

二次形式と正規行列の対角化の応用

二次形式の応用 直交行列による変換は長さや二点間の距離を保ち、図形を合同な図形にうつす。これにより、二次形式の直交標準形は二次曲線や二次曲面の分類に応用される。一方、正則行列による変換では三角形は一般には合同でも相似でもない三角形にうつし、円を楕円にうつす。しかし、三角形、楕円、双曲線であるといった性質は保つ。このことは、二次曲線の概形や多変数関数の極大、極小を調べるのに利用される。

直交標準型の応用

固有値の最大、最小

二次形式 $f(\mathbf{x}) = {}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}$ について、

$$(1) \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|^2} = \max_{\|\mathbf{x}\|=1} {}^t\mathbf{x}A\mathbf{x} = A \text{ の最大の固有値} \quad (2) \min_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|^2} = \min_{\|\mathbf{x}\|=1} {}^t\mathbf{x}A\mathbf{x} = A \text{ の最小の固有値}$$

例 $x^2+y^2+z^2=1$ のもとで、 $f(\mathbf{x}) = x^2+y^2+z^2-4yz$ の最大値、最小値は

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & -2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{vmatrix} x-1 & 0 & 0 \\ 0 & x-1 & 2 \\ 0 & 2 & x-1 \end{vmatrix} = (x-1)\{(x-1)^2-4\} = (x-1)(x+1)(x-3)$$

より 固有値 $= -1, 1, 3$. よって、最大値 $= 3$. 最小値 $= -1$.

二次曲線、二次曲面の標準型 (概略) 一般の n 変数の二次式は

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n a_{ii}x_i^2 + \sum_{i < j} 2a_{ij}x_ix_j + \sum_{i=1}^n 2b_ix_i + c = [{}^t\mathbf{x} \ 1] \begin{bmatrix} A & \mathbf{b} \\ \mathbf{b} & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ 1 \end{bmatrix} = {}^t\mathbf{x}'A'\mathbf{x}', \quad A=[a_{ij}], \quad A' = \begin{bmatrix} A & \mathbf{b} \\ \mathbf{b} & c \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}' = \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ 1 \end{bmatrix}$$

と表せた。これらは A, A' の階数と符号により分類され、(二次式なので $1 \leq \text{rank } A \leq \text{rank } A'$) $n=2, 3$ のとき $F(\mathbf{x})=0$ は二次曲線、二次曲面を表す。まず、 A はある直交行列 U により tUAU が対角行列になる様 $\mathbf{x}=U\mathbf{y}$ と変換できるので、始めから A は対角行列としてよい。固有値は、正 (p 個)、負 (q 個)、0 の順に並べる。このとき

$$A' = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & b_1 \\ & \ddots & \vdots \\ & & \alpha_n & b_n \\ b_1 & \cdots & b_n & c \end{bmatrix}, \quad F(\mathbf{x}) = \alpha_1 x_1^2 + \cdots + \alpha_r x_r^2 + 2b_1 x_1 + \cdots + 2b_n x_n + c \quad (\alpha_j = 0 \ (j > r = \text{rank } A = p+q))$$

$1 \leq i \leq r=p+q$ について座標系の平行移動 $y_i = x_i + b_i/\alpha_i$ を施せば $x_1, \dots, x_r$ の一次項が消去でき、

$$F(\mathbf{x}) = \alpha_1 y_1^2 + \cdots + \alpha_r y_r^2 + 2b_{r+1}x_{r+1} + \cdots + 2b_n x_n + c' = 0$$

$\alpha_i := \sqrt{|\alpha_i|}$ とし、 y_i を改めて x_i とおき、定数項を移項すれば $F(\mathbf{x})=0$ の標準型

$$(*) \quad a_1^2 x_1^2 + \cdots + a_p^2 x_p^2 - a_{p+1}^2 x_{p+1}^2 - \cdots - a_{p+q}^2 x_{p+q}^2 + 2b_{p+q+1}x_{p+q+1} + \cdots + 2b_n x_n = c'$$

をえる。なお、必要なら A' を $-A'$ ($-F(\mathbf{x})=0$) で置き換えて行列 A の符号 $\text{sgn } A = (p, q)$ を $p \geq q$ としておくと、
 $n=2$ のとき: $r=2, \text{sgn } A=(2, 0): a_1^2 x_1^2 + a_2^2 x_2^2 = c'$. $c' > 0$ のとき **楕円**, $c'=0$ のとき一点, $c' < 0$ のとき空集合。

$r=2, \text{sgn } A=(1, 1): a_1^2 x_1^2 - a_2^2 x_2^2 = c'$. $c' \neq 0$ のとき **双曲線**, $c'=0$ のとき交わる 2 直線。

$r=1: x_1^2 + b'x_2 = c'$. $b' \neq 0$ のとき **放物線**, $b'=0$ で、 $c' > 0$ のとき平行 2 直線, $c'=0$ のとき直線, $c' < 0$ のとき空集合。

$n=3$ のとき、空集合や点、平面になる場合を除き、本来の 2 次曲面を列挙すると: ($d \neq 0, b' \neq 0$ として)

楕円面: $a_1^2 x_1^2 + a_2^2 x_2^2 + a_3^2 x_3^2 = d^2$. **一葉双曲面**: $a_1^2 x_1^2 + a_2^2 x_2^2 - a_3^2 x_3^2 = d^2$. **二葉双曲面**: $a_1^2 x_1^2 + a_2^2 x_2^2 - a_3^2 x_3^2 = -d^2$.

楕円放物面: $a_1^2 x_1^2 + a_2^2 x_2^2 = b'x_3$. **双曲放物面**: $a_1^2 x_1^2 - a_2^2 x_2^2 = b'x_3$ があり、一部が退化したものとして

楕円柱面: $a_1^2 x_1^2 + a_2^2 x_2^2 = d^2$. **楕円錐面**: $a_1^2 x_1^2 + a_2^2 x_2^2 - a_3^2 x_3^2 = 0$. **双曲柱面**: $a_1^2 x_1^2 - a_2^2 x_2^2 = d$. **放物柱面**: $x_1^2 = b'x_2$ がある。

正則標準形の極値問題への応用

滑らかな実数値関数 $y = f(\mathbf{x})$ は $\mathbf{x}=\mathbf{c}$ で $f'(\mathbf{c})=0$, かつ $f''(\mathbf{c}) > 0$ ならば極小, $f''(\mathbf{c}) < 0$ ならば極大である。このことを多変数関数に拡張することを考える。滑らかな n 変数関数 $f(x_1, \dots, x_n) = f(\mathbf{x})$ の「1 階微分」は $\left[\frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \right] = [f_{x_1}, \dots, f_{x_n}] = \text{grad } f(\mathbf{x})$ と、ベクトルで表せる。また、「2 階微分」は実対称行列

$$H(f)(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}) \right] = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(\mathbf{x}) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(\mathbf{x}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(\mathbf{x}) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{x_1 x_1} & \cdots & f_{x_1 x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{x_n x_1} & \cdots & f_{x_n x_n} \end{bmatrix}$$

(Hesse 行列 (Hessian) という) で表せ、 $f(\mathbf{x})$ の $\mathbf{x}=\mathbf{c}$ での Taylor 展開は

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{c}) + \sum_{i=1}^n f_{x_i}(\mathbf{c})(x_i - c_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n f_{x_i x_j}(\mathbf{c})(x_i - c_i)(x_j - c_j) + ((\mathbf{x}-\mathbf{c}) \text{ の高次項}) \\ &= f(\mathbf{c}) + \text{grad } f(\mathbf{c})(\mathbf{x}-\mathbf{c}) + \frac{1}{2} {}^t(\mathbf{x}-\mathbf{c})H(f)(\mathbf{c})(\mathbf{x}-\mathbf{c}) + ((\mathbf{x}-\mathbf{c}) \text{ の高次項}) \end{aligned}$$

と表される。(微積分学の教科書を参照のこと.) $\text{grad } f(\mathbf{c})=\mathbf{0}$ のとき $f(\mathbf{x})$ の高次項が無視できる位の $\mathbf{x}=\mathbf{c}$ の近

傍での様子は二次形式 ${}^t(\mathbf{x}-\mathbf{c})H(f)(\mathbf{c})(\mathbf{x}-\mathbf{c})$ によって分かる. $\mathbf{x}-\mathbf{c}$ を正則行列 P により $\mathbf{x}-\mathbf{c}=P\mathbf{y}$ と変換して, ${}^t(\mathbf{x}-\mathbf{c})H(f)(\mathbf{c})(\mathbf{x}-\mathbf{c})$ が正則標準形になる様にする (展開式における $\{x_i-c_i\}$ と $\{y_i\}$ の次数は変わらず)

$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{c}) + \frac{1}{2}{}^t(\mathbf{x}-\mathbf{c})H(f)(\mathbf{c})(\mathbf{x}-\mathbf{c}) + (\text{高次項}) = f(\mathbf{c}) + \frac{1}{2}(y_1^2 + \cdots + y_p^2 - y_{p+1}^2 - \cdots - y_{p+q}^2) + (\text{高次項})$ と表せる. 従って $f(\mathbf{x})$ の $\mathbf{x}=\mathbf{c}$ の近傍において

$${}^t(\mathbf{x}-\mathbf{c})H(f)(\mathbf{c})(\mathbf{x}-\mathbf{c}) = \begin{cases} y_1^2 + \cdots + y_n^2 & \text{即ち } H(f)(\mathbf{c}) \text{ が正値のとき極小} \\ -y_1^2 - \cdots - y_n^2 & \text{即ち } H(f)(\mathbf{c}) \text{ が負値のとき極大} \end{cases}$$

その他で $|H(f)(\mathbf{c})| \neq 0$ のときは極大でも極小でもない. ($|H(f)(\mathbf{c})| = 0$ のときは高次項を調べる.)

尚, $n=2$ のときは $H(f)(\mathbf{c}) = \begin{bmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & h \\ h & b \end{bmatrix}$ の固有値 α, β の正負は

$$\text{tr } H(f)(\mathbf{c}) = a+b = \alpha+\beta, \quad |H(f)(\mathbf{c})| = ab-h^2 = \alpha\beta$$

で分かり, α, β が 0 でなく同符号 $\Leftrightarrow \alpha\beta = ab-h^2 > 0$, このとき $\alpha, \beta > 0 \Leftrightarrow \alpha+\beta = a+b > 0 \Leftrightarrow a, b > 0$ などより

$f_{xx}f_{yy}-(f_{xy})^2 = ab-h^2 = \alpha\beta > 0$ のとき極値で, $f_{xx}=a > 0$ のとき極小, $f_{xx} < 0$ のとき極大.

$|H(f)(\mathbf{c})| \neq 0$ かつ $ab-h^2 = \alpha\beta < 0$ のときは極値でない.

補足 二次形式, 実対称行列の正値性については次の様な判定法がある.

n 次行列 $A=[a_{ij}]$ に対し $A_k := \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{bmatrix}$ ($k=1, \dots, n$) を k 次主小行列, $|A_k|$ を k 次主小行列式という.

定理 6.17 (主小行列式による正値性の判定) 二次形式 ${}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}$ が正値である. $\Leftrightarrow |A_k| > 0$ ($k=1, \dots, n$).

証明 ($\Rightarrow$) $\mathbf{x}_k = {}^t[x_1, \dots, x_k]$, $\mathbf{x}'_k = {}^t[x_1, \dots, x_k, 0, \dots, 0] = {}^t[\mathbf{x}_k, {}^t\mathbf{0}_{n-k}]$ とすると ${}^t\mathbf{x}'_k A \mathbf{x}'_k = {}^t\mathbf{x}_k A_k \mathbf{x}_k$ より A が正値なら A_k も正値. $\therefore A_k$ の固有値は全て正で (定理 6.15), その積である $|A_k|$ も正.

($\Leftarrow$) 次数 n に関する帰納法: $n=1$ のとき, $A=[a_{11}]$, $|A|=a_{11}>0$ より ${}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}=a_{11}x_1^2 > 0$ ($x_1 \neq 0$) で成立.

$n-1$ のとき成立, $\therefore A' := A_{n-1}$ は正値で, $|A'| > 0$, $|A| = |A_n| > 0$ と仮定する. ($\therefore A'$ は正則.) A を分割して,

$$A = \begin{bmatrix} A' & \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^t & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad P := \begin{bmatrix} E_{n-1} & A'^{-1}\mathbf{b} \\ \mathbf{0} & -1 \end{bmatrix} \quad \text{とおけば} \quad {}^tPAP = \begin{bmatrix} A' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & c \end{bmatrix} \quad (\text{ここで } c := a_{nn} - \mathbf{b}^t A'^{-1} \mathbf{b}).$$

$|P| = -1$ より $|A| = |{}^tPAP| = |A'|c$. $|A'| > 0$, $|A| > 0$ より $c > 0$. また $\mathbf{x} = P\mathbf{y}$, ${}^t\mathbf{y} = [{}^t\mathbf{y}' y_n]$ と変換すれば

$${}^t\mathbf{x}A\mathbf{x} = {}^t\mathbf{y}^t A P \mathbf{y} = [{}^t\mathbf{y}' y_n] \begin{bmatrix} A' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{y}' \\ y_n \end{bmatrix} = {}^t\mathbf{y}' A' \mathbf{y}' + c y_n^2 > 0 \quad (\mathbf{y} \neq \mathbf{0}) \quad (\because A' \text{ は正値})$$

系 滑らかな n 変数関数 $f(\mathbf{x})$ が $\mathbf{x}=\mathbf{c}$ で $\text{grad } f(\mathbf{c}) = \mathbf{0}$ のとき Hessian $H_f(\mathbf{c})$ の主小行列式 $|H(f)(\mathbf{c})_k|$ が全て正ならば f は $\mathbf{c}$ において極小, $|-H_k(f)(\mathbf{c})| = (-1)^k |H_k(f)(\mathbf{c})| > 0$ ($k=1, 2, \dots, n$) なら極大である.

Lagrange (ラグランジュ) の方法 二次形式の正則標準型を求める方法として, 平方完成を用いる方法がある.

[方法 1] $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + 8z^2 + 4xz + 4yz = (x+2z)^2 + y^2 + 4yz + 4z^2 = (x+2z)^2 + (y+2z)^2$ ($= x'^2 + y'^2$)

(まず, x を含む項全てについて平方完成し, y^2 の項があるので y を含む項全てについて平方完成する.) よって符号は $(2, 0)$ で, $x' = x+2z$, $y' = y+2z$, $z' = z$ と変数変換すると, (0 になる項に対応する変数は元のものを使う) 変換行列 P の逆行列が $\mathbf{x}' = P^{-1}\mathbf{x}$ より容易に求まり, 上三角行列になる:

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad {}^tP^{-1}DP^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 8 \end{bmatrix} = A$$

[方法 2] 2 乗の項がなく, 交差項のみの場合の例: $f(x, y, z) = 4xy + 4yz$.

この場合, まず $x' = x+y$, $y' = x-y$ と変換すると $4xy = x'^2 - y'^2$ より 2 乗の項が出来るので, それを平方完成する. ($x = (x'+y')/2$, $y = (x'-y')/2$ を用いる.)

$$\begin{aligned} f(x, y, z) &= 4xy + 4yz = (x'^2 - y'^2) + 2(x'-y')z = (x'+z)^2 - y'^2 - 2y'z - z^2 = (x'+z)^2 - (y'+z)^2 \\ &= (x+y+z)^2 - (x-y+z)^2 \quad (= x''^2 - y''^2) \end{aligned}$$

よって符号は $(1, -1)$ であり, 改めて $x' = (x+y+z)$, $y' = (x-y+z)$, $z' = z$ とおくと

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & -1 \\ 1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & -2 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

以上をまとめると, x_1 から順に見て, x_1^2 の項があれば x_1^2 の項と x_1 を含む交差項全てをまとめて平方完成する. (残りの項には x_1 は含まれない.) 次に, x_2^2 の項がなければ x_2^2 の項があれば x_2 を含む項全てをまとめて平方完成する. これを繰り返すと, 2 乗の項のみになるか (この場合は完成), 2 乗の項と, 2 乗の項に含まれない変数のみからなる交差項ができる. この交差項に対し上記変数変換を行ってから平方完成を繰り返せばよい. 最後に変換行列を求めて, それが正則ならば完成である.