行列の条件数に関するノート

下村顕士

2023 年 4 月 17 日

$M_n(K)$: 体 K 上の n 次行列全体
$GL_n(K)$: 体 K 上の n 次一般線型群
$\mathcal{U}(n)$: n 次ユニタリ群

$V \in GL_n(\mathbb{C})$ に対し,

$$\kappa_p(V) \coloneqq \|V\|_p \left\|V^{-1}\right\|_p \tag{1}$$

を V の条件数 (condition number) と呼ぶ.

ここで $\|\bullet\|_p$ は行列の $p(\in [1,\infty))$-ノルム:

$$\|V\|_p \coloneqq \sup_{\substack{\boldsymbol{u}\in\mathbb{C}^n \\ \|\boldsymbol{u}\|_p\le 1}} \|V\boldsymbol{u}\|_p . \tag{2}$$

なお, V の最大特異値を $\sigma_+(V)$, 最小特異値を $\sigma_-(V)$ と置くと, V の 2-ノルムは

$$\|V\|_2 = \sigma_+(V), \quad \left\|V^{-1}\right\|_2 = 1/\sigma_-(V) \tag{3}$$

と表される. また, $U \in \mathcal{U}(n)$ に対して $\|UV\|_2 = \|V\|_2 = \|VU\|_2$ が成り立つ. これより, $\kappa_2(UV) = \kappa_2(V) = \kappa(VU)$.

p-ノルムの劣乗法性より,

$$\kappa_p(V) \ge \left\|VV^{-1}\right\|_p = \|I\|_p = 1 \tag{4}$$

定義より, 任意の $c \in \mathbb{C}\setminus\{0\}$ に対し

$$\kappa_p(cV) = \kappa_p(V). \tag{5}$$

2-ノルムに関する条件数の場合, その最小値はユニタリ行列の定数倍によって実現される.

$V \in GL_n(\mathbb{C})$ に対し,

$$\kappa_2(V) = 1 \iff V/\|V\|_2 \in \mathcal{U}(n). \tag{6}$$

Proof. $V/\|V\|_2 \in \mathcal{U}(n)$ のとき $\left\|V^{-1}\right\|_2 = \left\|(V/\|V\|_2)^{-1}\right\|_2/\|V\|_2 = 1/\|V\|_2$ となるので $\Longleftarrow$ は言える. 以下では $\Longrightarrow$ を示す.

$\kappa_2(V) = 1$ のとき $\|V\|_2 = \sigma_+(V) = \sigma_-(V)$ となる. これより, $U \in \mathcal{U}(n)$ が存在して $U^\dagger VV^\dagger U =$

$\|V\|_2^2 I$ が成り立つ．よって, $(V/\|V\|_2)^\dagger = V^{-1}U(\|V\|_2^2 I)U^\dagger/\|V\|_2 = (V/\|V\|_2)^{-1}$ となり, $V/\|V\|_2$ のユニタリ性が示される． □

条件数は, 摂動に対する固有値の変化の上限を与える．

[Bauer-Fike] $A \in M_n(\mathbb{C})$ を対角化可能行列とし, A を対角化する正則行列の全体を $\mathcal{S}_A \subset GL_2(\mathbb{C})$ と置く．$\delta A \in M_n(\mathbb{C})$ に対し, $A + \delta A$ の固有値 μ を任意に選ぶ．このとき, A の固有値 λ が存在して, 任意の $V \in \mathcal{S}_A$ に対し

$$|\lambda - \mu| \leq \kappa_p(V)\,\|\delta A\|_p \tag{7}$$

が成り立つ．

A に対し, $V \in \mathcal{S}_A$ に応じて $\kappa_2(V)$ の値は一般に異なる．

$c \geq 1$ を任意に取る．$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ に対し, $V = \begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ は A を対角化する:

$$V^{-1}AV = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

(もちろん A は元から対角的である)．V の条件数は

$$\kappa_2(V) = \|V\|_2 \left\|V^{-1}\right\|_2 = c. \tag{9}$$

すなわち, A を対角化する正則行列の条件数は一意でなく, 1 以上の任意の値を取りうる．

固有値に縮退がない 2×2 行列の場合には, $\kappa_2(V)$ を最小にする $V \in \mathcal{S}_A$ は各列を 2-ノルムについて規格化することで得られる．

A を固有値に縮退がない 2×2 行列とし, $\mathcal{S}_A$ 上での条件数の下限を $K_A \coloneqq \inf_{V \in \mathcal{S}_A} \kappa_2(V)$ と置く．このとき, $V \in \mathcal{S}_A$ に対して

$$K_A = \kappa_2(V) \iff \left\|\begin{pmatrix} V_{11} \\ V_{21} \end{pmatrix}\right\|_2 = \left\|\begin{pmatrix} V_{12} \\ V_{22} \end{pmatrix}\right\|_2 \tag{10}$$

が成り立つ．

Proof. A の固有値を $a_1, a_2 (a_1 \neq a_2)$, それらに対応する規格化された固有ベクトルを $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$ と置く:

$$A\boldsymbol{v}_1 = a_1\boldsymbol{v}_1, \quad A\boldsymbol{v}_2 = a_2\boldsymbol{v}_2, \quad \|\boldsymbol{v}_1\|_2 = \|\boldsymbol{v}_2\|_2 = 1. \tag{11}$$

このとき, $\mathcal{S}_A$ は陽に

$$\mathcal{S}_A = \{c\,(b\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)\,, c\,(\boldsymbol{v}_2\ b\boldsymbol{v}_1) \mid b, c \in \mathbb{C} \setminus \{0\}\} \tag{12}$$

と書ける．$b, c \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ に対し,

$$\kappa_2(c\,(b\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)) = \kappa_2((b\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)) \tag{13}$$

$$\kappa_2(c\,(\boldsymbol{v}_2\ b\boldsymbol{v}_1)) = \kappa_2((\boldsymbol{v}_2\ b\boldsymbol{v}_1)) = \kappa_2\left((b\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right) = \kappa_2((b\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)) \tag{14}$$

が成り立つ．よって，$\kappa_2(V)$ $(V \in \mathcal{S}_A)$ の計算は $\kappa_2((b\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2))$ の計算に帰着できる．

ここで $(\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)$ について，ユニタリ行列 $Q \in \mathcal{U}(2)$ と正則な上三角行列 $R \in GL_n(\mathbb{C})$ を用いて

$$(\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2) = QR \tag{15}$$

と分解できる．この分解を用いると，

$$\kappa_2((b\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)) = \kappa_2\left((\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right) = \kappa_2\left(QR\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right) = \kappa_2\left(R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right). \tag{16}$$

また，

$$|R_{11}|^2 = \left\| R\begin{pmatrix} 1 \\ 0\end{pmatrix}\right\|_2^2 = \left\| Q^\dagger\,(\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)\begin{pmatrix} 1 \\ 0\end{pmatrix}\right\|_2^2 = \|\boldsymbol{v}_1\|_2^2 = 1, \tag{17}$$

$$|R_{12}|^2 + |R_{22}|^2 = \left\| R\begin{pmatrix} 0 \\ 1\end{pmatrix}\right\|_2^2 = \left\| Q^\dagger\,(b\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)\begin{pmatrix} 0 \\ 1\end{pmatrix}\right\|_2^2 = \|\boldsymbol{v}_2\|_2^2 = 1. \tag{18}$$

R は正則だから，$R_{22} \neq 0$.

$\kappa_2\left(R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right)$ を求めるべく，$R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}$ の特異値 σ を計算する．

$$R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\left(R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right)^\dagger = \begin{pmatrix} bR_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} b^*R_{11}^* & 0 \\ R_{12}^* & R_{22}^*\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |b|^2 + |R_{12}|^2 & R_{12}R_{22}^* \\ R_{12}^*R_{22} & |R_{22}|^2\end{pmatrix} \tag{19}$$

より，

$$\begin{aligned} 0 &= \det\left(R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\left(R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right)^\dagger - \sigma^2 I\right) = (|b|^2 + |R_{12}|^2 - \sigma^2)(|R_{22}|^2 - \sigma^2) - |R_{12}|^2\,|R_{22}|^2 \\ &= \sigma^4 - (|b|^2 + |R_{12}|^2 + |R_{22}|^2)\sigma^2 + |b|^2\,|R_{22}|^2 = \sigma^4 - (|b|^2 + 1)\sigma^2 + |b|^2\,|R_{22}|^2 . \end{aligned} \tag{20}$$

これより，$R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}$ の最大 (最小) 特異値 $\sigma_{+(-)}$ は

$$\sigma_\pm^2 = \frac{|b|^2 + 1 \pm \sqrt{(|b|^2+1)^2 - 4\left||b|^2\,R_{22}\right|^2}}{2} \tag{21}$$

となり，条件数が

$$\kappa_2\left(R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right) = \frac{\sigma_+}{\sigma_-} = \frac{1}{2\,|R_{22}|}\left(|b| + \frac{1}{|b|}\right) + \sqrt{\frac{1}{4\,|R_{22}|^2}\left(|b| + \frac{1}{|b|}\right)^2 - 1} \tag{22}$$

と求まる．$\kappa_2\left(R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right)$ の b 依存性は $|b| + 1/\,|b|$ のみを通して入っており，$\kappa_2\left(R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right)$ は $|b| + 1/\,|b|\ (\geq 2)$ の関数として狭義単調増加だから，

$$\kappa_2\left(R\begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & 1\end{pmatrix}\right) \geq \frac{1}{|R_{22}|} + \sqrt{\frac{1}{|R_{22}|^2} - 1} = \frac{1 + |R_{12}|}{|R_{22}|}. \tag{23}$$

等号成立条件は $|b| = 1$[*1].

以上より, $K_A = (1+|R_{12}|)/|R_{22}|$. $V \in \mathcal{S}_A$ が $K_A = \kappa_2(V)$ を満たすとすると, V は $|b|=1$ を満たす $b, c \in \mathbb{C}\setminus\{0\}$ を用いて $V = c\,(b\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)\,, c\,(\boldsymbol{v}_2\ b\boldsymbol{v}_1)$ と書け, $\left\|\begin{pmatrix}V_{11}\\V_{21}\end{pmatrix}\right\|_2 = \left\|\begin{pmatrix}V_{12}\\V_{22}\end{pmatrix}\right\|_2 = |c|$ が成り立つ. 逆に, $V \in \mathcal{S}_A$ が $\left\|\begin{pmatrix}V_{11}\\V_{21}\end{pmatrix}\right\|_2 = \left\|\begin{pmatrix}V_{12}\\V_{22}\end{pmatrix}\right\|_2$ を満たすとき表示 $V = c\,(b\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2)\,, c\,(\boldsymbol{v}_2\ b\boldsymbol{v}_1)$ の下で $|b|=1$ が成り立ち, $K_A = \kappa_2(V)$ が実現する. □

3×3 行列の場合は, 各列が 2-ノルムで規格化されていたとしても κ_2 が最小になるとは限らない.

$V = \begin{pmatrix} a & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{2}\end{pmatrix}$ $(a \in \mathbb{C}\setminus\{0\})$ と置く. V は第 2,3 列目について規格化されている. V の条件数を計算するために, V の特異値 σ を求める.

$$
\begin{aligned}
0 = \det(\sigma^2 I - VV^\dagger) &= \det\begin{pmatrix} \sigma^2 - (|a|^2+1) & -1/2 & -1/2 \\ -1/2 & \sigma^2 - 1/2 & 0 \\ -1/2 & 0 & \sigma^2 - 1/2 \end{pmatrix} \\
&= \left(\sigma^2 - (|a|^2+1)\right)\left(\sigma^2 - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\sigma^2 - \frac{1}{2}\right) \\
&= \left(\sigma^2 - \frac{1}{2}\right)\left(\sigma^4 - \left(|a|^2 + \frac{3}{2}\right)\sigma^2 + \frac{|a|^2}{2}\right) \qquad (24)
\end{aligned}
$$

より,

$$
\sigma^2 = \frac{1}{2}, \sigma_+^2, \sigma_-^2 \qquad (25)
$$

$$
\sigma_\pm^2 \coloneqq \frac{|a|^2 + \frac{3}{2} \pm \sqrt{\left(|a|^2+\frac{3}{2}\right)^2 - 2\,|a|^2}}{2}. \qquad (26)
$$

ここで $\left[\sigma^4 - \left(|a|^2 + 3/2\right)\sigma^2 + |a|^2/2\right]_{\sigma^2 = 1/2} = -1/2 < 0$ より, $\sigma_-^2 \le 1/2 \le \sigma_+^2$. よって, V の条件数は

$$
\begin{aligned}
\kappa_2(V) = \frac{\sigma_+}{\sigma_-} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|a| + \frac{3}{2\,|a|}\right) + \sqrt{\frac{1}{2}\left(|a| + \frac{3}{2\,|a|}\right)^2 - 1} \\
&\ge \frac{1}{\sqrt{2}} 2\sqrt{\frac{3}{2}} + \sqrt{\frac{1}{2}\left(2\sqrt{\frac{3}{2}}\right)^2 - 1} = \sqrt{3} + \sqrt{2}. \qquad (27)
\end{aligned}
$$

等号成立条件は $|a| = \sqrt{3/2}$.

よって, V の各列が 2-ノルムで規格化されている (いまの場合 $|a|=1$ としている) ときよりも条件数を真に小さくする a が存在する.

[*1] この議論から, $V \in \mathcal{S}_A$ を適切に選ぶことで (すなわち b を適切に選ぶことで) $\kappa_2(V)$ を $(1+|R_{12}|)/|R_{22}|$ 以上の任意の実数値に取れることもわかる.