

- 与えられた行列が 2 行 2 列ならば、特性方程式を解いて固有値を求めるのもアリ。

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

  の特定多項式は $\det(\lambda I-A)=\lambda^2-(2+1)\lambda+(2\cdot 1-1\cdot 1)=\lambda^2-3\lambda+1$. 固有値は $\lambda=\dfrac{3\pm\sqrt{3^2-4\cdot 1\cdot 1}}{2}=\dfrac{3\pm\sqrt{5}}{2}>0$ であるから、いずれも正である。ゆえに A は正値である。

- 与えられた行列の首座小行列式 $\det A_k$ の符号を調べる。すべて正ならば A は正値、$\det A_k$ $(k=1,2,\dots,n)$ が順に $-+-+\cdots$ であれば A は負値。例えば

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

  の首座小行列式は

$$
\begin{aligned}
&\det A_1=2>0,\quad \det A_2=2\cdot 2-1\cdot 1=3>0,\\
&\det A_3=2\cdot 2\cdot 2+1\cdot 1\cdot 1+1\cdot 1\cdot 1-1\cdot 2\cdot 1-2\cdot 1\cdot 1-2\cdot 1\cdot 1\\
&\qquad\quad =8+1+1-2-2-2=4>0
\end{aligned}
$$

  であるから正値である。

- A が 2 次実対称行列で $\det A < 0$ ならば不定符号であり、$\det A = 0$ ならば正値でも負値でも不定符号でもない。
  (A の固有値を λ_1, λ_2 とするとき、$\lambda_1\lambda_2 = \det A$ であるから。)

2　問10

次の行列が正値であるか、負値であるか、不定符号であるか、そのどれでもないか、判定せよ。

(1) $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$　(2) $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$　(3) $\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$　(4) $\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}$

(5) $\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$　(6) $\begin{pmatrix} -3 & -2 \\ -2 & -3 \end{pmatrix}$　(7) $\begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$　(8) $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

(9) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$　(10) $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$　(11) $\begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$　(12) $\begin{pmatrix} -3 & 2 & 0 \\ 2 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$

(13) $\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix}$

締切は 7/11

3　前回紹介した定理の証明

定理 3.1 Ω が $\mathbf{R}^n$ の開集合、$f\colon \Omega \to \mathbf{R}$ が C^2 級, $a \in \Omega$, $f'(a) = 0$, $H(a) :=$ f の a における Hesse 行列 とするとき、次の (i), (ii), (iii) が成り立つ。

(i) $H(a)$ が正値 $\Longrightarrow$ f は a で狭義の極小となる。

(ii) $H(a)$ が負値 $\Longrightarrow$ f は a で狭義の極大となる。

(iii) $H(a)$ が不定符号 $\Longrightarrow$ f は a で極値を取らない。

証明　Ω が開集合であるから、$\exists\varepsilon > 0$ s.t. $B(a;\varepsilon) \subset \Omega$. Taylor の定理から、

$$\begin{aligned}(\forall h \in \mathbf{R}^2 : \|h\| < \varepsilon)(\exists\theta \in (0,1)) \quad f(a+h) &= f(a) + f'(a)h + \frac{1}{2}\left(H(a+\theta h)h, h\right) \\ &= f(a) + \frac{1}{2}\left(H(a+\theta h)h, h\right).\end{aligned}$$

(i) $H(a)$ が正値ならば、$\forall k \in \{1, \cdots, n\}$ $\det H_k(a) > 0$. f が C^2 級で、$H(x)$ は連続だから、$\exists\varepsilon' \in (0,\varepsilon)$, $(\forall h \in \mathbf{R}^n\colon\ \|h\| < \varepsilon')(\forall\theta \in (0,1))$ $\det H_k(a+\theta h) > 0$. このとき $(\forall h \in \mathbf{R}^n\colon\ \|h\| < \varepsilon')$ $(\forall\theta \in (0,1))$ $H(a+\theta h)$ は正値である。ゆえに $h \neq 0$ ならば $(H(a+\theta h)h, h) > 0$ であるから、$f(a+h) > f(a)$. ゆえに f は a で狭義の極小である。

(ii) (i) と同様に証明できるので省略する。

(iii) $H(a)$ が不定符号とする。$\exists\lambda,\mu$: $H(a)$ の固有値で、$\lambda>0$ かつ $\mu<0$. $\exists u,v\in\mathbf{R}^n\setminus\{0\}$ s.t. $H(a)u=\lambda u$, $H(a)v=\mu v$. $0<\|u\|<\varepsilon$, $0<\|v\|<\varepsilon$ として良い (固有ベクトルは実数倍しても固有ベクトルであるから)。

$$g(t):=f(a+tu),\quad h(t):=f(a+tv)$$

とおくと、

$$\begin{aligned}
g'(t)&=f'(a+tu)u, & g''(t)&=\left(H(a+tu)u,u\right),\\
h'(t)&=f'(a+tv)v, & h''(t)&=\left(H(a+tv)v,v\right),\\
g'(0)&=f'(a)u=0, & g''(0)&=\left(H(a)u,u\right)=\lambda(u,u)>0,\\
h'(0)&=f'(a)v=0, & h''(0)&=\left(H(a)v,v\right)=\mu(v,v)<0
\end{aligned}$$

である。$g(t)$ ($|t|<1$) は $t=0$ で狭義の極小、$h(t)$ ($|t|<1$) は $t=0$ で狭義の極大である。ゆえに f は a で極値を取らない (変化する方向によって極小となったり極大となったりする峠点 (鞍点, saddle point) であるから)。 ■

A　ガウス (Gauss) の消去法のアルゴリズム

連立 1 次方程式の解法として、線形代数の教科書には **クラーメル (Cramer) の公式**や**掃き出し法** (Jordan（ヨルダン）の消去法ともいう) が説明されていることが多いが、ガウスの消去法は、掃き出し法を改良したものである[1]。

例として次の方程式を取りあげて説明しよう。

$$\text{(1)}\qquad \left\{\begin{array}{rcrcrl}
2x_1 & + & 3x_2 & - & x_3 & =5\\
4x_1 & + & 4x_2 & - & 3x_3 & =3\\
-2x_1 & + & 3x_2 & - & x_3 & =1.
\end{array}\right.$$

掃き出し法では係数行列と右辺のベクトルを並べた行列を作り、それに

1. ある行に 0 でない定数をかける。
2. 2 つの行を入れ換える。
3. ある行に別の行の定数倍を加える。

のような操作 — **行に関する基本変形**と呼ぶ — をほどこして、連立方程式の係数行列に相当する部分を単位行列にするのであった。

$$\begin{pmatrix}2&3&-1&5\\4&4&-3&3\\-2&3&-1&1\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}1&\frac{3}{2}&-\frac{1}{2}&\frac{5}{2}\\4&4&-3&3\\-2&3&-1&1\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}1&\frac{3}{2}&-\frac{1}{2}&\frac{5}{2}\\0&-2&-1&-7\\0&6&-2&6\end{pmatrix}\to$$

[1] 見方によっては、ガウスの消去法は中学校で習う加減法 (初めて習う解法！) そのものであり、大学の線形代数で習う解法は、実用性では退化していると言えなくもない (？)。

$$
\to \begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{5}{2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{7}{2} \\ 0 & 6 & -2 & 6 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{5}{4} & -\frac{11}{4} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{7}{2} \\ 0 & 0 & -\frac{5}{2} & -\frac{15}{2} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{5}{4} & -\frac{11}{4} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{7}{2} \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{pmatrix} \to
$$

$$
\to \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad \text{ゆえに} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}.
$$

ガウスの消去法も、前半の段階はこの方法に似ていて、同様の変形を用いて掃き出しを行なうのだが、以下のように対角線の下側だけを 0 にする。

$$
\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 & 5 \\ 4 & 4 & -3 & 3 \\ -2 & 3 & -1 & 1 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 & 5 \\ 0 & -2 & -1 & -7 \\ 0 & 6 & -2 & 6 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 & 5 \\ 0 & -2 & -1 & -7 \\ 0 & 0 & -5 & -15 \end{pmatrix}.
$$

最後の行列は

$$
2x_1 + 3x_2 - x_3 = 5, \quad -2x_2 - x_3 = -7, \quad -5x_3 = -15
$$

ということを表しているので、後の方から順に

$$
x_3 = \frac{-15}{-5} = 3, \quad x_2 = \frac{-7 + x_3}{-2} = 2, \quad x_1 = \frac{5 - 3x_2 + x_3}{2} = \frac{5 - 3 \times 2 + 3}{2} = 1
$$

と解くことが出来る。前半の対角線の下側を 0 にする掃き出しの操作を**前進消去** (forward elimination)、後半の代入により解の値を求める操作を**後退代入** (backward substitution) と呼ぶ。

参考文献

[1] 桂田祐史：発展系の数値解析の続き, `http://www.math.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/heat-fdm-0-add.pdf` (1997 年〜).