March 29, 2011

固有値がすべて正の行列について

秋田工業高等専門学校

自然科学系　吉井 洋二

実行列

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

の固有値は、x の方程式

$$\begin{vmatrix} x-a & -b \\ -c & x-d \end{vmatrix} = 0$$

の解である。即ち、

$$(x-a)(x-d) - bc = 0$$

であり、整理して、

$$x^2 - (a+d)x + (ad - bc) = 0 \tag{1}$$

を解けばよい。

さて、(1) が実数解を持つ条件はもちろん、

$$(a+d)^2 - 4(ad - bc) \geq 0$$

即ち、

$$(a-d)^2 + 4bc \geq 0 \tag{2}$$

である。

（注）ここで $b = c$, 即ち A が対称行列 $\begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ ならば、自動的に (2) を満たすことに注意しよう！ 即ち、対称行列の固有値は必ず実数である。

では、固有値がどちらも非負（0 以上）である条件はどうだろう？
(1) の左辺を y と置いて、放物線

$$y = x^2 - (a+d)x + (ad - bc) \tag{3}$$

を考える。解が共に非負であるためには、頂点の座標が非負、y 切片も非負であることが条件だとわかる。よって条件は、(2) かつ

$$a + d \geq 0 \quad \text{かつ} \quad ad - bc \geq 0 \tag{4}$$

となる。（$\mathrm{tr} A \geq 0$ かつ $\det A \geq 0$ である。）

（注）再び $b=c$, 即ち $A=\begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix}$ が対称行列ならば、
$ad \geq b^2 \geq 0$ から、a と d のどちらかが負なら、もう一方は 0 となる。よって $a+d<0$ となってしまうので、a と d は共に非負でないとならない。従ってこの場合は、

$$a \geq 0 \quad \text{かつ} \quad d \geq 0 \quad \text{かつ} \quad \det A \geq 0 \tag{5}$$

となる。

ここで、非負を正に代えたら、条件 (4) の等号が不等号に変わるだけだが、対称行列の場合、$ad > b^2 \geq 0$ から、a と d は同符号となる。従ってこの場合は、

$$a > 0 \quad \text{かつ} \quad \det A > 0 \tag{6}$$

だけでよいこととなる。これがいわゆる**シルベスターの判定法**である。

有名な微積分への応用として、何回でも微分可能な実 2 変数関数 $z = f(x, y)$ の Hessian 行列を

$$H(x, y) = \begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{yx} & f_{yy} \end{pmatrix}$$

とし、$f(x, y)$ の臨界点 (a, b)（即ち、$\nabla f(a, b) = (0, 0)$）における対称行列

$$A := H(a, b)$$

（H の各成分に (a, b) を代入）を考える。
このとき、(a, b) で極小となるのは、A の固有値が共に正であることに同値なので、

$$f_{xx}(a, b) > 0 \quad \text{かつ} \quad \det A > 0$$

なる判定条件を得る。
（極大となるのは、固有値が共に負であることに同値なので、$f_{xx}(a, b) < 0$ かつ $\det A > 0$ なる判定条件を得る。）

3次行列で同じ考察をしてみる

実行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

の固有値は、x の方程式

$$\begin{vmatrix} x - a_{11} & -a_{12} & -a_{13} \\ -a_{21} & x - a_{22} & -a_{23} \\ -a_{31} & -a_{32} & x - a_{33} \end{vmatrix} = 0$$

の解である。これを整理すると、

$$x^3 - (\mathrm{tr} A)x^2 + (\mathrm{tr}_2 A)x - \det A = 0 \tag{7}$$

と書ける。

但し、

$$\mathrm{tr}_2 A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix}$$

である。
さて、(7) が実数解を持つ条件は？
3 次方程式の判別式を使って記述できるが、ちょっと複雑である。
(4 次以上になると、判別式は重解の判定にしか役立たない。)

そこで、A を対称行列とする：

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix}$$

線形代数の基礎を使うと、n 次対称行列の固有値は必ず実数であることが簡単に証明できる。ここに線形代数のパワーを感じるのは私だけだろうか。

さて、固有値がすべて非負である条件はどうだろう？

(7) の左辺を y と置いて、3 次曲線

$$y = x^3 - (\mathrm{tr}A)x^2 + (\mathrm{tr}_2 A)x - \det A \tag{8}$$

を考える。解がすべて非負であるためには、導関数とグラフの概形を考察することで、

$$\mathrm{tr}A,\ \mathrm{tr}_2 A,\ \det A \geq 0 \tag{9}$$

が条件となることがわかる。従って特に、すべての**主小行列式**（principal minor）が非負、即ち、

$$a_{11},\ a_{22},\ a_{33},\ \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{vmatrix},\ \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{23} & a_{33} \end{vmatrix},\ \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{13} & a_{33} \end{vmatrix},\ \det A \geq 0 \tag{10}$$

ならば (9) を満たす。実は A が対称行列であることから、2 次形式の理論を使えば、「A の固有値がすべて非負 $\Rightarrow$ (10)」も簡単に言える。従って、対称行列 A の固有値がすべて非負である条件は (10) となる。

ここで、非負を正に代えたら、条件 (10) の等号が不等号に変わるだけである。ところがシルベスターはこの条件を簡略化した。即ち、対称行列 A の固有値がすべて正である条件は、すべての**首座小行列式**（leading principal minor）が正、この場合なら、

$$a_{11}, \quad \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{vmatrix}, \quad \det A > 0 \tag{11}$$

だけでよいのである（シルベスターの判定法）!!
2 次行列の場合、この簡略化は一言で説明できたが、3 次行列では、難問と言ってよいだろう。

(注)　対称行列 A の固有値がすべて非負である条件は

$$a_{11}, \quad \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{vmatrix}, \quad \det A \geq 0$$

ではない !!　反例を挙げよ。

たとえば

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

などは対称行列で、負の固有値 -1 を持つのに、すべての首座小行列式は 0 である。

何回でも微分可能な実 3 変数関数 $z = f(x, y, z)$ の Hessian 行列を

$$H(x, y, z) = \begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} & f_{xz} \\ f_{yx} & f_{yy} & f_{yz} \\ f_{zx} & f_{zy} & f_{zz} \end{pmatrix}$$

とし、$f(x, y, z)$ の臨界点 (a, b, c) における対称行列

$$A := H(a, b, c)$$

（H の各成分に (a, b, c) を代入）を考える。
このとき、(a, b, c) で極小となるのは、A の固有値がすべて正であることに同値なので、

$$f_{xx}(a, b, c),\ \ \Delta := \begin{vmatrix} f_{xx}(a, b, c) & f_{xy}(a, b, c) \\ f_{yx}(a, b, c) & f_{yy}(a, b, c) \end{vmatrix},\ \ \det A > 0$$

なる判定条件を得る。
極大となるのは、固有値がすべて負であることに同値なので、
$-A$ の固有値がすべて正より、判定条件は

$$f_{xx}(a, b, c),\ \det A < 0 \quad \text{かつ} \quad \Delta > 0$$

となる。

Original Result

実正方行列 A の固有値がすべて実数の時、

(i) A のすべての主小行列式が非負 $\Rightarrow$ 固有値はすべて非負
(ii) A のすべての主小行列式が正 $\Rightarrow$ 固有値はすべて正

3 次行列の場合が、先に述べた (10) のことだが、ここでは対称行列を仮定していないので、たとえば (i) は、

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

に対して、

$$a_{11},\ a_{22},\ a_{33},\ \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix},\ \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix},\ \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix},\ \det A \geq 0$$

ならば A の固有値はすべて非負ということである。

但し、(i) も (ii) も逆は成立しない。

たとえば、

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

の固有値は、

$$\begin{vmatrix} x & 1 \\ -2 & x-3 \end{vmatrix} = x(x-3)+2 = x^2-3x+2 = (x-1)(x-2)$$

より、1 と 2 である（共に正）。

ところが、A の $(1,1)$ 成分は 0 なので、(ii) の逆は成立しない。

もちろん、「固有値がすべて実数」という前提条件がなければ成立しない。

たとえば、

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

の主小行列式はすべて正だが、固有値は、

$$\begin{vmatrix} x-1 & -1 \\ 1 & x-2 \end{vmatrix} = (x-1)(x-2)+1 = x^2-3x+3$$

から、判別式が $9-12<0$ となり虚数である。