である．ここで，

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^T\boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)$$

は２次形式になっている．さらに，$\boldsymbol{x}^*$ が関数 f の極小点あるいは極大点であると仮定すると，

$$\boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}^*)=\boldsymbol{0}$$

が成り立つ．この場合，近似式 (6) は

$$f(\boldsymbol{x})=f(\boldsymbol{x}^*)+\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^T\boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)+o(\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*\|^2)$$

となり，誤差を無視した右辺を

$$g(\boldsymbol{x}):=f(\boldsymbol{x}^*)+\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^T\boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)$$

と定義する．このとき，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^* \text{ が } g(\boldsymbol{x}) \text{ の最小点} \quad \Leftrightarrow \quad & \boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*) \text{ が非負定値（半正定値），すなわち}\\ & \boldsymbol{u}^T\boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*)\boldsymbol{u}\geq 0, \quad \forall\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^n\end{aligned}$$

[問題 10-02]　２階連続微分可能な関数 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ に対して，点 $\boldsymbol{x}^*\in\mathbb{R}^n$ での２次近似を $g:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ とする．すなわち，

$$g(\boldsymbol{x})=f(\boldsymbol{x}^*)+\boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}^*)^T(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)+\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)^T\boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^*)$$

で定義する．このとき，

$$\boldsymbol{x}^* \text{ が } g(\boldsymbol{x}) \text{ の最小点} \Leftrightarrow \boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}^*)=\boldsymbol{0} \text{ かつ } \boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*) \text{ が非負定値（半正定値）}$$

となることを証明せよ．このことより，

$$\boldsymbol{x}^* \text{ が } f(\boldsymbol{x}) \text{ の極小点} \Rightarrow \boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}^*)=\boldsymbol{0} \text{ かつ } \boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*) \text{ が非負定値（半正定値）}$$

が導かれる．

定義１０．１：$\boldsymbol{Q}$ を $n\times n$ 次元の行列とする．

$$\begin{array}{llll}\boldsymbol{Q} \text{ は非負定値（半正定値）} & \Leftrightarrow & \boldsymbol{u}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u}\geq 0, & \forall\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^n\\ \boldsymbol{Q} \text{ は正定値} & \Leftrightarrow & \boldsymbol{u}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u}> 0, & \forall\boldsymbol{u}\neq 0\\ \boldsymbol{Q} \text{ は非正定値（半負定値）} & \Leftrightarrow & \boldsymbol{u}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u}\leq 0, & \forall\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^n\\ \boldsymbol{Q} \text{ は負定値} & \Leftrightarrow & \boldsymbol{u}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{u}< 0, & \forall\boldsymbol{u}\neq 0\end{array}$$

例１：

$\boldsymbol{Q}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$ を２次元の単位行列とする．

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}=(x_1\ x_2)\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}=x_1^2+x_2^2>0, \qquad \forall\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix}\neq\boldsymbol{0}.$$

ゆえに，正定値行列である．

例２：

$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$ を２次元の対角行列とする．

$$\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{Q} \boldsymbol{x} = (x_1\ x_2) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \lambda_1 x_1^2 + \lambda_2 x_2^2.$$

ゆえに，

$$\begin{aligned} \lambda_1 \geq 0 \text{ かつ } \lambda_2 \geq 0 \quad &\Rightarrow \quad \boldsymbol{Q} \text{ は非負定値行列である．} \\ \lambda_1 > 0 \text{ かつ } \lambda_2 > 0 \quad &\Rightarrow \quad \boldsymbol{Q} \text{ は正定値行列である．} \end{aligned}$$

不等式が逆の場合はそれぞれ非正定値，負定値となる．λ_1, λ_2 は $\boldsymbol{Q}$ の固有値になっている．$n \times n$ の対角行列の場合は

$$\begin{aligned} \boldsymbol{Q} \text{ は非負定値行列（半正定値行列）} \quad &\Leftrightarrow \quad \text{すべての固有値が非負} \\ \boldsymbol{Q} \text{ は正定値行列} \quad &\Leftrightarrow \quad \text{すべての固有値が正} \\ \boldsymbol{Q} \text{ は非正定値行列（半負定値行列）} \quad &\Leftrightarrow \quad \text{すべての固有値が非正} \\ \boldsymbol{Q} \text{ は負定値行列} \quad &\Leftrightarrow \quad \text{すべての固有値が負} \end{aligned}$$

このことは，一般の対称行列でも成立する．これを,『対角化』を用いて後程証明する．

例３：

$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ をすべての要素が正の行列とする．

$$\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{Q} \boldsymbol{x} = (x_1\ x_2) \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = x_1^2 + 4x_1x_2 + x_2^2.$$

$x_1 = x_2 = 1$ とすると，$\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{Q} \boldsymbol{x} = 6 > 0$．$x_1 = 1,\ x_2 = -1$ とすると，$\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{Q} \boldsymbol{x} = -2 < 0$ となる．したがって，この行列は非負定値でも非正定値でもない．

例４：

$$(x_1 - x_2)^2 = x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2 \geq 0, \qquad \forall \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

であるから，この２次形式は非負定値である．この行列表現は,

$$(x_1\ x_2) \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

となる．$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$ には負の要素があるが，$\boldsymbol{Q}$ は非負定値行列である．

例３，例４で分かるとおり，要素がすべて非負（正）の行列と非負定値（正定値）行列は異なる．

[問題 10-03] $n \times n$ 対称行列 $\boldsymbol{Q}$ に対して，変数ベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に関する 2 次形式を $g(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}$ で定義する．以下の 4 つの命題について考える．

(a) $\boldsymbol{Q}$ は正定値行列．

(b) $g(\boldsymbol{x})$ は $\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{0}$ で最小値をとる．

(c) $g(\boldsymbol{x})$ は $\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{0}$ で極小値をとる．すなわち，ある $\varepsilon > 0$ が存在し，$\|\boldsymbol{x}\| \leq \varepsilon$ なる任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して，$g(\bar{\boldsymbol{x}}) \leq g(\boldsymbol{x})$ が成り立つ．

(d) $\boldsymbol{Q}$ は非負定値行列．

このとき，

$$(a) \Rightarrow (b) \Leftrightarrow (c) \Leftrightarrow (d)$$

が成立することを証明せよ．

[問題 10-04] $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を 2 階連続微分可能な関数としたとき，以下について説明せよ．

(a) $\boldsymbol{x}^*$ が f の極小点であるための必要条件．

(b) $\boldsymbol{x}^*$ が f の極小点であるための十分条件．

(c) $\boldsymbol{x}^*$ が f の極大点であるための必要条件．

(d) $\boldsymbol{x}^*$ が f の極大点であるための十分条件．

一般に，2 階連続微分可能な関数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ に対して，

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{x}^* \text{ が } f \text{ の極小点} &&\Rightarrow &&\boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*) \text{ が非負定値（半正定値）}\\
&\boldsymbol{x}^* \text{ が } f \text{ の極小点} &&\Leftarrow &&\boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*) \text{ が正定値}\\
&\boldsymbol{x}^* \text{ が } f \text{ の極大点} &&\Rightarrow &&\boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*) \text{ が非正定値（半負定値）}\\
&\boldsymbol{x}^* \text{ が } f \text{ の極大点} &&\Leftarrow &&\boldsymbol{\nabla} f(\boldsymbol{x}^*) = \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{H}f(\boldsymbol{x}^*) \text{ が負定値}
\end{aligned}$$

10.3　固有値

定義１０．２：$\boldsymbol{A}$ を n 次正方行列とする．

λ は $\boldsymbol{A}$ の固有値で，$\boldsymbol{p}$ はλ に対する固有ベクトルである．

$$\Updownarrow$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{p}, \quad \boldsymbol{p} \neq \boldsymbol{0} \tag{7}$$

固有値 λ が正の実数のときには，線形写像 $\boldsymbol{A}$ によって同じ方向に移されるベクトルが固有値 λ に対応する固有ベクトル $\boldsymbol{p}$ である（図 21 参照）．固有値が負の実数の場合には，その固有値に対応する固有ベクトルは線形写像 $\boldsymbol{A}$ によって逆の方向に移される．

一般には，λ は複素数，$\boldsymbol{p}$ は複素ベクトルになる．固有値，固有ベクトルの条件 (7) は

$$(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I})\boldsymbol{p} = \boldsymbol{0}, \qquad \boldsymbol{p} \neq \boldsymbol{0}$$

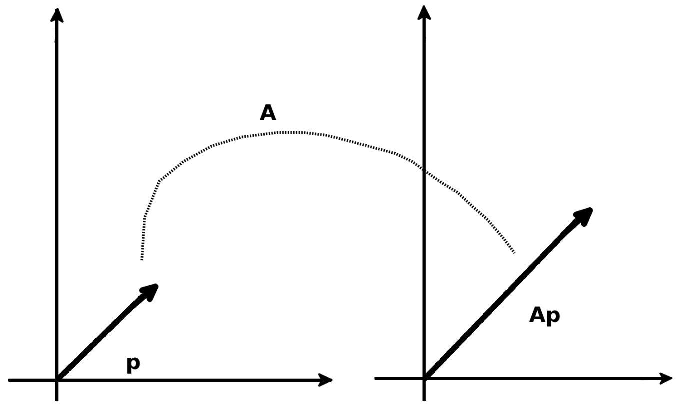

図 21: 固有ベクトル $\boldsymbol{p}$ を線形写像 $\boldsymbol{A}$ によって移した場合.

と書ける．ただし，$\boldsymbol{I}$ は $n \times n$ 単位行列である．したがって，$\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}$ は正則でない．すなわち，

$$\det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}) = 0 \qquad \text{（固有方程式）}$$

これは一般的に n 次の代数方程式となり，根の重複度も含め n 個の根をもつ．したがって，固有値は（重複度も含めると）n 個になる．

[問題 10-05]

(a) $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ -4 & 4 \end{pmatrix}$ の固有方程式を導き，固有値を計算せよ．

(b) $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$ の固有方程式を導き，固有値と固有ベクトルを計算せよ．

(c) $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}$ の固有方程式を導き，固有値と固有ベクトルを計算せよ．

定理１０．３：$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ を $n \times n$ 実対称行列の固有値とする．

(a) $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ は実数であり，対応する固有ベクトルも実数ベクトルとしてとれる．

(b) 固有値 λ_i に対応する固有ベクトル $\boldsymbol{p}_i$ をお互いに直交し，かつ，その長さを 1 にとることができる．すなわち，

$$(\boldsymbol{p}_i)^T \boldsymbol{p}_j = 0 \quad (i \neq j), \qquad \|\boldsymbol{p}_i\| = 1. \quad (i = 1, 2, \ldots, n)$$

したがって，$\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_n$ は線形独立になり，n 次元空間 $\mathbb{R}^n$ の基底をなす．

証明（略）:

(a) λ を $\boldsymbol{A}$ の固有値とする．すなわち，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$$

を仮定する．複素共役を $^{-}$ で表すとする．$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$ の複素共役をとると，$\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} = \bar{\lambda}\bar{\boldsymbol{x}}$ となる．したがって，

$$\lambda\bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{x} = \bar{\boldsymbol{x}}^T(\lambda\boldsymbol{x}) = \bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x}^T(\bar{\lambda}\bar{\boldsymbol{x}}) = \bar{\lambda}\boldsymbol{x}^T\bar{\boldsymbol{x}} = \bar{\lambda}\bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{x}$$

となる．ここで，$\bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{x}$ はゼロでない実数であるので $\lambda = \bar{\lambda}$ を得る．

さらに，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{a} + i\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ とすると，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{a} + i\boldsymbol{b}) = \lambda(\boldsymbol{a} + i\boldsymbol{b}) = \lambda\boldsymbol{x}$$

となるので，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{a} = \lambda\boldsymbol{a}$ となる実数の固有ベクトル $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^n$ が存在することになる．

(b) $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ を λ, μ の相異なる固有値に対応する固有ベクトルとする．すなわち，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \mu\boldsymbol{y}, \quad \boldsymbol{y} \neq \boldsymbol{0}.$$

このとき，

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}^T(\lambda\boldsymbol{x}) = \lambda\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y}, \\ &\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}^T(\mu\boldsymbol{y}) = \mu\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y} \end{aligned}$$

となる．よって，

$$0 = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = (\lambda - \mu)\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y}.$$

仮定より，$\lambda \neq \mu$ であるから，$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y} = 0$ を得る．以上のことから異なる固有値に対する固有ベクトルは直交している．さらに，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$ であれば，両側を $\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}}$ で割ることによって

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

ノルムが 1 の固有ベクトル $\boldsymbol{p} = \frac{\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{x}\|}$ を得ることができる．

よって，$\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \ldots, \hat{\lambda}_k \quad (k \leq n)$ を $\boldsymbol{A}$ の異なる全ての固有値とし（つまり重複する場合はその一つだけを表す），$W_i := \{\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^n \mid \boldsymbol{A}\boldsymbol{p} = \hat{\lambda}_i\boldsymbol{p}\} \quad (i = 1, 2, \ldots, k)$ とすると（固有空間と呼ばれる），W_i はお互いに直交しているベクトル部分空間になっていることがわかる．さらに，$\mathbb{R}^n = W_1 \oplus W_2 \oplus \cdots \oplus W_k$ となることを n に関して帰納法で示す．

$n = 1$ の場合は明らかである．$\{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in W_1\} \subseteq W_1$，さらに $\forall\boldsymbol{y} \in W_1$，$\forall\boldsymbol{x} \in W_1^{\perp}$ に対して $\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^T = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \hat{\lambda}_1\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y} = 0$ が成り立つので，$\{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in W_1^{\perp}\} \subseteq W_1^{\perp}$ となることがわかる．そのため，直交分解の定理 $\mathbb{R}^n = W_1 \oplus W_1^{\perp}$ より，$\boldsymbol{A}$ の $\hat{\lambda}_2, \hat{\lambda}_3, \ldots, \hat{\lambda}_k$ に相当する固有ベクトルは $W_1^{\perp}$ にしか含まれていない．さらに，$n = \dim(W_1) + \dim(W_1^{\perp})$ で，$\dim(W_1) \geq 1$ であることから帰納法を用いて，$W_1^{\perp} = W_2' \oplus W_3' \oplus \cdots \oplus W_k'$ はお互いに直交で固有値 $\hat{\lambda}_2, \hat{\lambda}_3, \ldots, \hat{\lambda}_k$ に相当する固有空間 $W_2', W_3', \ldots, W_k'$ に分解できる．さらに，$W_i' \subseteq W_i \quad (i = 2, 3, \ldots, k)$ は当然成り立つが，$\mathbb{R}^n = W_1 \oplus W_2' \oplus W_3' \oplus \cdots \oplus W_k'$ より，結局 $W_i' = W_i \quad (i = 2, 3, \ldots, k)$ である．

最後に $\boldsymbol{p}_i$ と $\boldsymbol{p}_j$ が同じ固有値 λ に対する線形独立な固有ベクトル（例えばその固有空間の基底）であり，$\|\boldsymbol{p}_i\| = 1$ と仮定する．

$$\boldsymbol{p}_j' = \boldsymbol{p}_j - (\boldsymbol{p}_i^T\boldsymbol{p}_j)\boldsymbol{p}_i$$

とおくと，

$$\boldsymbol{p}_i^T\boldsymbol{p}_j' = \boldsymbol{p}_i^T\boldsymbol{p}_j - (\boldsymbol{p}_i^T\boldsymbol{p}_j)\boldsymbol{p}_i^T\boldsymbol{p}_i = \boldsymbol{p}_i^T\boldsymbol{p}_j - \boldsymbol{p}_i^T\boldsymbol{p}_j = 0$$

が $\|\boldsymbol{p}_i\|^2 = \boldsymbol{p}_i^T\boldsymbol{p}_i = 1$ のために成り立つ．さらに

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_j' = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{p}_j - (\boldsymbol{p}_i^T\boldsymbol{p}_j)\boldsymbol{p}_i) = \lambda\boldsymbol{p}_j - (\boldsymbol{p}_i^T\boldsymbol{p}_j)\lambda\boldsymbol{p}_i = \lambda\boldsymbol{p}_j'$$

となる．最後に $\boldsymbol{p}_j'' = \dfrac{\boldsymbol{p}_j'}{\sqrt{(\boldsymbol{p}_j')^T\boldsymbol{p}_j'}}$ より，$\boldsymbol{p}_i$ と $\boldsymbol{p}_j''$ はお互いに直交であり，ノルムが 1 であり，同じ固有値 λ に相当する固有ベクトルとなる．

□

[問題 10-06]

(a) 問題 10-05 (c) で求めた 2 つの固有ベクトルは直交しているか検証せよ．

(b) $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$ の固有値を求め，対応する固有ベクトルが直交するように定めよ．

10.4 行列の対角化

[問題 10-07] 2×2 の対角行列 $\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$ の固有値は λ_1, λ_2 になるが，この行列が非負定値であるための必要十分条件は $\lambda_1, \lambda_2 \geq 0$ であることを証明せよ．

定理１０．４：$\boldsymbol{Q}$ を n 次対称行列とする．このとき，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{Q}\text{ は非負定値行列} \quad &\Leftrightarrow \quad \text{すべての固有値が非負} \\ \boldsymbol{Q}\text{ は正定値行列} \quad &\Leftrightarrow \quad \text{すべての固有値が正} \\ \boldsymbol{Q}\text{ は非正定値行列} \quad &\Leftrightarrow \quad \text{すべての固有値が非正} \\ \boldsymbol{Q}\text{ は負定値行列} \quad &\Leftrightarrow \quad \text{すべての固有値が負} \end{aligned}$$

以下では，対角化という手法を用いてこの定理を証明する．$\boldsymbol{Q}$ を $n \times n$ の対称行列とし，前の定理を満たすように固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ と対応する固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_n$ をとる．$n \times n$ 行列 $\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{p}_1\ \boldsymbol{p}_2\ \cdots\ \boldsymbol{p}_n)$ と定める．

[問題 10-08] 前の定理を満たすように固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ と対応する固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \ldots, \boldsymbol{p}_n$ をとる．$n \times n$ 行列 $\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{p}_1\ \boldsymbol{p}_2\ \cdots\ \boldsymbol{p}_n)$ と定める．このとき，$\boldsymbol{P}$ は直交行列になる，すなわち，$\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I}$ を満たすことを示せ．また，$\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^T = \boldsymbol{I}$ は成立するか．

このとき，行列 $\boldsymbol{Q}$ と $\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}$ の固有値は同じになる．実際 λ と $\boldsymbol{p}$ を $\boldsymbol{Q}$ の固有値と固有ベクトルとすると

$$\boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{p}, \quad \boldsymbol{p} \neq \boldsymbol{0}.$$

となる．ここで，$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{P}^T\boldsymbol{p}$ とおくと，$\boldsymbol{P}$ は直交行列であることから，

$$\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{0}, \quad \boldsymbol{P}\boldsymbol{r} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}$$

となる．したがって，

$$\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}\boldsymbol{r} = \boldsymbol{P}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{p} = \lambda\boldsymbol{r}, \quad \boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{0}$$

を得る．ゆえに，λ と $\boldsymbol{r}$ は行列 $\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}$ の固有値と固有ベクトルになる．

また，逆に λ と $\boldsymbol{r}$ は行列 $\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}$ の固有値と固有ベクトルとすると，

$$\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}\boldsymbol{r} = \lambda\boldsymbol{r}, \quad \boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{0}$$