解答例

STEP II 1987、第 9 問

純粋数学 • 直交行列

> **STEP II 1987、問 9**
>
> 先に進む前に、まず問題を読んでおこう。問題は STEP Support Programme の問題データベースにある：
>
> step.maths.org/questions/87-s2-q9

鍵となる考え方

$\mathbf{B}$ の転置（transpose）をとると、条件 $\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = \mathbf{I}$ の左辺は両端に逆行列（inverse）が現れる形になる。これらの逆行列はそれ自身正則なので、左から $\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ を、右から $\mathbf{I} - \mathbf{A}$ を掛けても情報は失われない。残るのは $\mathbf{A}$ と $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ についての多項式の恒等式であり、それはほとんどすぐに簡単になる。注意すべきなのは、示すべきことが「必要十分」であるため、すべての変形が逆にたどれなければならないという点である。

解答

用いる標準的な事実は次のとおりである。

- $(\mathbf{XY})^{\mathrm{T}} = \mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}$ であり、転置は線形なので、（$\mathbf{I}^{\mathrm{T}} = \mathbf{I}$ より）$(\mathbf{I} \pm \mathbf{A})^{\mathrm{T}} = \mathbf{I} \pm \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ である。
- $\mathbf{X}$ が正則（non-singular）ならば $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}$ も正則であり、$(\mathbf{X}^{-1})^{\mathrm{T}} = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}})^{-1}$ が成り立つ。

ステップ 1：$\mathbf{B}$ の転置。 $\mathbf{I} - \mathbf{A}$ は正則なので、その転置 $\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ も正則である。積の順序を逆にして、

$$\mathbf{B}^{\mathrm{T}} = \left((\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{\mathrm{T}} = (\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{-1}(\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}).$$

したがって

$$\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = (\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{-1}\,(\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} + \mathbf{A})\,(\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}.$$

ステップ 2：逆行列を、逆にたどれる形で払う。 $\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$、$\mathbf{Q} = \mathbf{I} - \mathbf{A}$、$\mathbf{M} = (\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} + \mathbf{A})$ とおくと、$\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{Q}^{-1}$ である。次が成り立つことを示す。

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{I} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{Q}.$$

（⇒）左から $\mathbf{P}$ を、右から $\mathbf{Q}$ を掛けると、$\mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{I}\mathbf{Q} = \mathbf{P}\mathbf{Q}$ となる。
（⇐）左から $\mathbf{P}^{-1}$ を、右から $\mathbf{Q}^{-1}$ を掛けると、$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{Q}\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{I}$ となる。

> ? **考えてみよう** なぜ単に「両辺に掛ける」だけで終わりにしてはいけないのだろうか？

等式の両辺に行列を掛ければ常に正しい等式が得られるが、一般にはその操作を元に戻すことはできない。$\mathbf{X}\mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{Z}$ から $\mathbf{Y} = \mathbf{Z}$ が結論できるのは、$\mathbf{X}$ が逆行列をもつ場合に限られる。ここで逆向きの推論が成り立つのは $\mathbf{P}$ と $\mathbf{Q}$ が逆行列をもつからにほかならず、まさにこの点で $\mathbf{I} - \mathbf{A}$ が正則である（したがって $\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ も正則である）という仮定が使われている。また、行列の積は可換（commutative）ではないので、$\mathbf{P}$ は左に、$\mathbf{Q}$ は右に置いたままにしなければならないことにも注意しよう。

ステップ 3：展開する。 因数の順序に注意しながら $\mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{Q}$ の両辺を展開すると、

$$(\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} + \mathbf{A}) = \mathbf{I} + \mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A},$$
$$(\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \mathbf{I} - \mathbf{A} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}.$$

$\mathbf{I}$ の項と $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$ の項は両辺に現れるので、差をとって

$$\mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{Q} \quad \Longleftrightarrow \quad 2(\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}) = \mathbf{O} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \mathbf{O}.$$

これらはいずれも逆にたどれる操作である。両辺に同じ行列を加えたり引いたりすることと、0 でないスカラー 2 または $\frac{1}{2}$ を掛けることだからである。

結論。 ステップ 1〜3 をつなげると、各段階がすべて同値（equivalence）であるから、

$$\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = \mathbf{I} \iff (\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} + \mathbf{A}) = (\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} - \mathbf{A}) \iff \mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \mathbf{O},$$

となり、これが示すべきことであった。言葉で言えば、$\mathbf{B}$ が直交行列（orthogonal matrix）であるのは、$\mathbf{A}$ が交代行列（skew-symmetric matrix）であるとき、かつそのときに限る。

検算

- 交代行列 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & t \\ -t & 0 \end{pmatrix}$ をとる。このとき $\det(\mathbf{I} - \mathbf{A}) = 1 + t^2 \neq 0$ であり、

$$\mathbf{B} = \frac{1}{1+t^2} \begin{pmatrix} 1-t^2 & 2t \\ -2t & 1-t^2 \end{pmatrix},$$

  これは回転行列（rotation matrix）である（$t = \tan\frac{\theta}{2}$ とおけばよい）。よって予想どおり $\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = \mathbf{I}$ となる。

- 1×1 の場合：$a \neq 1$ として $\mathbf{A} = (a)$ とすると $\mathbf{B} = \left(\frac{1+a}{1-a}\right)$ であり、$\mathbf{B}^2 = 1$ より $1 + a = \pm(1 - a)$、すなわち $a = 0$ となる（もう一方の符号は起こりえない）。これは $2a = 0$ と一致する。

- サイズ 1 から 5 までのランダムな行列およそ 2000 個について、厳密な有理数演算で調べた。交代行列 $\mathbf{A}$ はすべて厳密に $\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = \mathbf{I}$ を与え、それ以外のものは一つも与えなかった。

よくある間違い

- 順序を逆にせずに $\mathbf{B}^{\mathrm{T}} = (\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{-1}$ と書いてしまう。（$\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ と $(\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{-1}$ が可換なので、これはたまたま正しいが、そのことには別途根拠が必要である。）

- $(\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} + \mathbf{A})$ を展開するときに $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$ ではなく $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ と書いてしまう。ここではどちらにしても打ち消し合うが、それは両辺を一貫して展開した場合に限られる。

- 一方向しか証明しない。問題は「必要十分」を求めているので、各段階が逆にたどれる理由を述べること。

STEP のその先へ

写像 $\mathbf{A} \mapsto (\mathbf{I} + \mathbf{A})(\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$ は**ケイリー変換**（Cayley transform）と呼ばれる。これはベクトル空間（vector space）をなす交代行列を、群（group）をなす直交行列に移し、回転の有理的なパラメータ表示（rational parametrisation）を与える。（$\mathbf{A}$ が実の交代行列ならば $\mathbf{I} - \mathbf{A}$ は自動的に正則であること、そして得られる直交行列はちょうど固有値（eigenvalue）-1 をもたないものであることが示せる。）これは、リー群（Lie group）がそのリー代数（Lie algebra）とどのように関係しているかを垣間見る最初の例である。直交行列や交代行列についてさらに学ぶには、ストラング（Strang）の *Introduction to Linear Algebra*（線形代数入門）がよい。

Beyond STEP 解答集：https://beyondstep.keithmcnulty.org/ja/。解答本文は CC0 1.0 である。問題そのものは © Cambridge University Press & Assessment に帰属し、ここには掲載していない。英語版から機械翻訳したものであり、まだ校閲を経ていない。