基礎数理　室田

行列の正定値性

1．定義　対称行列 A が**半正定値** (positive semidefinite) であるとは，

$$\text{任意のベクトル } x \text{ に対して } x^\top Ax \geq 0 \tag{1}$$

という条件を満たすことを言う．この条件は A のすべての固有値が非負であることと等価である．また，上の不等号で等号を除外した条件

$$\text{任意のベクトル } x \neq \mathbf{0} \text{ に対して } x^\top Ax > 0 \tag{2}$$

を満たすとき，A は**正定値** (positive definite) であると言う．正定値であることはすべての固有値が正であることと等価である．

2．判定条件　(半) 正定値性の判定条件を挙げる．対称行列 A の行番号集合 (=列番号集合) を $\{1,\ldots,n\}$ とする．A の部分行列 (小行列) で行番号集合が I，列番号集合が J であるものを $A[I,J]$ と表すとき，$I=J$ である小行列を A の**主小行列**と呼び，その行列式を**主小行列式** (principal minor) と呼ぶ．このとき，

$$A \text{ が半正定値} \iff A \text{ の任意の主小行列式} \geq 0 \tag{3}$$

$$A \text{ が正定値} \iff A \text{ の任意の主小行列式} > 0 \tag{4}$$

が成り立つ．さらに，行番号集合が $I=\{1,\ldots,k\}$ $(k \leq n)$ の形の主小行列を**首座小行列**と呼び，その行列式を**首座小行列式** (leading principal minor) と呼ぶ (首座小行列の概念は A の行番号のつけ方に依存することに注意)．このとき，

$$A \text{ が正定値} \iff A \text{ の任意の首座小行列式} > 0 \tag{5}$$

も成り立つ．しかし

$$\times\times \qquad A \text{ が半正定値} \iff A \text{ の任意の首座小行列式} \geq 0 \qquad \times\times \tag{6}$$

は成り立たない（$\Rightarrow$ は成り立つが，$\Leftarrow$ は駄目; 例は $\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$）．主小行列式は 2^n 個，首座小行列式は n 個あることに注意．なお，正定値性，半正定値性は Gauss の消去法と同様の掃出し演算により，$\mathrm{O}(n^3)$ 回の四則演算で判定できる．

3．例　次の行列は半正定値.

・分散・共分散行列： $a_{ij} = E[(X_i - m_i)(X_j - m_j)]$ （ただし $m_i = E[X_i]$）

・モーメント行列： $a_{ij} = E[X^{i+j-2}]$

・確率分布の特性関数（＝密度関数のフーリエ変換）を $\varphi(t)$ として $a_{ij} = \varphi(t_i - t_j)$

・力学系（ばね系やトラスなどの構造物）の質量行列 M と剛性行列 K

・ラプラシアン $\Delta = \displaystyle\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ の離散近似の符号を変えたもの

(境界条件が Dirichlet でも Neumann でも)

以上 (2007-01-20)