V-2-2. 対角化

「固有値が等しい行列同士を相似という。」というのが、当面、最もわかりやすい行列の相似の説明ですが、***V-2-1. 相似***では以下の式が成立つ時に行列$\boldsymbol{C}$と行列$\boldsymbol{D}$を相似というと定義しました。

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{P}$$

これは、全く同じことなのです。どちらの表現が定義として厳密かということも言えませんが、わざわざ、数式として定義を表したのは、相似を使って、対角化の作業を説明するためです。定義の式の両辺に、左側から$\boldsymbol{P}$右から$\boldsymbol{P}^{-1}$をかけてみます。

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{C}\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{-1}$$

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{C}\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{D}$$

この両辺に左から P、右から P^{-1} をかけます

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{C}\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{-1}$$

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{C}\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{D}$$

$\boldsymbol{D}$が対角行列になるとき、この操作を対角化と言いますが、

$(\mathbf{P}^{-1})^{-1} = \boldsymbol{P}$なので

$$\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{Q}$$

とすると

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{Q}^{-1}$$

$$\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{Q} = \boldsymbol{D}$$

対角化の式はこの形で表すのが一般的です。行列 $\boldsymbol{C}$ に相似の行列はいくらでも考えられて無限個に存在しますが、対角化とは、適切な行列 $\boldsymbol{Q}$ を選び出して、ある行列 $\boldsymbol{C}$ に左から行列 $\boldsymbol{Q}$ の逆行列と、右から行列 $\boldsymbol{Q}$ をかけて変換して、固有値を対角因子とする対角行列 $\boldsymbol{D}$ を作ることです。

$$\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{Q} = \mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_p \end{pmatrix}$$

式 60

行列の次数としては n を使いたいのですが、n はデーターの数の意味に使うので、以下、行列の次数として p を使います。いずれにしても、このようになる $\boldsymbol{Q}$ が存在するとき、行列$\boldsymbol{C}$は対角化できます。次に問題になるのは、$\boldsymbol{Q}$の求め方です。

ここで、変換に使う行列 $\boldsymbol{Q}$ を、$\boldsymbol{Q} = (\boldsymbol{Q_1} \quad \boldsymbol{Q_2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{Q_p})$のように、ベクトルを行として並べたものだと考えます。

両辺に左から Q をかけると

$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{Q^{-1}CQ}) = \boldsymbol{Q}\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_p \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{CQ} = (\boldsymbol{Q_1} \quad \boldsymbol{Q_2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{Q_n})\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_p \end{pmatrix}$$

$$(\boldsymbol{CQ_1} \quad \boldsymbol{CQ_2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{CQ_n}) = (\lambda_1\boldsymbol{Q_1} \ \lambda_2\boldsymbol{Q_2} \cdots \lambda_n\boldsymbol{Q_p})$$

つまり、

$$\mathbf{C}\boldsymbol{Q_i} = \lambda_i\boldsymbol{Q_i}$$

Q_iはベクトルで、固有値、固有ベクトルの定義は

$$\mathrm{A}\vec{x} = \lambda\vec{x}$$

なので、Q_iはλ_iに対応する固有ベクトルです。念のために確認します。

$$\boldsymbol{Q} = (\boldsymbol{Q_1} \quad \boldsymbol{Q_2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{Q_p})$$

ですから、それぞれのベクトルを順番に並べた行列$\boldsymbol{Q}$ が、直交行列に変換する行列だということです。具体的にやってみます。

V-2-1. 相似で例示したのは以下の行列でした。

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{C} = \begin{pmatrix} 8 & 5 & 7 \\ -1 & 2 & -1 \\ -3 & -3 & -2 \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{D}$は対角行列です。行列$\boldsymbol{C}$の固有ベクトルは、

$$\begin{pmatrix} t \\ -t \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3t \\ -t \\ -t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} t \\ 0 \\ -t \end{pmatrix}$$

でした。１番目と３番目のベクトルでは$\mathrm{t} = -1$、最後のベクトルでは$\mathrm{t} = 1$とすれば

$$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

したがって、

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} -1 & 3 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

となります。この行列は私たちが最初に与えた

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

の逆関数　$\boldsymbol{P^{-1}} = \begin{pmatrix} -1 & 3 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$そのものになっています。

いまさら、やってみるまでもありませんが

$$\begin{pmatrix}1 & 2 & 1\\1 & 1 & 1\\1 & 1 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 3 & -1\\1 & -1 & 0\\0 & -1 & 1\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}-1+2+0 & 3-2-1 & -1+0+1\\-1+1+0 & 3-1-1 & -1+0+1\\-1+1+0 & 3-1-2 & -1+0+2\end{pmatrix}$$
$$=\boldsymbol{I}$$

だということは確認できます。確かにそうなっていますが、少し釈然としない、納得がいかない部分がありませんか。

それぞれの固有値に属する固有ベクトルは

$$\begin{pmatrix}t\\-t\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}3t\\-t\\-t\end{pmatrix},\begin{pmatrix}t\\0\\-t\end{pmatrix}$$

で表されて、無限に存在します。ｔは、それぞれの固有ベクトルについて勝手に決めて良いという意味ですね。それを使って、1 番目と 3 番目のベクトルでは$\mathrm{t}=-1$、最後のベクトルでは$\mathrm{t}=1$として、もともとの $\boldsymbol{P}$ と同じになるようにしたのです。ｔを適当に選べば、$\boldsymbol{P}$ になることは確かですが、どんな t を選んでも必ず、対角化させる行列になるのか、少し疑わしい気がしませんか、すくなくとも計算上どういうことになっているのか理解しないと不安で使えませんね。ではやりましょう、この疑問は、固有ベクトルは、本来、次のように書くべきだったと言っているのですね。

$$\begin{pmatrix}-a\\a\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}3b\\-b\\-b\end{pmatrix},\begin{pmatrix}-c\\0\\c\end{pmatrix}$$

したがって、

$$\boldsymbol{Q}=\begin{pmatrix}-a & 3b & -c\\a & -b & 0\\0 & -b & c\end{pmatrix}$$

まさにおっしゃる通りなので、その通りに計算してみましょう

$$\boldsymbol{Q}^T=\begin{pmatrix}-a & 3b & -c\\a & -b & 0\\0 & -b & c\end{pmatrix}^T=\begin{pmatrix}-a & a & 0\\3b & -b & -b\\-c & 0 & c\end{pmatrix}$$

$$|\boldsymbol{Q}|=\begin{vmatrix}-a & 3b & -c\\a & -b & 0\\0 & -b & c\end{vmatrix}=abc+abc-3abc=-abc$$

$$\boldsymbol{Q^{-1}}=\frac{-1}{abc}\begin{pmatrix}\begin{vmatrix}-b & -b\\0 & c\end{vmatrix} & -\begin{vmatrix}3b & -b\\-c & c\end{vmatrix} & \begin{vmatrix}3b & -b\\-c & 0\end{vmatrix}\\-\begin{vmatrix}a & 0\\0 & c\end{vmatrix} & \begin{vmatrix}-a & 0\\-c & c\end{vmatrix} & -\begin{vmatrix}-a & a\\-c & 0\end{vmatrix}\\\begin{vmatrix}a & 0\\-b & -b\end{vmatrix} & -\begin{vmatrix}-a & 0\\3b & -b\end{vmatrix} & \begin{vmatrix}-a & a\\3b & -b\end{vmatrix}\end{pmatrix}$$
$$=\frac{-1}{abc}\begin{pmatrix}-bc & -2bc & -bc\\-ac & -ac & -ac\\-ab & -ab & -2ab\end{pmatrix}'$$

$$=\begin{pmatrix} \frac{1}{a} & \frac{2}{a} & \frac{1}{a} \\ \frac{1}{b} & \frac{1}{b} & \frac{1}{b} \\ \frac{1}{c} & \frac{1}{c} & \frac{2}{c} \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{Q^{-1}CQ}$を計算します。

$$\boldsymbol{Q^{-1}CQ}=\begin{pmatrix} \frac{1}{a} & \frac{2}{a} & \frac{1}{a} \\ \frac{1}{b} & \frac{1}{b} & \frac{1}{b} \\ \frac{1}{c} & \frac{1}{c} & \frac{2}{c} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 8 & 5 & 7 \\ -1 & 2 & -1 \\ -3 & -3 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & 3b & c \\ -a & -b & 0 \\ 0 & -b & -c \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{Q^{-1}C}=\begin{pmatrix} \frac{1}{a} & \frac{2}{a} & \frac{1}{a} \\ \frac{1}{b} & \frac{1}{b} & \frac{1}{b} \\ \frac{1}{c} & \frac{1}{c} & \frac{2}{c} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 8 & 5 & 7 \\ -1 & 2 & -1 \\ -3 & -3 & -2 \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} \frac{1}{a}(8-2-3) & \frac{1}{a}(5+4-3) & \frac{1}{a}(7-2-2) \\ \frac{1}{b}(8-1-3) & \frac{1}{b}(5+2-3) & \frac{1}{b}(7-1-2) \\ \frac{1}{c}(8-1-6) & \frac{1}{c}(5+2-6) & \frac{1}{c}(7-1-4) \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} \frac{3}{a} & \frac{6}{a} & \frac{3}{a} \\ \frac{4}{b} & \frac{4}{b} & \frac{4}{b} \\ \frac{1}{c} & \frac{1}{c} & \frac{2}{c} \end{pmatrix}$$

$$(\boldsymbol{Q^{-1}C})\boldsymbol{Q}=\begin{pmatrix} \frac{3}{a} & \frac{6}{a} & \frac{3}{a} \\ \frac{4}{b} & \frac{4}{b} & \frac{4}{b} \\ \frac{1}{c} & \frac{1}{c} & \frac{2}{c} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & 3b & c \\ -a & -b & 0 \\ 0 & -b & -c \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} -3+6 & \frac{b}{a}(-9-6-3) & \frac{c}{a}(-3+0+3) \\ \frac{a}{b}(4-4+0) & (12-4-4) & \frac{c}{b}(4-4) \\ \frac{a}{c}(1-1+0) & \frac{b}{c}(3-1-2) & (1+0-2) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

このように具体的に計算してみると、a, b, cは何を選んでも計算の過程で消えてしまいます。だから、固有ベクトルであれば、何を選んでも対角化するための行列になります。

p 個の固有値を持つ p 次の行列は対角化できることわかりました。その方法も理解できました。ただし、「固有方程式が解をもたなければ、絶対に対角化ができない。」と言えるかどうかは別問題です。どんな行列でも対角化できるのかという問題はまだ残っています。
まず、対角化していないけれど固有ベクトルが直交している行列はあるし、それと相似の一般の行列を作ることもできそうです。ということは、その逆の計算もできそうです。まあ確かにそうなのですが、固有ベクトルが直交していれば、適当に回転して対角化できるから、実用的には考えれば、直交化しているだけで対角化されていないという、中途半端な状態にしなければばならない作業を考える必要はないでしょう。あるかもしれませんが、この時点で、そういう作業を想定することは筆者にはできません。これは考えなくてもよいような気がします。ここで考えなくてはならないのは、固有方程式が解をもたない場合にどうするかということです。この場合には、実数の範囲では対角化できないはずです。
そうであれば、実数の範囲で対角化できる行列とはどんなものかという説明が必要です。
確かにその通りです。でも、それは、固有方程式が実根をもたず、虚根を持つ場合のことですね。行列の取り扱い範囲を複素数にまで広げる必要があります。将来慣れてきたらそういうことを考えましょう。