

対称行列の対角化

Shane Kelly

2026年1月4日

概要

(実) 対称行列が直交行列によって対角化できることの証明を3通り与える。

1

第1の証明は中間値の定理を用いる。また、矢印行列 (arrowhead matrix) では行列式を明示的に計算できることを用いる。

定義 1. n 次正方行列 $A = [a_{ij}]$ が矢印行列であるとは、第1行・第1列・対角成分以外がすべて0であることをいう。すなわち、次の形である：

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\ a_{21} & a_{22} & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ a_{n-1,1} & & & a_{n-1,n-1} & \\ a_{n,1} & & & & a_{n,n} \end{pmatrix} \quad (1)$$

ここで空欄はすべて0である。

補題 2. 式(1)の形の矢印行列 A をとる。 $2 \leq i \leq n$ のすべてで $a_{ii} \neq 0$ と仮定する。このとき

$$\det A = \left(a_{11} - \sum_{j=2}^n \frac{a_{nj}a_{jn}}{a_{jj}} \right) \left(\prod_{j=2}^n a_{jj} \right)$$

が成り立つ。

証明.

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}}_A \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{-a_{21}}{a_{22}} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{-a_{n1}}{a_{nn}} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}}_{\det=1} = \begin{pmatrix} a_{11} - \sum_{j=2}^n \frac{a_{nj}a_{jn}}{a_{jj}} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

□

定理 3. $n \geq 1$ とし, A を n 次対称行列とする. 次の 2 つの命題を考える.

(Eig.) $_n$ A は少なくとも 1 つの固有値をもつ.

(Diag.) $_n$ ある直交行列 P が存在して $P^{-1}AP$ は対角行列である.

すると,

- (a) (Eig.) $_n \wedge$ (Diag.) $_{n-1} \implies$ (Diag.) $_n$,
- (b) (Diag.) $_n \implies$ (Eig.) $_{n+1}$, 特に,
- (c) (Diag.) $_n$ はすべての $n \geq 1$ で成り立つ.

注意 4. 0 次正方行列は ($1 \leq i \neq j \leq 0$ となる成分が存在しないので) 対角行列とみなせる. したがって (Diag.) $_0$ は意味を持ち, 真である. しかし, $\mathbb{R}^0 = \{0\}$ には零でないベクトルが存在しないので, 0 次正方行列は固有値をもたない. よって (Eig.) $_0$ は偽である. (c) の帰納法ステップでは $n \geq 2$ なので, (a) の $n = 1$ の場合は無視してよい.

証明. (a) まず (Eig.) $_n \wedge$ (Diag.) $_{n-1} \implies$ (Diag.) $_n$ を示す. 仮定 (Eig.) $_n$ より, 固有値 λ をもつ固有ベクトル v を第 1 列にもつ直交行列 $Q = [v, x_2, \dots, x_n]$ を取れる. すると,

$$Q^{-1}AQ = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}$$

が成り立つ. ここで B は $(n-1)$ 次正方対称行列である. 仮定 (Diag.) $_{n-1}$ より, $D = R^{-1}BR$ は対角行列である $(n-1)$ 次正方直交行列 R が存在する. 2 つの直交行列の積 $P = Q \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R \end{bmatrix}$ も直交行列であり,

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R \end{bmatrix}^{-1}Q^{-1}AQ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix}$$

は対角行列なので, A について (Diag.) $_n$ が成り立つ.

(b) 次に (Diag.) $_n \implies$ (Eig.) $_{n+1}$ を示す. A を $(n+1)$ 次正方対称行列とし, A の第 (1, 1) 小行列を A_1 として

$$A = \begin{bmatrix} d_0 & t_b \\ b & A_1 \end{bmatrix}$$

と書ける. ここで, b は列ベクトルである. 仮定 (Diag.) $_n$ より A_1 は直交行列 Q_1 で対角化できる. 次の直交行列を考える:

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q_1 \end{bmatrix}.$$

講義の定理 3.16 より^{*1}, A の固有値と $Q^{-1}AQ$ の固有値は一致する. したがって A を $Q^{-1}AQ$ に

^{*1} 次の等式が成り立つからである: $\det(A-tE) = 1 \cdot \det(A-tE) \cdot 1 = \det Q^{-1} \det(A-tE) \det Q = \det(Q^{-1}(A-tE)Q) = \det(Q^{-1}AQ - Q^{-1}tEQ) = \det(Q^{-1}AQ - tE)$.

置き換えれば, A は式 (1) の形の矢印行列であると仮定してよい. あとは, 対称矢印行列

$$\begin{pmatrix} d_0-t & b_1 & \dots & b_n \\ b_1 & d_1-t & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_n & 0 & \dots & d_n-t \end{pmatrix} \quad (2)$$

の行列式が, ある $t \in \mathbb{R}$ で 0 となることを示せばよい. $1 \leq i \leq n$ について d_i-t は $\mathbb{R} \setminus \{d_1, \dots, d_n\}$ 上で可逆なので, 補題 2 よりそのような t では行列式は

$$\left((d_0-t) - \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{d_i-t} \right) (d_1-t)(d_2-t) \dots (d_n-t) \quad (3)$$

となる. 式 (3) が, ある $t \in \mathbb{R} \setminus \{d_1, \dots, d_n\}$ で 0 となることは, 下記の式 (4) が, ある $t \in \mathbb{R} \setminus \{d_1, \dots, d_n\}$ で 0 となることと同値である:

$$f(t) = (d_0-t) - \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{d_i-t} \quad (4)$$

式 (4) を観察すると

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = -\infty \quad \text{かつ} \quad \lim_{t \rightarrow d_m^+} f(t) = \infty$$

が分かる. ここで, $d_m = \max\{d_1, \dots, d_n\}$ とする. したがって 中間値の定理 より, 連続関数 (4) は (d_m, ∞) のどこかで 0 となる. よって A は少なくとも 1 つの固有値をもつ.

(c) 最後に, (Diag.)₁ と (Eig.)₁ はいずれも真であることが気づく. 以上より帰納法で, すべての $n \geq 1$ について (Eig.)_n と (Diag.)_n が成り立つ. 具体的には,

$$(\text{Eig.})_{n-1} \wedge (\text{Diag.})_{n-1} \xrightarrow{(b)} (\text{Eig.})_n \wedge (\text{Diag.})_{n-1} \xrightarrow{(a)} (\text{Eig.})_n \wedge (\text{Diag.})_n.$$

□

2

第 2 の証明は複素共役・三角化・代数学の基本定理を用いる.

定理 5. A を n 次正方実対称行列とする. すなわち, A の成分がすべて実数である. このとき, n 次多項式 $\varphi_A(t) = \det(A - tE)$ の複素根はすべて実数である. 特に, A は直交行列により対角化できる.

証明. $\lambda \in \mathbb{C}$ が $\varphi_A(\lambda) = 0$ を満たすとする. このとき複素行列 $A - \lambda E$ の行列式は 0 なので, 対応する \mathbb{C} -線形写像 $T_{A-\lambda E} : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$; $x \mapsto (A - \lambda E)x$ は非自明な核をもつ. すなわち, $Ax = \lambda x$

を満たす $0 \neq x \in \mathbb{C}^n$ が存在する. 複素共役 ${}^t\bar{x} = (\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n)$ を用いると, 次の計算より $\lambda \in \mathbb{R}$ が従う :

$$\bar{\lambda}({}^t\bar{x}x) \stackrel{(*)}{=} \overline{\lambda({}^t\bar{x}x)} = \overline{{}^t\bar{x}\lambda x} = \overline{{}^t\bar{x}Ax} \stackrel{(**)}{=} {}^t x A \bar{x} = {}^t({}^t x A \bar{x}) \stackrel{(***)}{=} {}^t\bar{x}Ax = {}^t\bar{x}\lambda x = \lambda({}^t\bar{x}x)$$

ここで $(*)$ は ${}^t\bar{x}x$ が実数であること, $(**)$ は A が実行列であること, $(***)$ は A が対称であることによる. したがって, n 次多項式 $\varphi_A(t)$ の複素根はすべて実数である.

最後に, n 次正方行列 A は (重複度込みで) n 個の固有値をもつので, 講義の定理 4.2 より直交行列 P が存在して tPAP は三角行列となる. さらに A が対称なので tPAP も対称であり, 対称な三角行列は対角行列である. \square

3

以下の資料（第3の証明・極値定理の付録）は
授業の範囲外で、参考用です。

第3の証明は微積分と極値定理を用いる。用いる形は、1年次の数学で必ずしも扱われないことがあるので、後で自己完結的に説明する。証明では $V \subseteq \mathbb{R}^n$ の直交補

$$V^\perp = \{w \in \mathbb{R}^n \mid {}^t w v = 0 \ \forall v \in V\}$$

および v の張る部分空間

$$\langle v \rangle = \{av \mid a \in \mathbb{R}\}$$

を用いる。補題7より $(V^\perp)^\perp = V$ である (\mathbb{R}^n の次元は有限であるから)。

定理 6. A を n 次正方対称行列とする。このとき A は少なくとも 1つの実固有値をもつ。したがって任意の対称行列は直交行列により対角化できる。

証明。単位球面上で $f : x \mapsto {}^t x A x$ を考える。

$$S^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid {}^t x x = 1\}.$$

S^{n-1} はコンパクトであり（定理10）、また $f : S^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}$ は連続である（演習13）から、最大値定理（定理14）により f は最大値 M をとる。すなわち、ある $x \in S^{n-1}$ が存在して $f(x) = M$ である。

x に直交する任意の単位ベクトル $y \in S^{n-1} \cap \langle x \rangle^\perp$ を取る。 $\varepsilon \in \mathbb{R}$ に対し、下記の図のとおり、摂動したベクトル v_ε を

$$v_\varepsilon := \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon^2}}(x + \varepsilon y) \in S^{n-1}$$

で定める。 y を固定すると、次の新しい関数が定まる：

$$g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}; \quad \varepsilon \mapsto g(\varepsilon) := f(v_\varepsilon).$$

この g は $v_\varepsilon = x$ のとき、すなわち $\varepsilon = 0$ のとき、最大値をとる。したがって $g'(0) = 0$ である。 g を

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon^2}}(x + \varepsilon y)^t A \frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon^2}}(x + \varepsilon y) = \frac{c_0 + c_1 \varepsilon + c_2 \varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2}$$

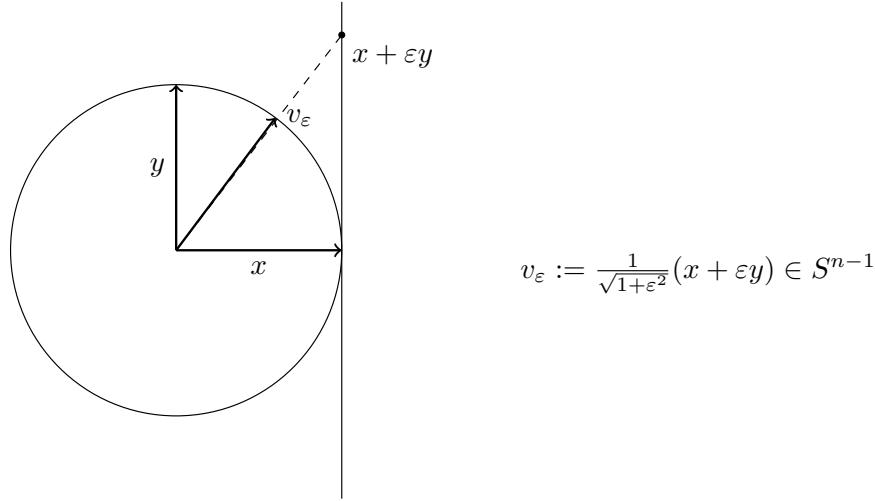
と書く。ここで $c_0 = {}^t x A x$, $c_1 = {}^t y A x + {}^t x A y$, $c_2 = {}^t y A y$ である。右端の式を微分すると

$$0 = g'(0) = c_1 = {}^t y A x + {}^t x A y \stackrel{A \text{ が対称}}{=} 2 {}^t y A x$$

を得る。すなわち $Ax \in \langle 2y \rangle^\perp = \langle y \rangle^\perp$ である。これは任意の $y \in \langle x \rangle^\perp$ について成り立つので、

$$Ax \in \{y \mid y \in \langle x \rangle^\perp\}^\perp = (\langle x \rangle^\perp)^\perp \stackrel{\text{Lemma 7}}{=} \langle x \rangle$$

図 1



と従う. よってある $\lambda \in \mathbb{R}$ が存在して $Ax = \lambda x$. 言い換えると x は固有ベクトルである.

以上を用いて, 最後の主張を証明する. A が対称であるとする. このとき A は少なくとも 1 つの固有ベクトル x_1 (固有値 λ_1) をもつ. 第一列が x_1 である直交行列^{*2}

$$P_1 = [x_1 \ v_2 \ \dots \ v_n]$$

を取る. すると

$$P_1^{-1}AP_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & A_1 \end{pmatrix}$$

となり, ここで A_1 は $n-1$ 次対称行列である. よって A_1 も固有ベクトル x_2 (固有値 λ_2) をもつ. 第一列が x_2 である直交行列

$$P_2 = [x_2 \ w_2 \ \dots \ w_{n-1}]$$

を取る. このとき

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P_2 \end{pmatrix}^{-1} P_1^{-1}AP_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & A_2 \end{pmatrix}$$

を得る. ここで A_2 は $n-2$ 次対称行列である. この手順をさらに $n-3$ 回繰り返すと, A は直交行列の積によって対角化される. 直交行列の積は直交行列なので, 結局 A はある直交行列によって対角化される. \square

補題 7. 任意の部分空間 $V \subseteq \mathbb{R}^n$ について $(V^\perp)^\perp = V$ が成り立つ.

証明. $(-)^{\perp}$ の定義から $V \subseteq (V^\perp)^\perp$ は自明なので, $\dim V = \dim(V^\perp)^\perp$ を示せばよい. V の基底を行ベクトルにもつ $k \times n$ 行列 A を取る. このとき

$$V^\perp = \ker(T_A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^k; x \mapsto Ax).$$

^{*2} 例えば, x_1 を \mathbb{R}^n の基底に延長し, それに Gram-Schmidt の正規直交化を施せばよい.

A の行は独立なので、ある小行列式が 0 でない。したがって T_A は全射であり、

$$\begin{aligned}\dim V^\perp &= \dim \ker T_A = \dim \mathbb{R}^n - \dim \text{im } T_A \\ &= n - k \\ &= \dim \mathbb{R}^n - \dim V.\end{aligned}$$

同様に、

$$\dim(V^\perp)^\perp = \dim \mathbb{R}^n - \dim V^\perp = n - (n - k) = k = \dim V$$

□

付録. 極値定理

定義 8. $X \subseteq \mathbb{R}^n$ を部分集合とする. X がコンパクトであるとは, 任意の列 $\{x_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subseteq X$ が収束部分列をもつことをいう. すなわち, ある $i_0 < i_1 < i_2 < \dots \in \mathbb{N}$ と $x \in X$ が存在して $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x - x_{i_n}\| = 0$ となること.

例 9. $a < b \in \mathbb{R} \cup \{-\infty, \infty\}$ に対し, $\{t \in \mathbb{R} \mid a < t < b\}$ はコンパクトではない.

定理 10.

1. 任意の $a < b \in \mathbb{R}$ について, $[a, b] = \{t \in \mathbb{R} \mid a \leq t \leq b\}$ はコンパクトである.
2. $X \subseteq \mathbb{R}^n$ と $Y \subseteq \mathbb{R}^m$ がコンパクトならば, $X \times Y \subseteq \mathbb{R}^{n+m}$ もコンパクトである.
3. 単位球面 $S^n = \{x \in \mathbb{R}^{n+1} \mid \|x\| = 1\}$ はコンパクトである.

証明.

1. 列 $\{x_i\}_{i \in \mathbb{N}} \subseteq [a, b]$ を取る. $a_0 = a$, $b_0 = b$ と定める. $n > 0$ に対し, 次を満たす a_n, b_n を帰納的に定める:

- (a) $a_{n-1} \leq a_n < b_n \leq b_{n-1}$,
- (b) $|b_n - a_n| = \frac{1}{2} |b_{n-1} - a_{n-1}|$,
- (c) 区間 $[a_n, b_n]$ は列 $\{x_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ の項を無限個含む.

$[a_n, b_n]$ がこれらの性質を満たすとして構成できたと仮定する. 2つの区間 $[a_n, \frac{b_n+a_n}{2}]$ と $[\frac{b_n+a_n}{2}, b_n]$ を考える. (c) より, 少なくとも一方は $\{x_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ の項を無限個含む. 前者なら $a_{n+1} = a_n$, $b_{n+1} = \frac{b_n+a_n}{2}$ とし, 後者なら $a_{n+1} = \frac{b_n+a_n}{2}$, $b_{n+1} = b_n$ とする. (a),(b) は構成から従う. さらに (b) より

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |b_n - a_n| = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|b_0 - a_0|}{2^n} = |b_0 - a_0| \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2^n} = 0.$$

(a) より列 $\{a_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ は単調増加, $\{b_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ は単調減少である. したがって, ある $c \in [a, b]$ が存在して $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \lim_{n \rightarrow \infty} b_n = c$ となる. 各区間 $[a_n, b_n]$ は (c) を満たすので, $x_{i_n} \in [a_n, b_n]$ となる $i_0 < i_1 < \dots \in \mathbb{N}$ を取れる. このとき $\lim_{n \rightarrow \infty} x_{i_n} = c$ が従う.

2. 列 $\{(x_i, y_i)\}_{i \in \mathbb{N}} \subseteq X \times Y$ を取る. X がコンパクトなので, ある $i_0 < i_1 < \dots \in \mathbb{N}$ と $x \in X$ が存在して $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x - x_{i_n}\| = 0$ となる. $\{(x_i, y_i)\}$ を $\{(x_{i_n}, y_{i_n})\}$ で置き換えれば $i_n = n$ としてよいので, $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x - x_n\| = 0$ を仮定できる. さらに Y もコンパクトなので, ある $i_0 < i_1 < \dots$ と $y \in Y$ が存在して $\lim_{n \rightarrow \infty} \|y - y_{i_n}\| = 0$ となる. 再び部分列で置き換えて $i_n = n$ とすれば, $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x - x_n\| = 0$ かつ $\lim_{n \rightarrow \infty} \|y - y_n\| = 0$ を得る. すると

$$\begin{aligned} 0 \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \|(x, y) - (x_n, y_n)\| &= \lim_{n \rightarrow \infty} \|(x - x_n, y - y_n)\| \\ &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \|x - x_n\| + \lim_{n \rightarrow \infty} \|y - y_n\| = 0. \end{aligned}$$

3. 列 $\{x_i\}_{i \in \mathbb{N}} \subseteq S^n$ を取る. $S^n \subseteq [-1, 1]^{n+1} \subseteq \mathbb{R}^{n+1}$ であり, $[-1, 1]^{n+1}$ はコンパクトなので, ある $i_0 < i_1 < \dots \in \mathbb{N}$ と $x \in [-1, 1]^{n+1}$ が存在して $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x - x_{i_n}\| = 0$ となる. $x \in S^n$ を示せばよい. 逆三角不等式より

$$0 \leq \left| \|x\| - \|x_{i_n}\| \right| \leq \|x - x_{i_n}\|$$

したがって

$$0 = \lim_{n \rightarrow \infty} \|x\| - \|x_{i_n}\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|x\| - 1 = \|x\| - 1$$

すなわち, $x \in S^n$ である.

□

注意 11. S^n のコンパクト性は次のように直接示すこともできる. 立方体 $[-1, 1]^{n+1}$ を, 等しい大きさ 1 の 2^{n+1} 個の部分立方体に分割せよ. S^n 上の任意の列 $\{x_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ は, そのうち 1 つの小立方体に無限個の項をもつ. その小立方体をさらに等しい大きさ $\frac{1}{2^{n+1}}$ の 2^{n+1} 個に分割し, 同様に無限個含むものを選ぶ. これを繰り返すと, $C_0 \supseteq C_1 \supseteq \dots$ で各 C_i が $\{x_i\}$ の項を無限個含み, かつ C_i の大きさが $(\frac{1}{2^{n+1}})^{i-1}$ であるような小立方体列を得る. したがって $x_{i_j} \in C_j$ となる部分列を取り, $\cap_{i \in \mathbb{N}} C_i$ の唯一の点に収束させられる. (ここには多少の作業があり, 詳細は演習とする.)

定義 12. $X \subseteq \mathbb{R}^n$ と $Y \subseteq \mathbb{R}^m$ を部分集合とする. 写像 $f : X \rightarrow Y$ が連続であるとは, 収束列を収束列に送ることをいう. すなわち, $x_1, x_2, \dots \in X$ と $x \in X$ が $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x - x_n\| = 0$ を満たすとき, $\lim_{n \rightarrow \infty} \|f(x) - f(x_n)\| = 0$ が成り立つこと.

演習 13.

1. $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$; $(x_1, \dots, x_n) \mapsto x_k$ は任意の $1 \leq k \leq n$ で連続である.
2. $f, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ が連続ならば, $f + g : x \mapsto f(x) + g(x)$ と $fg : x \mapsto f(x)g(x)$ も連続である.
3. A を任意の n 次正方行列とするとき, $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$; $x \mapsto {}^t x A x$ は連続である.
4. $X \subseteq Y \subseteq \mathbb{R}^n$ とし, $f : Y \rightarrow \mathbb{R}$ が連続ならば, 合成 $X \rightarrow Y \xrightarrow{f} \mathbb{R}$ も連続である.

定理 14 (最大値定理). $X \subseteq \mathbb{R}^n$ がコンパクトで $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ が連続ならば, f は最大値をとる. すなわち, ある $x_{\max} \in X$ が存在して任意の $x \in X$ について $f(x) \leq f(x_{\max})$ である.

証明. 背理法で示す. 最大値が存在しないと仮定する. すると帰納的に $x_0, x_1, x_2, \dots \in X$ を構成して $f(x_0) < f(x_1) < f(x_2) < \dots$ かつ

$$f(x) < \lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) \text{ が任意の } x \in X \text{ に対して成り立つ.} \quad (*)$$

ここで, $\lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = \infty$ となる場合も許す. X はコンパクトなので, ある $i_0 < i_1 < \dots \in \mathbb{N}$ と $x \in X$ が存在して $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x - x_{i_n}\| = 0$ となる. f は連続なので $\lim_{n \rightarrow \infty} \|f(x) - f(x_{i_n})\| = 0$, すなわち $f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} f(x_{i_n})$ である. これは $(*)$ に反する. □