条件数の一意な定義とその上界・下界

下村顕士

2023 年 12 月 10 日

以下, 行列 $\mathsf{M} \in \mathrm{Mat}_{m\times n}(\mathbb{C})$ の μ 行 ν 列成分を $(\mathsf{M})_{\mu,\nu} \in \mathbb{C}$ で, M の ν 行を取り出してできる (縦) ベクトルを $(\mathsf{M})_\nu \in \mathbb{C}^m$ で表す. また, 縦ベクトル $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n \in \mathbb{C}^m$ をこの順番で横に並べてできる行列を $\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \cdots & \boldsymbol{v}_n\end{bmatrix} \in \mathrm{Mat}_{m\times n}(\mathbb{C})$ で表す.

定義

一般の正則行列 $\mathsf{M} \in \mathrm{GL}(N, \mathbb{C})$ に対して条件数を

$$\kappa_2(\mathsf{M}) \coloneqq \|\mathsf{M}\|_2 \left\|\mathsf{M}^{-1}\right\|_2 \tag{1}$$

で定義する.

対角化可能行列 $\mathsf{A} \in \mathrm{Mat}_{N\times N}(\mathbb{C})$ の固有値を λ_α $(\alpha = 1, 2, \ldots, p\ (\leq N))$ とし, λ_α に属する固有空間を $\mathcal{E}_\alpha \coloneqq \ker(\mathsf{A} - \lambda_\alpha \mathsf{I}_N)$, その次元を $d_\alpha \coloneqq \dim \mathcal{E}_\alpha (\geq 1)$ と置く. このとき $\sum_{\alpha=1}^{p} d_\alpha = N$. 各 $\mathcal{E}_\alpha$ の正規直交基底 $\left\{\boldsymbol{u}_\mu^\alpha\right\}_{\mu=1}^{d_\alpha}$ を取り, 正則行列 $\mathsf{U} \in \mathrm{GL}(N, \mathbb{C})$ を

$$\mathsf{U} \coloneqq \begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1^1 & \cdots & \boldsymbol{u}_{d_1}^1 & \boldsymbol{u}_1^2 & \cdots & \boldsymbol{u}_{d_2}^2 & \cdots\cdots & \boldsymbol{u}_1^p & \cdots & \boldsymbol{u}_{d_p}^p\end{bmatrix} \tag{2}$$

で定義する. このとき, U は A を対角化する:

$$\mathsf{A}\mathsf{U} = \mathsf{U} \bigoplus_{\alpha=1}^{p} \lambda_\alpha \mathsf{I}_{d_\alpha}. \tag{3}$$

したがって, A が正規行列でない場合には U はユニタリにはならない.

命題

A に対して $\kappa_2(\mathsf{U})$ は U の取り方 (つまり A の各固有空間における正規直交基底の取り方) に依らず一意に定まる.

Proof. 各 $\mathcal{E}_\alpha$ の正規直交基底を 2 通りの方法 $\left\{\boldsymbol{u}_\mu^\alpha\right\}_\mu$, $\left\{\boldsymbol{v}_\mu^\alpha\right\}_\mu$ で取り, それぞれから正則行列

$$\mathsf{U} \coloneqq \begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1^1 & \cdots & \boldsymbol{u}_{d_1}^1 & \cdots\cdots & \boldsymbol{u}_1^p & \cdots & \boldsymbol{u}_{d_p}^p\end{bmatrix}, \quad \mathsf{V} \coloneqq \begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^1 & \cdots & \boldsymbol{v}_{d_1}^1 & \cdots\cdots & \boldsymbol{v}_1^p & \cdots & \boldsymbol{v}_{d_p}^p\end{bmatrix} \tag{4}$$

を定める．さらに, 次のような行列 $\mathsf{W}_\alpha \in \mathrm{Mat}_{d_\alpha \times d_\alpha}(\mathbb{C})$ を導入する:

$$(\mathsf{W}_\alpha)_{\mu,\nu} \coloneqq \langle \boldsymbol{u}_\mu^\alpha, \boldsymbol{v}_\nu^\alpha \rangle \quad (\mu, \nu = 1, 2, \dots, d_\alpha), \tag{5}$$

$$\text{i.e.} \quad \mathsf{W}_\alpha = \begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{u}_1^\alpha, \boldsymbol{v}_1^\alpha \rangle & \langle \boldsymbol{u}_1^\alpha, \boldsymbol{v}_2^\alpha \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{u}_1^\alpha, \boldsymbol{v}_{d_\alpha}^\alpha \rangle \\ \langle \boldsymbol{u}_2^\alpha, \boldsymbol{v}_1^\alpha \rangle & \langle \boldsymbol{u}_2^\alpha, \boldsymbol{v}_2^\alpha \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{u}_2^\alpha, \boldsymbol{v}_{d_\alpha}^\alpha \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \boldsymbol{u}_{d_\alpha}^\alpha, \boldsymbol{v}_1^\alpha \rangle & \langle \boldsymbol{u}_{d_\alpha}^\alpha, \boldsymbol{v}_2^\alpha \rangle & \cdots & \langle \boldsymbol{u}_{d_\alpha}^\alpha, \boldsymbol{v}_{d_\alpha}^\alpha \rangle \end{bmatrix}. \tag{6}$$

このとき

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^\alpha & \cdots & \boldsymbol{v}_{d_\alpha}^\alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1^\alpha & \cdots & \boldsymbol{u}_{d_\alpha}^\alpha \end{bmatrix} \mathsf{W}_\alpha \tag{7}$$

となるので,

$$\mathsf{W} \coloneqq \bigoplus_{\alpha=1}^{p} \mathsf{W}_\alpha = \begin{bmatrix} \mathsf{W}_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathsf{W}_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathsf{W}_{d_\alpha} \end{bmatrix} \in \mathrm{Mat}_{N \times N}(\mathbb{C}) \tag{8}$$

と置けば

$$\mathsf{V} = \mathsf{U}\mathsf{W} \tag{9}$$

が成り立つ．

$$(\mathsf{W}_\alpha^\dagger \mathsf{W}_\alpha)_{\mu,\nu} = \sum_{\rho=1}^{d_\alpha} \langle \boldsymbol{v}_\mu^\alpha, \boldsymbol{u}_\rho^\alpha \rangle \langle \boldsymbol{u}_\rho^\alpha, \boldsymbol{v}_\nu^\alpha \rangle = \langle \boldsymbol{v}_\mu^\alpha, \boldsymbol{v}_\nu^\alpha \rangle = \delta_{\mu,\nu} \tag{10}$$

より各 W_α はユニタリであるので, W もユニタリである:

$$\mathsf{W}\mathsf{W}^\dagger = \mathsf{I}_N = \mathsf{W}^\dagger \mathsf{W}. \tag{11}$$

したがって,

$$\kappa_2(\mathsf{V}) = \|\mathsf{U}\mathsf{W}\|_2 \left\|\mathsf{W}^{-1}\mathsf{U}^{-1}\right\|_2 = \|\mathsf{U}\|_2 \left\|\mathsf{U}^{-1}\right\|_2 = \kappa_2(\mathsf{U}) \tag{12}$$

を得る[*1]. □

定理

$\mathrm{GL}_{\mathsf{A}} \coloneqq \mathrm{GL}(d_1, \mathbb{C}) \times \mathrm{GL}(d_2, \mathbb{C}) \times \cdots \times \mathrm{GL}(d_p, \mathbb{C})$ と置く．すなわち,

$$\mathrm{GL}_{\mathsf{A}} = \left\{ \bigoplus_{\alpha=1}^{p} \mathsf{D}_\alpha = \begin{bmatrix} \mathsf{D}_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathsf{D}_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathsf{D}_p \end{bmatrix} \;\middle|\; \mathsf{D}_\alpha \in \mathrm{GL}(d_\alpha, \mathbb{C}) \quad (\alpha = 1, 2, \dots, p) \right\} \subset \mathrm{GL}(N, \mathbb{C}). \tag{14}$$

このとき, $\kappa_2^* \coloneqq \inf_{\mathsf{D} \in \mathrm{GL}_{\mathsf{A}}} \kappa_2(\mathsf{U}\mathsf{D})$ と置くと[*2]

$$\kappa_2^* \le \kappa_2(\mathsf{U}) \le \sqrt{p}\,\kappa_2^* \le \sqrt{N}\,\kappa_2^* \tag{15}$$

が成り立つ．

[*1] 2-ノルムが左右からのユニタリ行列の作用に対して不変であることに注意せよ:

$$\forall \mathsf{U}_{\mathrm{L}} \in \mathrm{U}(m). \quad \forall \mathsf{U}_{\mathrm{R}} \in \mathrm{U}(n). \quad \forall \mathsf{M} \in \mathrm{Mat}_{m \times n}(\mathbb{C}). \quad \|\mathsf{U}_{\mathrm{L}} \mathsf{M} \mathsf{U}_{\mathrm{R}}\|_2 = \|\mathsf{M}\|_2 . \tag{13}$$

Proof. $\mathsf{D}=\bigoplus_{\alpha=1}^{p}\mathsf{D}_\alpha\in\mathrm{GL}_{\mathsf{A}}$ を任意に取る．関数 $\psi\colon\ \mathrm{Mat}_{N\times N}(\mathbb{C})\to\mathbb{R}_{\geq 0}$ を

$$\psi(\mathsf{M}) \coloneqq \max_{\alpha=1,2,\dots,p}\left\|\begin{bmatrix}(\mathsf{M})_{1-d_\alpha+\sum_{\beta=1}^{\alpha}d_\beta} & (\mathsf{M})_{2-d_\alpha+\sum_{\beta=1}^{\alpha}d_\beta} & \cdots & (\mathsf{M})_{d_\alpha-d_\alpha+\sum_{\beta=1}^{\alpha}d_\beta}\end{bmatrix}\right\|_2 \tag{18}$$

で定義する．特に

$$\psi(\mathsf{UD})=\max_\alpha\left\|\begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1^\alpha & \cdots & \boldsymbol{u}_{d_\alpha}^\alpha\end{bmatrix}\mathsf{D}_\alpha\right\|_2=\max_\alpha\|\mathsf{D}_\alpha\|_2=\psi(\mathsf{D}), \tag{19}$$

が成り立つ[*3]．また，$\boldsymbol{c}=\begin{bmatrix}c_1^1 & \cdots & c_{d_1}^1 & \cdots\cdots & c_1^p & \cdots & c_{d_p}^p\end{bmatrix}^{\mathsf{T}}\in\mathbb{C}^N$ を任意に取ると

$$\|\mathsf{D}\boldsymbol{c}\|_2^2=\sum_{\alpha=1}^{p}\left\|\sum_{\mu=1}^{d_\alpha}(\mathsf{D}_\alpha)_\mu c_\mu^\alpha\right\|_2^2\leq\sum_{\alpha=1}^{p}\|\mathsf{D}_\alpha\|_2^2\sum_{\mu=1}^{d_\alpha}\left|c_\mu^\alpha\right|^2\leq\left(\max_\alpha\|\mathsf{D}_\alpha\|_2^2\right)\sum_{\alpha=1}^{p}\sum_{\mu=1}^{d_\alpha}\left|c_\mu^\alpha\right|^2=\psi(\mathsf{D})^2\,\|\boldsymbol{c}\|_2^2 \tag{22}$$

が成り立つので，

$$\|\mathsf{D}\|_2\leq\psi(\mathsf{D}) \tag{23}$$

を得る．ゆえに，

$$\psi(\mathsf{UD})\left\|(\mathsf{UD})^{-1}\right\|_2=\psi(\mathsf{D})\left\|\mathsf{D}^{-1}\mathsf{U}^{-1}\right\|_2\geq\|\mathsf{D}\|_2\left\|\mathsf{D}^{-1}\mathsf{U}^{-1}\right\|_2\geq\left\|\mathsf{U}^{-1}\right\|_2 \tag{24}$$

が従う．

また，U に対して

$$\|\mathsf{U}\boldsymbol{c}\|_2^2=\left\|\sum_{\alpha=1}^{p}\sum_{\mu=1}^{d_\alpha}c_\mu^\alpha\boldsymbol{u}_\mu^\alpha\right\|_2^2\leq\left(\sum_{\alpha=1}^{p}\left\|\sum_{\mu=1}^{d_\alpha}c_\mu^\alpha\boldsymbol{u}_\mu^\alpha\right\|_2\right)^2=\left(\sum_{\alpha=1}^{p}\sqrt{\sum_{\mu=1}^{d_\alpha}\left|c_\mu^\alpha\right|^2}\right)^2\leq p\sum_{\alpha=1}^{p}\sum_{\mu=1}^{d_\alpha}\left|c_\mu^\alpha\right|^2=p\,\|\boldsymbol{c}\|_2^2 \tag{25}$$

より

$$\|\mathsf{U}\|_2\leq\sqrt{p} \tag{26}$$

[*2] A の各固有空間 $\mathcal{E}_\alpha$ の (正規直交とは限らない) 基底 $\left\{\boldsymbol{f}_\mu^\alpha\right\}_{\mu=1}^{d_\alpha}$ に対し，

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{f}_1^1 & \cdots & \boldsymbol{f}_{d_1}^1 & \cdots\cdots & \boldsymbol{f}_1^p & \cdots & \boldsymbol{f}_{d_p}^p\end{bmatrix}=\mathsf{UD} \tag{16}$$

を満たす $\mathsf{D}\in\mathrm{GL}_{\mathsf{A}}$ が存在する．実際，$\mathsf{D}_\alpha\in\mathrm{GL}(d_\alpha,\mathbb{C})$ を $(\mathsf{D}_\alpha)_{\mu,\nu}\coloneqq\langle\boldsymbol{u}_\mu^\alpha,\boldsymbol{f}_\nu^\alpha\rangle$ によって導入し $\mathsf{D}\coloneqq\bigoplus_{\alpha=1}^{p}\mathsf{D}_\alpha$ と取ればよい．

逆に，任意の $\mathsf{D}\in\mathrm{GL}_{\mathsf{A}}$ に対し UD は A を対角化する．実際，(3) より

$$\mathsf{AUD}=\mathsf{U}\bigoplus_{\alpha=1}^{p}\lambda_\alpha\mathsf{D}_\alpha=\mathsf{UD}\bigoplus_{\alpha=1}^{p}\lambda_\alpha\mathsf{I}_\alpha. \tag{17}$$

[*3]

$$\left\|\begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1^\alpha & \cdots & \boldsymbol{u}_{d_\alpha}^\alpha\end{bmatrix}\mathsf{D}_\alpha\right\|_2=\sup_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{C}^{d_\alpha}\setminus\{\boldsymbol{0}\}}\frac{\left\|\begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1^\alpha & \cdots & \boldsymbol{u}_{d_\alpha}^\alpha\end{bmatrix}\mathsf{D}_\alpha\boldsymbol{v}\right\|_2}{\|\boldsymbol{v}\|_2}=\sup_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{C}^{d_\alpha}\setminus\{\boldsymbol{0}\}}\frac{\left\|\sum_{\mu=1}^{d_\alpha}(\mathsf{D}_\alpha\boldsymbol{v})_\mu\boldsymbol{u}_\mu^\alpha\right\|_2}{\|\boldsymbol{v}\|_2} \tag{20}$$

$$=\sup_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{C}^{d_\alpha}\setminus\{\boldsymbol{0}\}}\frac{\sqrt{\sum_{\mu=1}^{d_\alpha}\left|(\mathsf{D}_\alpha\boldsymbol{v})_\mu\right|^2}}{\|\boldsymbol{v}\|_2}=\sup_{\boldsymbol{v}\in\mathbb{C}^{d_\alpha}\setminus\{\boldsymbol{0}\}}\frac{\|\mathsf{D}_\alpha\boldsymbol{v}\|_2}{\|\boldsymbol{v}\|_2}=\|\mathsf{D}_\alpha\|_2\,. \tag{21}$$

が, 一方で任意の $\mathsf{M} \in \mathrm{Mat}_{N\times N}(\mathbb{C})$ に対して

$$\|\mathsf{M}\|_2 = \sup_{\boldsymbol{c}\in\mathbb{C}^N\setminus\{\boldsymbol{0}\}} \frac{\|\mathsf{M}\boldsymbol{c}\|_2}{\|\boldsymbol{c}\|_2} \geq \max_{\alpha}\left(\sup\left\{\frac{\|\mathsf{M}\boldsymbol{c}\|_2}{\|\boldsymbol{c}\|_2} \in \mathbb{R} \mid \boldsymbol{c}\in\mathbb{C}^N\setminus\{\boldsymbol{0}\}, c_\mu^{\alpha'} = 0 \text{ for } \alpha' \neq \alpha\right\}\right) = \psi(\mathsf{M}) \quad (27)$$

が, それぞれ成り立つ.

以上より, 任意の $\mathsf{D} \in \mathrm{GL}_{\mathsf{A}}$ に対し

$$\kappa_2(\mathsf{U}) = \|\mathsf{U}\|_2 \left\|\mathsf{U}^{-1}\right\|_2 \leq \sqrt{p}\psi(\mathsf{UD}) \left\|(\mathsf{UD})^{-1}\right\|_2 \leq \sqrt{p}\,\|\mathsf{UD}\|_2 \left\|(\mathsf{UD})^{-1}\right\|_2 = \sqrt{p}\kappa_2(\mathsf{UD}) \quad (28)$$

が成り立つ. ゆえに

$$\kappa_2^* \leq \kappa_2(\mathsf{U}) \leq \sqrt{p}\kappa_2^* \leq \sqrt{N}\kappa_2^* \quad (29)$$

を得る. □

参考文献

[1] A. van der Sluis, “Condition Numbers and Equilibration of Matrices”, *Numer. Math.* **14**, 14 (1969).