

2024 年 02 月 29 日

固有値・固有ベクトルの応用

新潟工科大学 基礎教育・教養系 竹野茂治

1 はじめに

簡易的な、そして工学で良く使われている線形代数の教科書では、固有値・固有ベクトルの応用としては行列の対角化以外にはあまり紹介されていないものが多いように思う。本稿では、いくつか代表的な応用例をいくつか紹介する。

2 基本事項

まずは、本稿の例を説明するのに必要な、固有値、固有ベクトルに関する線形代数の基本事項をいくつか紹介する。詳しくは、線形代数の本を参照のこと。

- n 次正方行列 A に対して、 $A\mathbf{x} = \alpha\mathbf{x}$ となるスカラー α 、 $\mathbf{0}$ でないベクトル \mathbf{x} が存在するとき、 α を**固有値**、 \mathbf{x} をそれに対応する**固有ベクトル**という。
- 固有値は、固有方程式 $\phi_A(x) = |xE - A| = 0$ の解であり、固有ベクトルは、同次連立方程式 $(\alpha E - A)\mathbf{x} = \mathbf{0}$ の解で、固有値 α に対する固有ベクトルは必ず存在し、 α に対する固有ベクトル全体はベクトル空間をなす。
- 固有値は、一般には虚数となることもあり、その場合は固有ベクトルの成分も複素数となる。 A の成分が実数で固有値が実数なら、固有ベクトルの成分も実数となる (本稿では主にこちらを扱う)。
- ${}^tA = A$ となる正方行列を**対称行列**、 ${}^tAA = E$ となる正方行列を**直交行列** という。
- $\phi_A(x) = \phi_{{}^tA}(x)$ より、 A と tA の固有値は等しい。
- A の固有値 α に対して、 $\mathbf{y}A = \alpha\mathbf{y}$ となる行ベクトル \mathbf{y} ($\neq \mathbf{0}$) を**左固有ベクトル**と呼ぶ。 A の左固有ベクトルは、 tA の固有ベクトルの転置。
- 直交行列 $A = [\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n]$ の列ベクトル $\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n$ は \mathbf{R}^n の正規直交基底で、 A の行列式は $|A| = \pm 1$ 。

- 直交行列 A による変換で、内積と長さは保存される。すなわち、 $(A\mathbf{x}, A\mathbf{y}) = (\mathbf{x}, \mathbf{y})$,
 $|A\mathbf{x}| = |\mathbf{x}|$
- 3 次の直交行列 A の固有値のうちの 1 つは $|A|$ であり、 $(A\mathbf{x}) \times (A\mathbf{y}) = |A|A(\mathbf{x} \times \mathbf{y})$
(cf. [4])。

3 1 次変換の不変方向

本節から、固有値・固有ベクトルに関連する具体例をいくつか紹介する。まず、本節では 1 次変換の不変方向について説明する。

1 次変換とは、主に 2 次元、または 3 次元の点から点への 1 次式による変換で、

$$\begin{cases} x' = a_1x + b_1y \\ y' = a_2x + b_2y \end{cases} \quad \text{または} \quad \begin{cases} x' = a_1x + b_1y + c_1z \\ y' = a_2x + b_2y + c_2z \\ z' = a_3x + b_3y + c_3z \end{cases} \quad (1)$$

の形に表されるものを指す。これは、それらの点の位置ベクトルと行列

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}' = \begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{bmatrix}$$

により $\mathbf{x}' = A\mathbf{x}$ と表される (3 次元も同様)。1 次変換は線形写像なので、基本ベクトルの像で決定する。すなわち、基本ベクトル

$$\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

に対し、

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2$$

より、

$$\mathbf{x}' = A\mathbf{x} = xA\mathbf{e}_1 + yA\mathbf{e}_2 = x \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} + y \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} \quad (2)$$

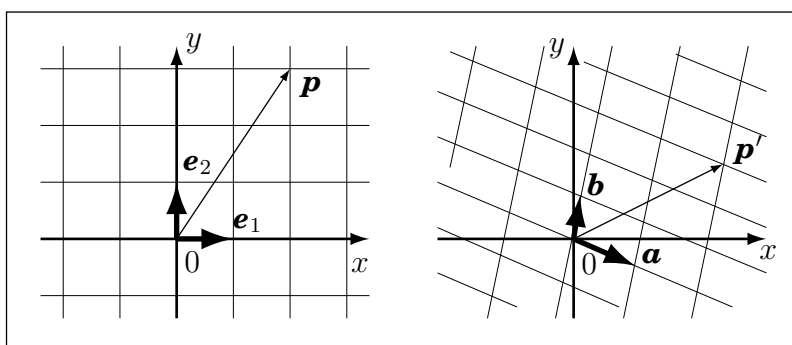


図 1: 基本ベクトルの変換先による格子での 1 次変換の表示

と表されるので、 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ に基づく格子が、 A により \mathbf{a}, \mathbf{b} に基づく格子の座標平面に変換されると見ることができる (図 1)。

この 1 次変換の様子を知る、もう一つの方法が、固有値、固有ベクトルによる不変方向の確認である。1 次変換の固有値がともに実数で、固有値、固有ベクトルを

$$A\mathbf{p}_1 = \lambda_1\mathbf{p}_1, \quad A\mathbf{p}_2 = \lambda_2\mathbf{p}_2$$

とすると、 \mathbf{p}_1 方向、 \mathbf{p}_2 方向のベクトルは、この 1 次変換で方向は不変で、拡大 (固有値が負なら反転も) のみとなる。例えば、

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix}$$

なら、

$$\phi_A(\lambda) = |\lambda E - A| = \begin{vmatrix} \lambda - 3 & 2 \\ -2 & \lambda + 2 \end{vmatrix} = \lambda^2 - \lambda - 2 = (\lambda - 2)(\lambda + 1)$$

なので、固有値は $\lambda_1 = -1, \lambda_2 = 2$, 固有ベクトルは、

$$\mathbf{p}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{p}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

となる。よってこの \mathbf{p}_1 の方向には反転され、 \mathbf{p}_2 の方向には 2 倍の拡大、ということになる (図 2)。

最初の基本ベクトルの変換よりも、むしろ不変方向に見る場合が都合がいい場合もあるだろう。

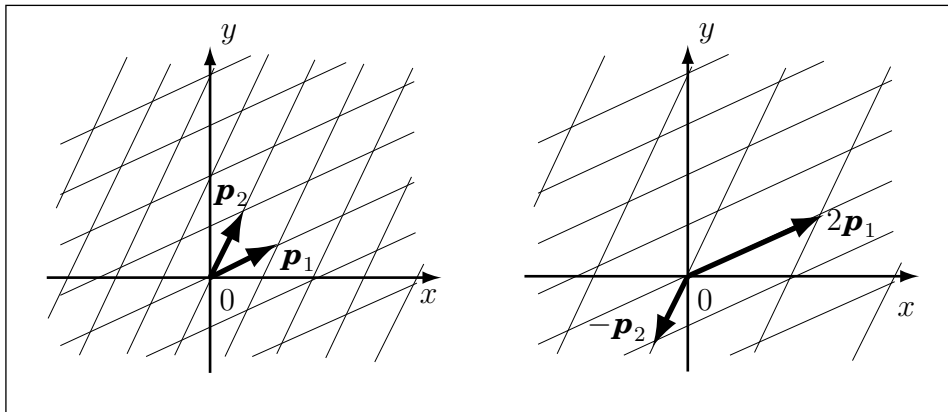


図 2: 固有ベクトル方向の格子

4 数列の漸化式の解

数列の漸化式には色々あるが、線形写像によって決まる漸化式、すなわち連立の 2 項間漸化式

$$\mathbf{x}_{n+1} = A\mathbf{x}_n \quad \left(\mathbf{x}_n = \begin{bmatrix} x_{1,n} \\ \vdots \\ x_{m,n} \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^m \right) \quad (3)$$

もよく使われる。例えば、複数の種の個体数の世代毎の変化、固定回路の複数接続、推移確率など。

また、逆に多項間漸化式を、(3) のような 2 項間の連立漸化式に直すこともできる。例えば、フィボナッチ数列として知られる 3 項間の漸化式

$$a_{n+2} = a_{n+1} + a_n$$

は、 $b_n = a_{n+1}$ とすれば、

$$b_{n+1} = a_{n+2} = a_{n+1} + a_n = a_n + b_n, \quad a_{n+1} = b_n$$

より、

$$\begin{bmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix}$$

の連立の 2 項間漸化式になる。

連立の漸化式 (3) から一般項を求めるには、 A が定数行列であれば、形式的には、

$$\mathbf{x}_n = A^n \mathbf{x}_0 \quad (4)$$

と求まるので、行列の n 乗が計算できれば難しくはない。その行列の n 乗を求めるために、通常は固有値、固有ベクトルを利用して対角化などを行うわけであるが、ここでは、実質的には同じであるが、対角化にはよらずに固有ベクトルを利用して一般項を求める方法を紹介する。

例えば、次のような連立漸化式を考える。

$$\begin{cases} a_{n+1} = \frac{a_n}{2} + \frac{b_n}{2} \\ b_{n+1} = \frac{a_n}{4} + \frac{3b_n}{4} \end{cases} \quad (5)$$

この一般項を求めるには、例えば b_n を消去して $\{a_n\}$ に関する 3 項漸化式から求める、という方法もあるが、ここでは固有ベクトル (左固有ベクトル) を利用する。(5) を行列化すると、

$$\mathbf{x}_{n+1} = A\mathbf{x}_n, \quad \mathbf{x}_n = \begin{bmatrix} a_n \\ b_n \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{bmatrix} \quad (6)$$

となる。 A の固有値は、

$$\phi_A(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda - \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{4} & \lambda - \frac{3}{4} \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{5\lambda}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{4}(\lambda - 1)(4\lambda - 1)$$

より $\lambda_1 = 1/4$, $\lambda_2 = 1$ となり、 λ_1 に対する左固有ベクトルは $\mathbf{q}_1 = [1 \ -1]$, λ_2 に対する左固有ベクトルは $\mathbf{q}_2 = [1 \ 2]$ が取れる。

この左固有ベクトル \mathbf{q}_j を (6) の左からかけると、

$$\mathbf{q}_j \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{q}_j A \mathbf{x}_n = \lambda_j \mathbf{q}_j \mathbf{x}_n \quad (\mathbf{q}_1 \mathbf{x}_n = a_n - b_n, \quad \mathbf{q}_2 \mathbf{x}_n = a_n + 2b_n) \quad (7)$$

のように漸化式がスカラー化され、数列 $\mathbf{q}_j \mathbf{x}_n$ が λ_j を公比とする等比数列になる。すなわち、

$$\mathbf{q}_1 \mathbf{x}_n = \frac{1}{4^n} \mathbf{q}_1 \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{q}_2 \mathbf{x}_n = \mathbf{q}_2 \mathbf{x}_0$$

となるので、

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 \\ \mathbf{q}_2 \end{bmatrix} \mathbf{x}_n &= \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{q}_1}{4^n} \\ \mathbf{q}_2 \end{bmatrix} \mathbf{x}_0, \\ \mathbf{x}_n &= \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 \\ \mathbf{q}_2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{q}_1}{4^n} \\ \mathbf{q}_2 \end{bmatrix} \mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \frac{1}{4^n} & -\frac{1}{4^n} \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{x}_0 \\ &= \frac{1}{3} \begin{bmatrix} \frac{2}{4^n} + 1 & -\frac{2}{4^n} + 2 \\ -\frac{1}{4^n} + 1 & \frac{1}{4^n} + 2 \end{bmatrix} \mathbf{x}_0 \end{aligned}$$

のように求めることができる。

重要なのは、行列形の線形の漸化式 (6) を、左固有ベクトルによりスカラーの漸化式 (7) に変換する部分であり、このように行列をスカラーに変換する固有ベクトルの使い方がひとつの典型的な利用法である。

5 連立微分方程式

次は、線形の連立微分方程式を単独化する例として、連成振動を紹介する。

自然長が L でバネ定数が k のバネを $x = 0$ の左の壁にとりつけ、その右端に質量 m のおもりをつける。そのおもりを右に引いて離すと、まさつを無視すれば、おもりの位置 $x = x(t)$ (t は時刻) は左右の単振動をする (図 3)。

$x(t)$ が満たす運動方程式は、フックの法則により、

$$m x'' = -k(x - L)$$

となるので、バネの伸びを $y(t) = x(t) - L$ とすると、 $y(t)$ は

$$y'' = -\alpha^2 y, \quad \alpha = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{8}$$

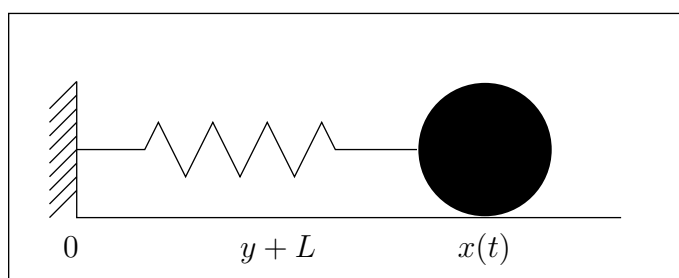


図 3: バネの単振動

を満たすが、この微分方程式の解は良く知られているように、

$$y = C_1 \cos at + C_2 \sin at = C_3 \sin(at + \beta) \quad (9)$$

となる。

連成振動とは、このバネとおもりが複数連なっている振動現象を指す。図 3 のおもりの右にさらにバネとおもり 1 組をつなげたものを考える。簡単のため、2 つのバネのバネ定数と自然長、2 つのおもりの質量は同じものとする (図 4)。

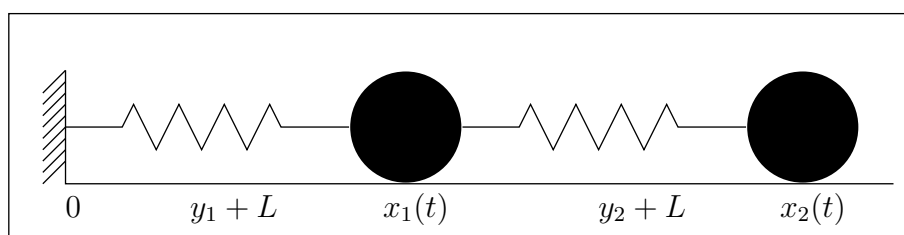


図 4: 連成振動

左のおもりの位置を $x_1(t)$ 、右のおもりの位置を $x_2(t)$ とし、左のバネの伸びを $y_1(t) = x_1(t) - L$ 、右のバネの伸びを $y_2(t) = x_2(t) - x_1(t) - L$ とする。このとき、 x_1, x_2 が満たす運動方程式は、

$$\begin{cases} mx_1'' = -ky_1 + ky_2 \\ mx_2'' = -ky_2 \end{cases}$$

なので、 $x_1 = y_1 + L$, $x_2 = y_1 + y_2 + 2L$ より、

$$\begin{cases} y_1'' &= -\alpha^2 y_1 + \alpha^2 y_2 \\ y_1'' + y_2'' &= -\alpha^2 y_2 \end{cases}$$

となり、

$$\begin{cases} y_1'' &= \alpha^2(-y_1 + y_2) \\ y_2'' &= \alpha^2(y_1 - 2y_2) \end{cases} \quad (10)$$

となる。これが y_j の連立微分方程式である。これを行列化すると

$$\mathbf{y}'' = \alpha^2 A \mathbf{y}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix} \quad (11)$$

となる。A の固有値は、

$$\phi_A(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda + 1 & -1 \\ -1 & \lambda + 2 \end{vmatrix} = \lambda^2 + 3\lambda + 1$$

より

$$\lambda = \frac{-3 + \sqrt{5}}{2}, \quad \frac{-3 - \sqrt{5}}{2} = -\omega_1, -\omega_2 \quad (\omega_j > 0)$$

となる。左固有ベクトルは、 $\mathbf{q}_j = [1 \ \lambda_j + 1] = [1 \ 1 - \omega_j]$ となり、これを (11) の左からかけることにより、

$$\mathbf{q}_j \mathbf{y}'' = (\mathbf{q}_j \mathbf{y})'' = \alpha^2 \mathbf{q}_j A \mathbf{y} = -\alpha^2 \omega_j (\mathbf{q}_j \mathbf{y}) \quad (\mathbf{q}_j \mathbf{y} = y_1 + (1 - \omega_j)y_2)$$

となって方程式がスカラー化され (8) の形になるので、その解は (9) より

$$\mathbf{q}_j \mathbf{y} = d_j \sin(\alpha \sqrt{\omega_j} t + \beta_j)$$

となって、

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 & 1 - \omega_1 \\ 1 & 1 - \omega_2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} d_1 \sin(\alpha \sqrt{\omega_1} t + \beta_1) \\ d_2 \sin(\alpha \sqrt{\omega_2} t + \beta_2) \end{bmatrix}$$

と求まることになる。

これも行列を固有ベクトルによってスカラー化することで解ける形になっている。また振動の性質もそのスカラー方向毎に現れることがわかる。

なお、この場合の連成振動は、振動数が

$$\frac{\alpha\sqrt{\omega_1}}{2\pi} = \frac{\alpha(\sqrt{5}-1)}{4\pi}, \quad \frac{\alpha\sqrt{\omega_2}}{2\pi} = \frac{\alpha(\sqrt{5}+1)}{4\pi}$$

の、有理数比ではない 2 つの振動の合成となり、よってそれは周期的ではないかなり複雑な振動となる。

6 多次元データの主成分分析

次はデータ解析で用いられる主成分分析を紹介する。

例えば、個々の学生の複数科目の成績や学習時間のデータのように、1 つのデータに複数の情報がついている多次元データについて、その傾向を知るためや、データの次元の低減化などのために「主成分分析」という手法が用いられることがある。2 次元データの場合の回帰直線に多少似たところもある。

今、 N 個の m 次元データ

$$\mathbf{x}_j = \begin{bmatrix} x_{1,j} \\ \vdots \\ x_{m,j} \end{bmatrix} \quad (1 \leq j \leq N)$$

を考える。各 i 行データ $x_{i,j}$ ($1 \leq j \leq N$) の標本平均を m_i 、標本分散を s_i^2 とすると、

$$m_i = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_{i,k}, \quad s_i^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N (x_{i,k} - m_i)^2$$

となり、これにより各 $x_{i,j}$ を正規化した値を

$$\bar{x}_{i,j} = \frac{x_{i,j} - m_i}{s_i}$$

とする。これにより、 $\bar{x}_{i,j}$ は j に関する標本平均が 0、標本分散が 1 となり、 m 次元データ

$$\bar{\mathbf{x}}_j = \begin{bmatrix} \bar{x}_{1,j} \\ \vdots \\ \bar{x}_{m,j} \end{bmatrix}$$

の各行は「同じような大きさ」のデータとなる。それに対し、 $\bar{\mathbf{x}}_j$ を位置ベクトルとする m 次元空間の点 P_j の散布図に対し、データが最も長く伸びている方向 (回帰直線のようなもの) を探すのが主成分分析である。

具体的には、 \mathbf{R}^m の任意の単位ベクトル \mathbf{h} に対して、このデータの \mathbf{h} 方向への正射影 $(\mathbf{h}, \bar{\mathbf{x}}_j)$ (内積) の標本分散 $V = V(\mathbf{h})$ が最大となる方向 \mathbf{h} を求めることが目標となる。

$(\mathbf{h}, \bar{\mathbf{x}}_j)$ ($1 \leq j \leq N$) の平均は、

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\mathbf{h}, \bar{\mathbf{x}}_k) = \left(\mathbf{h}, \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \bar{\mathbf{x}}_k \right) = (\mathbf{h}, \mathbf{0}) = 0$$

なので、標本分散 $V(\mathbf{h})$ は、

$$V(\mathbf{h}) = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N (\mathbf{h}, \bar{\mathbf{x}}_k)^2 \quad (12)$$

となる。

なお、原点を通る \mathbf{h} 方向の直線 l_h に P_j から引いた垂線の足を Q_j とすると (図 5)、

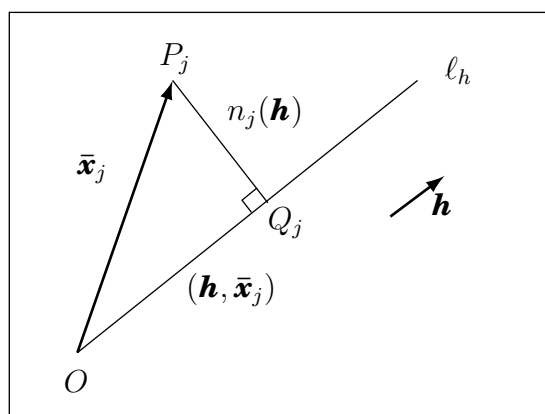
$$(\mathbf{h}, \bar{\mathbf{x}}_j) = |OQ_j|, \quad n_j(\mathbf{h}) = |P_jQ_j|$$

なので、 $\triangle OP_jQ_j$ は Q_j が直角の直角三角形なので、

$$(\mathbf{h}, \bar{\mathbf{x}}_j)^2 = |OQ_j|^2 = |OP_j|^2 - |P_jQ_j|^2 = |\bar{\mathbf{x}}_j|^2 - n_j(\mathbf{h})^2$$

となり、 $V(\mathbf{h})$ は

$$V(\mathbf{h}) = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N |\bar{\mathbf{x}}_k|^2 - \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N n_k(\mathbf{h})^2$$

図 5: P_j, Q_j

なので、 $V(\mathbf{h})$ を最大にするような方向 \mathbf{h} は、 P_j と l_h との距離の平方和

$$\sum_{k=1}^N n_j(\mathbf{h})^2$$

を最小にする方向、という風に見ることもでき、2次元データに対する回帰直線に似たものになる。ただし回帰直線は、データ点から回帰直線までの距離ではなく、データ点と y 方向の回帰直線までの距離を考えるので、実際には l_h は回帰直線とは少し違うものになる (cf.[1])。

さて、(12) の内積の平方は、行列と見て、

$$(\mathbf{h}, \bar{\mathbf{x}}_j)^2 = ({}^t\mathbf{h}\bar{\mathbf{x}}_j)({}^t\bar{\mathbf{x}}_j\mathbf{h}) = {}^t\mathbf{h}(\bar{\mathbf{x}}_j {}^t\bar{\mathbf{x}}_j)\mathbf{h}$$

と書けるので、 $V(\mathbf{h})$ は、

$$V(\mathbf{h}) = {}^t\mathbf{h}B\mathbf{h}, \quad B = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N \bar{\mathbf{x}}_j {}^t\bar{\mathbf{x}}_j = [b_{i,j}] \quad (13)$$

となり、さらにこの $b_{i,j}$ は、

$$b_{i,j} = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N \bar{x}_{i,k} \bar{x}_{j,k} = \frac{1}{N-1} \frac{1}{s_i s_j} \sum_{k=1}^N (x_{i,k} - m_i)(x_{j,k} - m_j) = \frac{s_{i,j}}{s_i s_j}$$

となり、 $s_{i,j}$ は \mathbf{x}_k の i 行と j 行のデータの標本共分散

$$s_{i,j} = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N (x_{i,k} - m_i)(x_{j,k} - m_j)$$

であるから、 $b_{i,j}$ は i 行と j 行の相関係数、すなわち B は \mathbf{x}_k の各行に関する相関行列になる。

B は対称行列であり、よって B は m 個の実数の固有値

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m$$

および正規直交基底をなす固有ベクトル $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_m$ を持ち、 $P = [\mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_m]$ は直交行列で、

$${}^tPBP = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_m \end{bmatrix}$$

となる。よって、 $\bar{\mathbf{h}} = {}^tP\mathbf{h}$ ($\mathbf{h} = P\bar{\mathbf{h}}$) とすると、

$$\begin{aligned} V(\mathbf{h}) &= {}^t\mathbf{h}B\mathbf{h} = {}^t\mathbf{h}P({}^tPBP){}^tP\mathbf{h} = {}^t\bar{\mathbf{h}} \begin{bmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_m \end{bmatrix} \bar{\mathbf{h}} \\ &= \lambda_1 \bar{h}_1^2 + \dots + \lambda_m \bar{h}_m^2 \end{aligned} \quad (14)$$

となる。 $V(\mathbf{h})$ は任意の \mathbf{h} に対して 0 以上だから $\lambda_m \geq 0$ で、 P は直交行列だから

$$|\bar{\mathbf{h}}| = |{}^tP\mathbf{h}| = |\mathbf{h}| = 1$$

なので、(14) より $V(\mathbf{h})$ の最大値は λ_1 で、 $\bar{\mathbf{h}} = \mathbf{e}_1$ 、すなわち $\mathbf{h} = P\mathbf{e}_1 = \mathbf{p}_1$ のときにその最大値を取る。つまり最大固有値に対する固有ベクトル \mathbf{p}_1 が主成分方向となる。 \mathbf{p}_2 は、それに垂直な第 2 主成分方向となり、以下同様となる。

つまり、軸を $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_m$ で考えれば、最初のいくつかの軸にデータの傾向が顕著に現れ、最後の軸の方ではデータ毎の違いが小さくなっている。そのため、最初のいくつかの軸成分のみを取ることによってデータの傾向をあまり変えずにデータの次元を削減することができるようになる。

7 回転行列の回転軸と回転角

最後に、3次元回転行列の回転軸と回転角の取得について説明する。

3次元の1次変換の変換行列 A が直交行列で $|A| = 1$ のとき、この1次変換は**回転変換**、 A は**回転行列**と呼ばれる。それは、 $A = [\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c}]$ の列ベクトル $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ は、正規直交基底で、かつ軸方向の基本ベクトル $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ と同じ手系、すなわち鏡像反転がなく何回かの回転で $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ に重なることから来ている。

通常3次元の回転変換は、 x 軸や z 軸の回りの3回の回転(オイラー角)の合成で表現されることが多いが(cf.[4])、ここでは、その回転行列がある回転軸に対する1回の回転で表現されること、およびその回転軸方向、回転角の取得方法について考える。

まず、前者であるが、まず回転行列は $\lambda = |A| = 1$ の固有値を持ち、それに対する実数成分の単位固有ベクトル \mathbf{p} が取れる。

$$A\mathbf{p} = \mathbf{p}$$

\mathbf{p} に垂直な単位ベクトル \mathbf{q} を1つ取り、 $\mathbf{r} = \mathbf{p} \times \mathbf{q}$ とすると、 $\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{r}$ は $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ と同じ手系の正規直交基底となる。今、

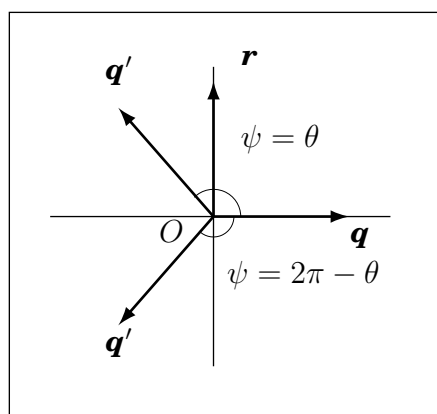
$$A\mathbf{q} = \mathbf{q}', \quad A\mathbf{r} = \mathbf{r}'$$

とすると、 A は長さ、内積を保存するので、 \mathbf{q}' と \mathbf{r}' は単位ベクトルで、 $\mathbf{p}, \mathbf{q}', \mathbf{r}'$ は互いに垂直なベクトルとなる。さらに、

$$\mathbf{q}' \times \mathbf{r}' = (A\mathbf{q}) \times (A\mathbf{r}) = A(\mathbf{q} \times \mathbf{r}) = A\mathbf{p} = \mathbf{p}$$

なので、 $\mathbf{p}, \mathbf{q}', \mathbf{r}'$ も $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ と同じ手系の正規直交基底となる。これで、 A が、 \mathbf{p} を回転軸とし、 \mathbf{p} に垂直な平面内の \mathbf{q} から \mathbf{q}' への回転を行う行列であることが言えたことになる。

次に回転軸、回転角の取得だが、回転軸については固有値1の単位固有ベクトル \mathbf{p} を取ればよい。回転軸 \mathbf{p} に関する回転角 θ ($0 \leq \theta < 2\pi$) については、 \mathbf{q} と \mathbf{q}' の間の角 ψ ($0 \leq \psi \leq \pi$) は $\psi = \theta$ かまたは $\psi = 2\pi - \theta$ となるが、 ψ は内積 $(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \cos \psi$ で求められ、 θ が ψ ($0 \leq \theta < \pi$) か $2\pi - \psi$ ($\pi \leq \theta < 2\pi$) かは、内積 $(\mathbf{r}, \mathbf{q}')$ の符号で確認できる(図6)。正なら $0 < \theta < \pi$ より $\theta = \psi$ であり、負なら $\pi < \theta < 2\pi$ より $\theta = 2\pi - \psi$ となる。なお、後者の場合は、回転軸を $-\mathbf{p}$ として、回転角を ψ としてもよい。これで回転角も計算できることになる。なお、 ψ は \mathbf{r} と \mathbf{r}' の間の角としても求められる。

図 6: ψ と θ

例えば、

$$A = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & 1 & -2 \\ 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

は、各列ベクトルは長さが 1 で、互いに直交し、 $|A| = 1$ なので回転行列。

$$\begin{aligned} \phi_A(\lambda) &= \frac{1}{27} \begin{vmatrix} 3\lambda - 2 & -1 & 2 \\ -1 & 3\lambda - 2 & -2 \\ -2 & 2 & 3\lambda - 1 \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{27} \left\{ (3\lambda - 2)^2(3\lambda - 1) - 8 + 8(3\lambda - 2) - (3\lambda - 1) \right\} \\ &= \frac{1}{3} (3\lambda^3 - 5\lambda^2 + 5\lambda - 3) = \frac{1}{3} (\lambda - 1)(3\lambda^2 - 2\lambda + 3) \end{aligned}$$

より、固有値は $\lambda = 1, (1 \pm 2\sqrt{2}i)/3$ となる。固有値 1 に対する固有ベクトルは、 $E - A$ を行基本変形すると

$$E - A = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 \\ -1 & 1 & -2 \\ -2 & 2 & 2 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

なので、 \mathbf{p} は

$$\mathbf{p} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

と取れる。これに垂直な単位ベクトルは

$$\mathbf{q} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

と取れ、 \mathbf{r} は

$$\mathbf{r} = \mathbf{p} \times \mathbf{q} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

となる。

$$\mathbf{q}' = A\mathbf{q} = \frac{1}{3\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}' = A\mathbf{r} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

なので、

$$(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \frac{1}{3} = \cos \psi, \quad (\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{4}{3\sqrt{2}} < 0$$

より $\theta = 2\pi - \psi = 2\pi - \cos^{-1}(1/3)$ となる。または、 $-\mathbf{p}$ の回りの $\cos^{-1}(1/3)$ 回転、ということもできる。

参考文献

- [1] 竹野茂治、「相関係数に関する一考察」(2004),
<http://takeno.iee.niit.ac.jp/~shige/math/lecture/graduate/data/core11.pdf>

- [2] 竹野茂治、「遺伝の比率の数列について」(2007),
<http://takeno.iee.niit.ac.jp/~shige/math/lecture/misc/data/iden1.pdf>
- [3] 竹野茂治、「数列の定数係数線形漸化式について」(2009),
<http://takeno.iee.niit.ac.jp/~shige/math/lecture/misc/data/series2.pdf>
- [4] 竹野茂治、「直交行列と回転変換」(2021),
<http://takeno.iee.niit.ac.jp/~shige/math/lecture/misc/data/exponential1.pdf>