V-2-3. スペクトル分解

行列演算の応用例として考えているのは、多変量解析です。多変量解析は、多項目のデータをいくつかの項目に集約して表現し、現象を単純化して把握したいという目的に使われます。

その目的のために、まず最も単純に考えそうなことは、次のようなことでしょう。
多変量的なデータが集約されて、ある行列として書かれている。この行列を、いくつかの独立した（ということは直交した）ベクトル上の点を重ね合わせたものとしてとらえられないか。
言いたいことを鮮明にするために、例を上げます。

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

については、

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

のように、直交する３つのベクトルの和として表現できています。
左辺の行列の１行１列の行列の３は、$3\times1+4\times0+1\times0$、２行２列の４は $3\times0+4\times1+1\times0$のように見ようと思えばそう見えます。もっと言えば、D が一つのデーターだとして、そのデーターを構成する要素（特性）に下の三つの単位ベクトルの長さで表現できる特性があり、

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

そのそれぞれの特性の値が、それぞれ３、４、１だったので、

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

と表現されていると考えるのです。至極当たり前のことですね。
確かに当たり前のことですが、対角行列では、行列の固有ベクトルが行列で表現される空間の座標軸と一致しているから、そういうことができるのです。下の行列では、なかなかそのような捉え方は難しいでしょう。

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

行列をベクトルを並べたものと考えると、行列全体を、「n 個のベクトルの実数倍の和」が作る空間としてとらえることが出来ますが、ベクトルが直交していないと、感覚的にどんな空間かわかりません。対角化すれば、対角化された行列は直交ベクトルの和として表す

ことができますが、対角化された行列は、もちろん元の行列ではないのだから、今のころと、上記の議論に実用的な意味はありません。

しかし、ここでわれわれは、「複雑な物が重なりあってできた行列をいくつかの成分の和に分解することができたら、個々の要素について議論することができるのになあ。」というような、ぼんやりした願望を持つことができます。このぼんやりした、あまり賢くない願望を頭の隅に置きながら、行列の演算の可能性を広げていきます。

今までの、復習を含めて

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

を対角化します。
以下にその作業を示します。
固有方程式を作り固有値を求める

$$\begin{vmatrix}2-\lambda&-2&3\\1&1-\lambda&1\\1&3&-1-\lambda\end{vmatrix}=0$$

$$(2-\lambda)(1-\lambda)(-1-\lambda)-2+9-3(2-\lambda)+2(-1-\lambda)-3(1-\lambda)=0$$

$$-\lambda^3+2\lambda^2+5\lambda-6=0$$

これを解いて

$$\lambda=-2,1,3$$

それぞれの固有値に対する固有ベクトルを求める。

$\lambda=-2$ について

$$\begin{pmatrix}2&-2&3\\1&1&1\\1&3&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=-2\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}$$

$$4x_1-2x_2+3x_3=0$$

$$x_1+3x_2+x_3=0$$

$$x_1+3x_2+x_3=0$$

これを解いて、$x_1=11x_2,\quad x_3=-14x_2$

したがって、固有ベクトルは

$$t\begin{pmatrix}11\\1\\-14\end{pmatrix}$$

$\lambda=1$ について

$$\begin{pmatrix}2&-2&3\\1&1&1\\1&3&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}$$

$$x_1-2x_2+3x_3=0$$

$$x_1+x_3=0$$

$$x_1+3x_2-2x_3=0$$

これを解いて、$x_1=-x_2, \quad x_3=x_2$

したがって、固有ベクトルは

$$t\begin{pmatrix}-1\\1\\1\end{pmatrix}$$

$\lambda=3$ について

$$\begin{pmatrix}2&-2&3\\1&1&1\\1&3&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=3\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}$$

$$-x_1-2x_2+3x_3=0$$

$$x_1-2x_2+x_3=0$$

$$x_1+3x_2-4x_3=0$$

これを解いて、$x_1=x_2=x_3$

したがって、固有ベクトルは

$$t\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$$

今まで学習した知識を使えば、

$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&-2&3\\1&1&1\\1&3&-1\end{pmatrix}$を対角行列、$\begin{pmatrix}-2&0&0\\0&1&0\\0&0&3\end{pmatrix}$にする行列 $\boldsymbol{P}$は

ベクトルをならべた行列

$$\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}11&-1&1\\1&1&1\\-14&1&1\end{pmatrix}$$

です。

念のためにこれを確認します。

$\boldsymbol{P^{-1}}$を求める。

$$|\boldsymbol{P}|=\begin{vmatrix}11&-1&1\\1&1&1\\-14&1&1\end{vmatrix}=30$$

$$\boldsymbol{P}^T=\begin{pmatrix}11&1&-14\\-1&1&1\\1&1&1\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{P^{-1}}=\frac{1}{|\boldsymbol{P}|}\begin{pmatrix}\begin{vmatrix}1&1\\1&1\end{vmatrix}&-\begin{vmatrix}-1&1\\1&1\end{vmatrix}&\begin{vmatrix}-1&1\\1&1\end{vmatrix}\\-\begin{vmatrix}1&-14\\1&1\end{vmatrix}&\begin{vmatrix}11&-14\\1&1\end{vmatrix}&-\begin{vmatrix}11&1\\1&1\end{vmatrix}\\\begin{vmatrix}1&-14\\1&1\end{vmatrix}&-\begin{vmatrix}11&-14\\-1&1\end{vmatrix}&\begin{vmatrix}11&1\\-1&1\end{vmatrix}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{30}\begin{pmatrix}0&2&-2\\-15&25&-10\\15&3&12\end{pmatrix}$$

一応、この計算にも間違いがないことを確認しておきます。

$$\boldsymbol{P^{-1}P}=\begin{pmatrix}11 & -1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ -14 & 1 & 1\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}11 & -1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ -14 & 1 & 1\end{pmatrix}=\frac{1}{30}\begin{pmatrix}0 & 2 & -2\\ -15 & 25 & -10\\ 15 & 3 & 12\end{pmatrix}\begin{pmatrix}11 & -1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ -14 & 1 & 1\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{30}\begin{pmatrix}0+2+28 & 0+2-2 & 0+2-2\\ -165+25+140 & 15+25-10 & -15+25-10\\ 165+3-168 & -15+3+12 & 15+3+12\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{30}\begin{pmatrix}30 & 0 & 0\\ 0 & 30 & 0\\ 0 & 0 & 30\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\boldsymbol{I}$$

実際に、相似の対角行列を求めてみます。

$$\boldsymbol{P^{-1}AP}=\frac{1}{30}\begin{pmatrix}0 & 2 & -2\\ -15 & 25 & -10\\ 15 & 3 & 12\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & -2 & 3\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & 3 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}11 & -1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ -14 & 1 & 1\end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{30}\begin{pmatrix}0+2-2 & 0+2-6 & 0+2+2\\ -30+25-10 & 30+25-30 & -45+25+10\\ 30+3+12 & -30+3+36 & 45+3-12\end{pmatrix}\begin{pmatrix}11 & -1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ -14 & 1 & 1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0 & -4 & 4\\ -15 & 25 & -10\\ 45 & 9 & 36\end{pmatrix}\begin{pmatrix}11 & -1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ -14 & 1 & 1\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{30}\begin{pmatrix}0-4-56 & 0-4+4 & 0-4+4\\ -165+25+140 & 15+25-10 & -15+25-10\\ 495+9-504 & -45+9+36 & 45+9+36\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{30}\begin{pmatrix}-60 & 0 & 0\\ 0 & 30 & 0\\ 0 & 0 & 90\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}-2 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & 0\\ 0 & \lambda_2 & 0\\ 0 & 0 & \lambda_3\end{pmatrix}$$

となるので、確かに$\boldsymbol{P}$は$\boldsymbol{A}$を対角化することが確認された。

話を一歩進めて、さらに、対角化の応用を説明します。

対角化された行列を

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

このように書いてみると、

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

$$\boldsymbol{P^{-1}AP}=-2\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}^T+1\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix}^T+3\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}^T$$

と変形できます。

ここで、両辺に左から$\boldsymbol{P}$、右から$\boldsymbol{P^{-1}}$をかけます。

$$\boldsymbol{PP^{-1}APP^{-1}}=\boldsymbol{P}\left(-2\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}^T+1\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix}^T+3\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}^T\right)\boldsymbol{P^{-1}}$$

$$\boldsymbol{PP^{-1}}=\boldsymbol{I}$$

で、行列計算でも分配法則は成り立つから

$$\boldsymbol{A} = -2\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}^T \boldsymbol{P^{-1}} + 1\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}^T \boldsymbol{P^{-1}} + 3\boldsymbol{P}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}^T \boldsymbol{P^{-1}}$$

$$= -2\begin{pmatrix}11 & -1 & 1\\1 & 1 & 1\\-14 & 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}^T \boldsymbol{P^{-1}} + \begin{pmatrix}11 & -1 & 1\\1 & 1 & 1\\-14 & 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}^T \boldsymbol{P^{-1}}$$

$$+ 3\begin{pmatrix}11 & -1 & 1\\1 & 1 & 1\\-14 & 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}^T \boldsymbol{P^{-1}}$$

$$= -2\begin{pmatrix}11 & 0 & 0\\1 & 0 & 0\\-14 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}^T \boldsymbol{P^{-1}} + \begin{pmatrix}0 & -1 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}^T \boldsymbol{P^{-1}} + 3\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\0 & 0 & 1\\0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}^T \boldsymbol{P^{-1}}$$

となるので、さらに計算を進めると

$$= -2\times\frac{1}{30}\begin{pmatrix}11 & 0 & 0\\1 & 0 & 0\\-14 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 2 & -2\\-15 & 25 & -10\\15 & 3 & 12\end{pmatrix} + \frac{1}{30}\begin{pmatrix}0 & -1 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 2 & -2\\-15 & 25 & -10\\15 & 3 & 12\end{pmatrix}$$

$$+3\times\frac{1}{30}\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\0 & 0 & 1\\0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 2 & -2\\-15 & 25 & -10\\15 & 3 & 12\end{pmatrix}$$

$$= -2\times\frac{1}{30}\begin{pmatrix}0 & 22 & -22\\0 & 2 & -2\\0 & -28 & 28\end{pmatrix} + \frac{1}{30}\begin{pmatrix}15 & -25 & 10\\-15 & 25 & -10\\-15 & 25 & -10\end{pmatrix} + 3\times\frac{1}{10}\begin{pmatrix}15 & 3 & 12\\15 & 3 & 12\\15 & 3 & 12\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}0+\frac{1}{2}+\frac{3}{2} & \frac{-22}{15}+\frac{-5}{6}+\frac{3}{10} & \frac{22}{15}+\frac{1}{3}+\frac{6}{5}\\ 0-\frac{1}{2}+\frac{3}{2} & -\frac{2}{15}+\frac{5}{6}+\frac{3}{10} & \frac{2}{15}-\frac{1}{3}+\frac{6}{5}\\ 0-\frac{1}{2}+\frac{3}{2} & \frac{28}{15}+\frac{5}{6}+\frac{3}{10} & -\frac{28}{15}-\frac{1}{3}+\frac{6}{5}\end{pmatrix}$$

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

となります。計算式の通り計算したら、正しい答えになったというだけのことです。式の変形に間違いがないことを計算して確認したに過ぎないと言われそうですが、見せたかったのは、

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

というところです。

つまり、

$$\boldsymbol{PA}\mathbf{P^{-1}} = \boldsymbol{\Lambda} = \begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\0 & 0 & \cdots & \lambda_n\end{pmatrix}$$

のように対角化できるとき

$$\boldsymbol{A} = \lambda_1 \boldsymbol{P} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{P}^{-1} + \lambda_2 \boldsymbol{P} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \boldsymbol{P}^{-1} + \cdots + \lambda_n \boldsymbol{P} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{P}^{-1}$$

と表せるということです。

$$\boldsymbol{A} = -2\boldsymbol{P} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T \boldsymbol{P}^{-1} + 1\boldsymbol{P} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}^T \boldsymbol{P}^{-1} + 3\boldsymbol{P} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}^T \boldsymbol{P}^{-1}$$

$$\boldsymbol{A} = \lambda_1 \boldsymbol{P} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}^T \boldsymbol{P}^{-1} + \lambda_2 \boldsymbol{P} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}^{\boldsymbol{T}} \boldsymbol{P}^{-1} + \cdots + \lambda_n \boldsymbol{P} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}^T \boldsymbol{P}^{-1}$$

右辺の各項の行列の掛け算は、単位行列とその転置行列の掛け算です。それぞれの単位行列を$\boldsymbol{e}_i$と表すと、以下のように書けます。.

$$\boldsymbol{A} = \lambda_1 \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_1}\boldsymbol{e_1}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{P}^{-1} + \lambda_2 \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_2}\boldsymbol{e_2}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{P}^{-1} + \cdots + \lambda_n \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_n}\boldsymbol{e_n}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{P}^{-1}$$

唐突ですが、ここで$\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}^{\boldsymbol{T}}$となっている場合について考えます。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &= \lambda_1 \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_1}\boldsymbol{e_1}^T\boldsymbol{P}^{-1} + \lambda_2 \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_2}\boldsymbol{e_2}^T\boldsymbol{P}^{-1} + \cdots + \lambda_n \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_n}\boldsymbol{e_n}^T\boldsymbol{P}^{-1} \\ &= \lambda_1 \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_1}\boldsymbol{e_1}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{P}^T + \lambda_2 \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_2}\boldsymbol{e_2}^T\boldsymbol{P}^T + \cdots + \lambda_n \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_n}\boldsymbol{e_n}^T\boldsymbol{P}^T \\ &= \lambda_1 \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_1}(\boldsymbol{P}\boldsymbol{e_1})^T + \lambda_2 \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_2}(\boldsymbol{P}\boldsymbol{e_2})^T + \cdots + \lambda_n \boldsymbol{P}\boldsymbol{e_n}(\boldsymbol{P}\boldsymbol{e_n})^{\boldsymbol{T}} \end{aligned}$$

二列目の式から三列目の式への変換で、$\boldsymbol{e_1}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{P}^{\boldsymbol{T}} \to (\boldsymbol{P}\boldsymbol{e_1})^T$という変形が行われていますが、行列の掛け算を転置行列は掛け算の順序が入れ替わるということで。これを感覚的の当然のことと受け入れられる人もいれば、感覚的に受け入れない人もいるでしょう。感覚的なものなので、実際に例を挙げてやってみます。i

$$\boldsymbol{C} = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} \alpha & \delta \\ \beta & \varepsilon \\ \gamma & \zeta \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{T}} = \begin{pmatrix} a & d \\ b & e \\ c & f \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{D}^{\boldsymbol{T}} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ \delta & \varepsilon & \zeta \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{C}\,\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} a\alpha + b\beta + c\gamma & a\delta + b\varepsilon + c\zeta \\ d\alpha + e\beta + f\gamma & d\delta + e\varepsilon + f\zeta \end{pmatrix}$$

$$(\boldsymbol{C}\,\boldsymbol{D})^{\boldsymbol{T}} = \begin{pmatrix} a\alpha + b\beta + c\gamma & d\alpha + e\beta + f\gamma \\ a\delta + b\varepsilon + c\zeta & d\delta + e\varepsilon + f\zeta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ \delta & \varepsilon & \zeta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & d \\ b & e \\ c & f \end{pmatrix} = \boldsymbol{D}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{C}^{\boldsymbol{T}}$$

$$\boldsymbol{D}\boldsymbol{C} = \begin{pmatrix} \alpha & \delta \\ \beta & \varepsilon \\ \gamma & \zeta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\alpha + d\delta & b\alpha + e\delta & c\alpha + f\delta \\ a\beta + d\varepsilon & b\beta + e\varepsilon & c\beta + f\varepsilon \\ a\gamma + d\zeta & b\gamma + e\zeta & c\gamma + f\zeta \end{pmatrix}$$

$$(\boldsymbol{D}\boldsymbol{C})^{\boldsymbol{T}} = \begin{pmatrix} a\alpha + d\delta & a\beta + d\varepsilon & a\gamma + d\zeta \\ b\alpha + e\delta & b\beta + e\varepsilon & b\gamma + e\zeta \\ c\alpha + f\delta & c\beta + f\varepsilon & c\gamma + f\zeta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & d \\ b & e \\ c & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ \delta & \varepsilon & \zeta \end{pmatrix} = \boldsymbol{C}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{D}^{\boldsymbol{T}}$$

このように足し感順序が入れ替わります。

$$\boldsymbol{A} = \lambda_1 \boldsymbol{Pe_1}(\boldsymbol{Pe_1})^T + \lambda_2 \boldsymbol{Pe_2}(\boldsymbol{Pe_2})^T + \cdots + \lambda_n \boldsymbol{Pe_n}(\boldsymbol{Pe_n})^T$$

具体的に $\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}$とします。

$$\boldsymbol{Pe_1} = \begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

$$(\boldsymbol{Pe_1})^T = (a \quad b \quad c)$$

$$\boldsymbol{Pe_1}(\boldsymbol{Pe_1})^T = \begin{pmatrix} a^2 & ab & c \\ ab & b^2 & bc \\ ac & bc & c^2 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{Pe_2} = \begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix}$$

$$(\boldsymbol{Pe_2})^T = (d \quad e \quad f)$$

$$\boldsymbol{Pe_2}(\boldsymbol{Pe_2})^{\boldsymbol{T}} = \begin{pmatrix} d^2 & de & df \\ de & e^2 & ef \\ df & ef & f^2 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{Pe_3} = \begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g \\ h \\ i \end{pmatrix}$$

$$(\boldsymbol{Pe_3})^T = (g \quad h \quad i)$$

$$\boldsymbol{Pe_3}(\boldsymbol{Pe_3})^T = \begin{pmatrix} g^2 & gh & gi \\ gh & h^2 & hi \\ gi & hi & i^2 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A} = \lambda_1 \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}^T + \lambda_2 \begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix}^T + \lambda_3 \begin{pmatrix} g \\ h \\ i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} g \\ h \\ i \end{pmatrix}^T$$

$\boldsymbol{Pe_1}(\boldsymbol{Pe_1})^T$はつぎのように、転置行列が元の行列と等しい行列です。

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}^T$$

このような行列を対称行列と言います。もう少し詳しく書くと、

$$\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix},$$

$$a_{ij} = a_{ji}$$

従って、f $\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}^T$ 、 $\begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d \\ e \\ f \end{pmatrix}^T$ 、 $\begin{pmatrix} g \\ h \\ i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} g \\ h \\ i \end{pmatrix}^T$ は対称行列です。対称行列の実数倍の和ですから、元の行列も対称行列です。

ここで言いたかったことは、対称行列は対称行列の和に分解できるということです。これをスペクトル分解と言います。また、対称行列を対角化する行列は転置行列が逆行列になります。

$$\boldsymbol{P^{-1}} = \boldsymbol{P^T}.$$

つぎに$\boldsymbol{P^{-1}} = \boldsymbol{P}^T$という条件がもつ幾何学的な意味を考えます。

$\boldsymbol{P^T} = \boldsymbol{P^{-1}}$ だから、

$$\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P^{-1}}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I}$$

です。２次の正方行列を例にすると

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

$$\boldsymbol{P}^T = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ということですが、これを、具体的に計算すると

$$a^2 + c^2 = 1 \qquad \text{i}$$

$$b^2 + d^2 = 1 \qquad \text{ii}$$

$$ab + cd = 0 \qquad \text{iii}$$

ということですが、ここで行列$\boldsymbol{P}$を以下のように、ベクトルを列に並べたものだと考えてみます。

$$\boldsymbol{P} = (\boldsymbol{P_1} \quad \boldsymbol{P_2})$$

$$\boldsymbol{P_1} = \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{P_2} = \begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix}$$

式 i は 行列$\boldsymbol{P_1}$の長さの二乗$|\boldsymbol{P_1}|^2$、式 ii は行列$\boldsymbol{P_2}$の長さの二乗$|\boldsymbol{P_2}|^2$. ですから、その長さが１で $\boldsymbol{P_1}$ 、$\boldsymbol{P_2}$は単位ベクトルです。また、式 iii はベクトル$\boldsymbol{P_1}$ と$\boldsymbol{P_2}$の内積です。

$$\boldsymbol{P_1}\boldsymbol{P_2} = \boldsymbol{0}$$

ですから、内積が０なので、$\boldsymbol{P_1}$ と $\boldsymbol{P_2}$は直交しています。 ３次の正方行列でも試してみます。

$$\begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a^2+d^2+g^2 & ab+de+hg & ac+fd+ig \\ ba+de+hg & b^2+e^2+h^2 & cb+ef+ih \\ ac+fd+ig & cb+ef+ih & c^2+f^2+i^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$a^2+d^2+g^2=1$$

$$b^2+e^2+h^2=1$$

$$c^2+f^2+i^2=1$$

$$ab+de+hg=0$$

$$ac+fd+ig=0$$

$$cb+ef+ih=0$$

やはり、対角化行列$\boldsymbol{P}$の要素となっている各ベクトルは、すべて単位ベクトルで互いに直交しています。 また、$\boldsymbol{P}$の構成要素となっている各ベクトルはもとのベクトルの固有ベクトルですから、対称行列は固有ベクトルが直交していて、その対角化ベクトルは $\boldsymbol{P}^{-1}=\boldsymbol{P}^{T}$となります。

念のために、直接確認します。$\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}$を行列$A$の固有ベクトルとします。.

$$\boldsymbol{Ax_1}=\lambda_1\boldsymbol{x_1} \qquad \text{i}$$

$$\boldsymbol{Ax_2}=\lambda_2\boldsymbol{x_2} \qquad \text{ii}$$

Ｉを転置します。

$$(\boldsymbol{Ax_1})^T=\lambda_1\boldsymbol{x_1}^T$$

$$\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{A}^T=\lambda_1\boldsymbol{x_1}^T \qquad \text{i'}$$

$\boldsymbol{A}$ が、対称行列ならば

$$\boldsymbol{A}^T=\boldsymbol{A}$$

これを式 i'に入れると

$$\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{A}=\lambda_1\boldsymbol{x_1}^T$$

この両辺に$\boldsymbol{x_2}$ を右から掛けます

$$\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{Ax_2}=\lambda_1\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{x_2}$$

式 ii を上の式の左辺に入れます。

$$\boldsymbol{x_1}^T\lambda_2\boldsymbol{x_2}=\lambda_1\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{x_2}$$

$$\lambda_2\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{x_2}=\lambda_1\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{x_2}$$

右辺を左辺に移項します。

$$(\lambda_2-\lambda_1)\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{x_2}=0$$

この式から

$$\lambda_2-\lambda_1=0$$

または

$$\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{x_2} = 0$$

固有方程式が重根でない場合は

$$\lambda_2 - \lambda_1 \neq 0$$

しがたって

$$\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{x_2} = 0$$

$\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{x_2}$ は内積ですから、$\boldsymbol{x_1}^T\boldsymbol{x_2}$=0 ならば、 $\boldsymbol{x_1}$ と $\boldsymbol{x_2}$ は直交していることになります。重根の場合は別に考える必要がありますが、行列の一つの列をベクトルと考えて、これに直交するベクトルを作っていくというやり方（グラム・シュミットの直交化法）で、固有ベクトルを作っていくことが出来るので、当然、重根同士も直交しています。

さらに、固有方程式が解をもたない場合についても考えなければなりませんが。その場合、解は複素数になって、与えられた空間上に固有ベクトルが存在しないことになります。行列という概念を虚数空間にまで拡張して考える必要がありますが。幸いなことに、対称行列の固有法定式は必ず実数解をもちます。もちろん、将来。必要な場合にはそれを考えなければなりません。

ここで覚えておくことは、対称行列はつぎのように、スペクトル分解できるということです。

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^T$$

$\boldsymbol{e}$は単位ベクトルを並べた行列で

$$\boldsymbol{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{\Lambda}$はラムダです。

もう少しわかりやすく書くと

$$\boldsymbol{A} = \lambda_1\boldsymbol{e_1}\boldsymbol{e_1}^T + \lambda_2\boldsymbol{e_2}\boldsymbol{e_2}^T + \cdots + \lambda_p\boldsymbol{e_p}\boldsymbol{e_p}^T$$

あるいは

$$\boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i\boldsymbol{e_i}\boldsymbol{e_i}^T$$

$\boldsymbol{e_i}$: 単位固有ベクトル

$$\boldsymbol{e_i} \perp \boldsymbol{e_j}$$

式 61

対称行列のスペクトル分解の方法は以上です。これをどのように使うかということはまだ説明していませんが、例えば、行列のべき乗を考えるときに、スペクトル分解を知っておくと便利です。それらは、別の項目で説明します。その前に、知識を確かめるために、実際のスペクトル分解の作業を行ってみます。次の対称行列をスペクトル分解します。

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 5 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

1. 固有方程式を解く

$$\begin{vmatrix} (3-\lambda) & 1 & -1 \\ 1 & (5-\lambda) & -1 \\ -1 & -1 & (3-\lambda) \end{vmatrix} = 0$$

$$(3-\lambda)(5-\lambda)(3-\lambda) + 1 + 1 - (3-\lambda) - (5-\lambda) - (3-\lambda) = 0$$

$$36 - 36\lambda + 11\lambda^2 - \lambda^3 = 0$$

$$(\lambda - 6)(\lambda - 3)(\lambda - 2) = 0$$

$$\lambda_1 = 6, \lambda_2 = 3, \lambda_3 = 2$$

2. 固有ベクトルを求める

$\lambda_1 = 6$に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 5 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 6\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$3x_1 + x_2 - x_3 = 6x_1$ i

$x_1 + 5x_2 - x_3 = 6x_2$ ii

$-x_1 - x_2 + 3x_3 = 6x_3$ iii

$-3x_1 + x_2 - x_3 = 0$ i'

$x_1 - x_2 - x_3 = 0$ ii'

$-x_1 - x_2 - 3x_3 = 0$ iii'

$-2x_1 - 2x_3 = 0$ i'+ii'

$-2x_2 - 4x_3 = 0$ ii'+iii'

$$x_1 = -x_3$$

$$x_2 = -2x_3$$

$$\boldsymbol{e_1} = \mathrm{t}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$\lambda_2 = 3$に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 5 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 3\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$3x_1 + x_2 - x_3 = 3x_1$ i

$x_1 + 5x_2 - x_3 = 3x_2$ ii

$-x_1 - x_2 + 3x_3 = 3x_3$ iii

$x_2 - x_3 = 0$ i'

$x_1 + 2x_2 - x_3 = 0$ ii'

$-x_1 - x_2 = 0$ iii'

$$x_1 = -x_2$$

$$x_2 = x_3$$

$$\boldsymbol{e_2} = \mathrm{t}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$\lambda_1 = 2$に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 5 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$3x_1 + x_2 - x_3 = 2x_1 \qquad \mathrm{i}$$

$$x_1 + 5x_2 - x_3 = 2x_2 \qquad \mathrm{ii}$$

$$-x_1 - x_2 + 3x_3 = 2x_3 \qquad \mathrm{iii}$$

$$x_1 + x_2 - x_3 = 0 \qquad \mathrm{i'}$$

$$x_1 + 3x_2 - x_3 = 0 \qquad \mathrm{ii'}$$

$$-x_1 - x_2 + x_3 = 0 \qquad \mathrm{iii'}$$

$$-2x_2 = 0 \qquad \mathrm{i'} - \mathrm{ii'}$$

$$x_2 = 0$$

$$x_1 - x_3 = 0$$

$$x_1 = x_3$$

$$\boldsymbol{e_3} = \mathrm{t}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

単位ベクトル化する。

$$\boldsymbol{e_1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{-1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e_2} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \boldsymbol{e_3} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

これらが直交していることは、自分で確かめてください（内積が０になっています。）

スペクトル分解の結果

$$\boldsymbol{A} = 6\boldsymbol{e_1}\boldsymbol{e_1}^T + 3\boldsymbol{e_2}\boldsymbol{e_2}^{\boldsymbol{T}} + 2\boldsymbol{e_n}\boldsymbol{e_n}^T$$

$$\boldsymbol{A} = 6\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{-1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{-1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}^T + 3\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}^T + 2\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}^T$$

確認

右辺第１項

$$6\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\\ \frac{2}{\sqrt{6}}\\ \frac{-1}{\sqrt{6}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\\ \frac{2}{\sqrt{6}}\\ \frac{-1}{\sqrt{6}}\end{pmatrix}^T=6\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\\ \frac{2}{\sqrt{6}}\\ \frac{-1}{\sqrt{6}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{6}}\end{pmatrix}$$

$$=6\begin{pmatrix}\frac{1}{6} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{6}\\ \frac{1}{3} & \frac{4}{6} & -\frac{1}{3}\\ -\frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 2 & -1\\ 2 & 4 & -2\\ -1 & -2 & 1\end{pmatrix}$$

第２項

$$3\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{-1}{\sqrt{3}}\\ \frac{-1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{-1}{\sqrt{3}}\\ \frac{-1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}^T=3\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

$$3\begin{pmatrix}\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3}\\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3}\\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & -1 & -1\\ -1 & 1 & 1\\ -1 & 1 & 1\end{pmatrix}$$

第３項

$$2\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}^T=2\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$

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

右辺の和

$$\begin{pmatrix}1 & 2 & -1\\ 2 & 4 & -2\\ -1 & -2 & 1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1 & -1 & -1\\ -1 & 1 & 1\\ -1 & 1 & 1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3 & 1 & -1\\ 1 & 5 & -1\\ -1 & -1 & 3\end{pmatrix}$$

確かに、元の対称行列を対称行列の和で表すことが出来ました。ついでに、もう一つやっておきます。

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 1 & 5 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} 9+1+1 & 3+5+1 & -3-1-3 \\ 3+5+1 & 1+25+1 & -1-5-3 \\ -3-1-3 & -1-5-3 & 1+1+9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 & 9 & -7 \\ 9 & 27 & -9 \\ -7 & -9 & 11 \end{pmatrix}$$

$$6^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} & \frac{4}{6} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix} + 3^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} + 2^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 6 & 12 & -6 \\ 12 & 24 & -12 \\ -6 & -12 & 6 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 3 & -3 & -3 \\ -3 & 3 & 3 \\ -3 & 3 & 3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 11 & 9 & -7 \\ 9 & 27 & -9 \\ -7 & -9 & 11 \end{pmatrix}$$

確かに

$$\boldsymbol{A}^2 = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i{}^2 \boldsymbol{e_i} \boldsymbol{e_i}^T$$

となっています。一般に

$$\boldsymbol{A}^m = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i{}^m \boldsymbol{e_i} \boldsymbol{e_i}^T$$

です。これもスペクトル分解の応用例です。

疑似スペクトル分解

上記がスペクトル分解の説明です。厳密にはスペクトル分解は対称行列を対称行列の和として表すことです。しかし、行列のべき乗の簡便法としてのみ、スペクトル分解を考えるのであれば、非対称行列でも同じような計算法を考えることが出来ます。著者はこれが何という名前か知りませんが、とりあえず疑似スペクトル分析と呼んでいます。

非対称行列$\boldsymbol{A}$について考えます。非対称行列でも対角化行列$\boldsymbol{P}$が存在すれば次のように対角化できます。

$$\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

両辺に左から$\boldsymbol{P}$、右から$\boldsymbol{P}^{-1}$を掛けます。

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^{-1}$$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^{-1}$$

ここで$\boldsymbol{A}$のm乗について考えます。

$$\boldsymbol{A}^m = \underbrace{\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^{-1}\cdots\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^{-1}}_{m\text{個の}\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^{-1}}$$

$$\boldsymbol{A}^m = \boldsymbol{P\Lambda I\Lambda I}\cdots\boldsymbol{I\Lambda P}^{-1}$$
$$\boldsymbol{A}^m = \boldsymbol{P\Lambda^m P}^{-1}$$
となるので、
$$\boldsymbol{A}^m = \boldsymbol{P}\begin{pmatrix} {\lambda_1}^m & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & {\lambda_2}^m & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & {\lambda_n}^m \end{pmatrix}\boldsymbol{P}^{-1}$$
対称行列でなくても対角化可能であれば、このようにべき乗を計算することが出来ます。
$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P\Lambda P}^{-1}$に戻って、

$\boldsymbol{P} := \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n1} & p_{n2} & \cdots & p_{nn} \end{pmatrix}$ 、 $\boldsymbol{P}^{-1} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix}$とします。

$$\begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n1} & p_{n2} & \cdots & p_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \lambda_1 p_{11} & \lambda_2 p_{12} & \cdots & \lambda_n p_{1n} \\ \lambda_1 p_{21} & \lambda_2 p_{22} & \cdots & \lambda_n p_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1 p_{n1} & \lambda_2 p_{n2} & \cdots & \lambda_n p_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \lambda_1 p_{11}q_{11} + \lambda_2 p_{12}q_{21} + \cdots + \lambda_n p_{1n}q_{n1} & \lambda_1 p_{11}q_{12} + \lambda_2 p_{12}q_{22} + \cdots + \lambda_n p_{1n}q_{n2} & \cdots & \lambda_1 p_{11}q_{1n} + \lambda_2 p_{12}q_{2n} + \cdots + \lambda_n p_{1n}q_{nn} \\ \lambda_1 p_{21}q_{11} + \lambda_2 p_{22}q_{21} + \cdots + \lambda_n p_{2n}q_{n1} & \lambda_1 p_{21}q_{12} + \lambda_2 p_{22}q_{22} + \cdots + \lambda_n p_{2n}q_{n2} & \cdots & \lambda_1 p_{21}q_{1n} + \lambda_2 p_{22}q_{2n} + \cdots + \lambda_n p_{2n}q_{nn} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1 p_{n1}q_{11} + \lambda_2 p_{n2}q_{21} + \cdots + \lambda_n p_{nn}q_{n1} & \lambda_1 p_{n1}q_{12} + \lambda_2 p_{n2}q_{22} + \cdots + \lambda_n p_{nn}q_{n2} & \cdots & \lambda_1 p_{n1}q_{1n} + \lambda_2 p_{n2}q_{2n} + \cdots + \lambda_n p_{nn}q_{nn} \end{pmatrix}$$
$$= \lambda_1\begin{pmatrix} p_{11}q_{11} & p_{11}q_{12} & \cdots & p_{11}q_{1n} \\ p_{21}q_{11} & p_{21}q_{12} & \cdots & p_{21}q_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n1}q_{11} & p_{n1}q_{12} & \cdots & p_{n1}q_{1n} \end{pmatrix} + \lambda_2\begin{pmatrix} p_{12}q_{21} & p_{12}q_{22} & \cdots & p_{12}q_{2n} \\ p_{22}q_{21} & p_{22}q_{22} & \cdots & p_{22}q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n2}q_{21} & p_{n2}q_{22} & \cdots & p_{n2}q_{2n} \end{pmatrix} + \cdots + \lambda_n\begin{pmatrix} p_{1n}q_{n1} & p_{1n}q_{n2} & \cdots & p_{1n}q_{nn} \\ p_{2n}q_{n1} & p_{2n}q_{n2} & \cdots & p_{2n}q_{nn} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{nn}q_{n1} & p_{nn}q_{n2} & \cdots & p_{nn}q_{nn} \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} p_{11}q_{11} & p_{11}q_{12} & \cdots & p_{11}q_{1n} \\ p_{21}q_{11} & p_{21}q_{12} & \cdots & p_{21}q_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n1}q_{11} & p_{n1}q_{12} & \cdots & p_{n1}q_{1n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ p_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n1} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} p_{12}q_{21} & p_{12}q_{22} & \cdots & p_{12}q_{2n} \\ p_{22}q_{21} & p_{22}q_{22} & \cdots & p_{22}q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n2}q_{21} & p_{n2}q_{22} & \cdots & p_{n2}q_{2n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & p_{12} & \cdots & 0 \\ 0 & p_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & p_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} p_{1n}q_{n1} & p_{1n}q_{n2} & \cdots & p_{1n}q_{nn} \\ p_{2n}q_{n1} & p_{2n}q_{n2} & \cdots & p_{2n}q_{nn} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{nn}q_{n1} & p_{nn}q_{n2} & \cdots & p_{nn}q_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & p_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & p_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & p_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix}$$
$$\therefore \boldsymbol{A} = \lambda_1\begin{pmatrix} p_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ p_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n1} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix} + \lambda_2\begin{pmatrix} 0 & p_{12} & \cdots & 0 \\ 0 & p_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & p_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix} + \cdots$$
$$+ \lambda_n\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & p_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & p_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & p_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n1} & q_{n2} & \cdots & q_{nn} \end{pmatrix}$$

これを疑似スペクトル分析とします。
例を挙げて計算してみます。V-2-2. 対角化で使った行列を使います。

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

固有ベクトル

$$\lambda=4,3,1$$

固有ベクトルを求めます。実際には、単位ベクトルにする必要はないのですが、ここでは、単位ベクトルにしておきます。

$$\boldsymbol{P}=\begin{pmatrix}\frac{3}{\sqrt{11}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{11}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{11}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{P^{-1}}=\begin{pmatrix}\sqrt{11} & \sqrt{11} & \sqrt{11}\\ -\sqrt{2} & -2\sqrt{2} & -\sqrt{2}\\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & -2\sqrt{2}\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{P_1}=\begin{pmatrix}\frac{3}{\sqrt{11}} & 0 & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{11}} & 0 & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{11}} & 0 & 0\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{P_2}=\begin{pmatrix}0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{P_3}=\begin{pmatrix}0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P_1}+\boldsymbol{P_2}+\boldsymbol{P_3}$$

$$\boldsymbol{P_1P^{-1}}=\begin{pmatrix}\frac{3}{\sqrt{11}} & 0 & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{11}} & 0 & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{11}} & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{11} & \sqrt{11} & \sqrt{11}\\ -\sqrt{2} & -2\sqrt{2} & -\sqrt{2}\\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & -2\sqrt{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3 & 3 & 3\\ -1 & -1 & -1\\ -1 & -1 & -1\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{P_2P^{-1}}=\begin{pmatrix}0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{11} & \sqrt{11} & \sqrt{11}\\ -\sqrt{2} & -2\sqrt{2} & -\sqrt{2}\\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & -2\sqrt{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1 & -2 & -1\\ 1 & 2 & 1\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{P_3P^{-1}}=\begin{pmatrix}0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{11} & \sqrt{11} & \sqrt{11}\\ -\sqrt{2} & -2\sqrt{2} & -\sqrt{2}\\ -\sqrt{2} & -\sqrt{2} & -2\sqrt{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1 & -1 & -2\\ 0 & 0 & 0\\ 1 & 1 & 2\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A} = 3\boldsymbol{P_1}\boldsymbol{P^{-1}} + 4\boldsymbol{P_2}\boldsymbol{P^{-1}} + 1\boldsymbol{P_3}\boldsymbol{P^{-1}}$$

確認します。

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

$$3\boldsymbol{P_1}\boldsymbol{Q} + 4\boldsymbol{P_2}\boldsymbol{Q} + 1\boldsymbol{P_3}\boldsymbol{Q}$$

$$= 4\begin{pmatrix} 3 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} + 3\begin{pmatrix} -1 & -2 & -1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + +1\begin{pmatrix} -1 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 12-3-1 & 12-6-1 & 12-3-2 \\ -4+3+0 & -4+6+0 & -4+3+0 \\ -4+0+1 & -4+0+1 & -4+0+2 \end{pmatrix}$$

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

$$\boldsymbol{A^2} = \begin{pmatrix} 8 & 5 & 7 \\ -1 & 2 & -1 \\ -3 & -3 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 8 & 5 & 7 \\ -1 & 2 & -1 \\ -3 & -3 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 64-5-21 & 40+10-21 & 56-5-14 \\ -8-2+3 & -5+4+3 & -7-2+2 \\ -24+3+6 & -15-6+6 & -21+3+4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 38 & 29 & 37 \\ -7 & 2 & -7 \\ -15 & -15 & -14 \end{pmatrix}$$

$$4^2\boldsymbol{P_1}\boldsymbol{Q} + 3^2\boldsymbol{P_2}\boldsymbol{Q} + 1^2\boldsymbol{P_3}\boldsymbol{Q}$$

$$= 16\begin{pmatrix} 3 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} + 9\begin{pmatrix} -1 & -2 & -1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + 1\begin{pmatrix} -1 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 48-9-1 & 48-18-1 & 48-9-2 \\ -16+9+0 & -16+18+0 & -16+9+0 \\ -16+0+1 & -16+0+1 & -16+0+2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 38 & 29 & 37 \\ -7 & 2 & -7 \\ -15 & -15 & -14 \end{pmatrix}$$

はたして、この計算が効率的かどうかはわかりませんが、以下の式ように、スペクトル分解と似たようなことが出来ます。

$$\boldsymbol{A}^m = \sum_{\boldsymbol{k=1}}^{\boldsymbol{n}} {\lambda_k}^m \boldsymbol{P_k}\boldsymbol{P^{-1}}$$