

『AI・データサイエンスのための数学入門』学習補助資料

交差項を消して、図形の軸を読む

2 次形式・直交対角化・楕円と双曲線

1 交差項の係数は、半分ずつ行列に入れる

2 次形式とは、変数の 2 次の項だけからなる式です。例えば

$$q(x, y) = ax^2 + 2bxy + cy^2 = \begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}.$$

非対角成分から bxy が 2 回現れるので、交差項の係数が 4 なら、行列の非対角成分は 2 です。

直交対角化が、そのまま平方和への変形になる

対称行列 A について $P^T A P = \Lambda$ 、 $P^T P = I$ とします。元の座標を $\mathbf{x}$ 、新しい座標を $\mathbf{X}$ として $\mathbf{x} = P\mathbf{X}$ とおくと、

$$q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T A \mathbf{x} = (P\mathbf{X})^T A (P\mathbf{X}) = \mathbf{X}^T P^T A P \mathbf{X} = \lambda_1 X^2 + \lambda_2 Y^2.$$

直交する固有ベクトルを新しい軸に選ぶことで交差項が消えます。逆の座標変換は $\mathbf{X} = P^T \mathbf{x}$ です。

対角化と 2 次形式の変換の違い

線形写像の基底変換は $P^{-1}AP$ 、2 次形式の変換は $P^T A P$ です。直交行列なら $P^{-1} = P^T$ なので一致します。一般の可逆行列では、両者は同じではありません。

直交変換と伸縮を分ける

直交変換は長さや角度を保ちます。したがって、楕円を直交変換だけで円にすることは、元が円の場合を除いてできません。円の式に直すには、その後に軸ごとのスケーリングが必要です。

用語の整理

$q(x, y)$ は数値を返す **2 次形式**、 $q(x, y) = c$ は一定の値を取る点を集めた**等高線**です。同じ 2 次形式でも、右辺 c によって図形が存在しない場合や、1 点になる場合があります。

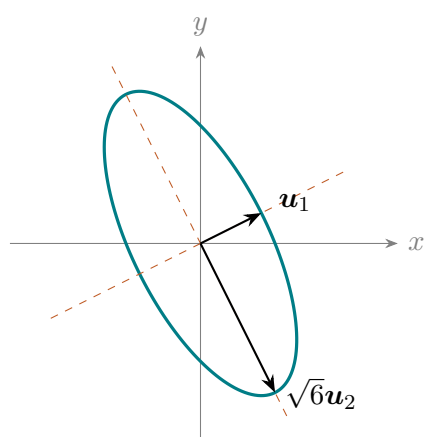
2 本文の楕円を、正確な軸と長さで描く

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}, \quad \det(A - \lambda I) = \lambda^2 - 7\lambda + 6 = (\lambda - 6)(\lambda - 1).$$

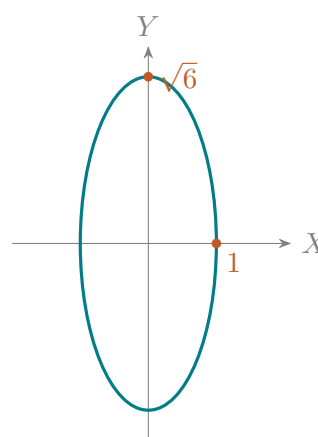
単位固有ベクトルを $\mathbf{u}_1 = (2, 1)^\top / \sqrt{5}$ 、 $\mathbf{u}_2 = (1, -2)^\top / \sqrt{5}$ とすると、本文の $P = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)$ を得ます。 $\mathbf{x} = P(X, Y)^\top$ により

$$5x^2 + 4xy + 2y^2 = 6 \iff X^2 + \frac{Y^2}{6} = 1.$$

短軸は $\mathbf{u}_1$ 方向で半軸長 1、長軸は $\mathbf{u}_2$ 方向で半軸長 $\sqrt{6}$ です。



元の座標



主軸座標

左右は同一縮尺。長軸は元の座標で右下がり。固有値が大きい方向ほど、固定した等高線の半軸長は短い。

本文の P は、純粋な回転ではない

$\det P = -1$ なので、本文の直交変換は向きの反転を含みます。第 2 列の符号を変えた $Q = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ なら $\det Q = 1$ で、回転行列になります。どちらも標準形は $6X^2 + Y^2$ です。

最後に $U = X$ 、 $V = Y/\sqrt{6}$ とおけば $U^2 + V^2 = 1$ です。この操作は軸ごとに単位を変える伸縮であり、長さは一般に保存されません。

3 固有値の符号と右辺を、合わせて分類する

原点中心の方程式 $\lambda_1 X^2 + \lambda_2 Y^2 = c$ を考えます。必要なら式全体に -1 を掛け、軸の順序を入れ替えると、以下の表に帰着できます。

左辺	右辺の条件	実平面上の図形
$\lambda_1 X^2 + \lambda_2 Y^2$ $\lambda_1, \lambda_2 > 0$	$c > 0$ $c = 0$ $c < 0$	楕円（係数が等しければ円） 原点 1 点 点を持たない
$\lambda_1 X^2 - \mu Y^2$ $\lambda_1, \mu > 0$	$c \neq 0$ $c = 0$	双曲線 交わる 2 直線
$\lambda_1 X^2, \lambda_1 > 0$	$c > 0$ $c = 0$ $c < 0$	平行な 2 直線 1 直線 $X = 0$ 点を持たない
0	$c = 0$ $c \neq 0$	平面全体 点を持たない

例：同じ行列でも等高線は変わる

$X^2 + Y^2 = 1$ は円ですが、 $X^2 + Y^2 = 0$ は原点だけ、 $X^2 + Y^2 = -1$ には実数解がありません。行列式が正であることだけから「必ず楕円が現れる」とは結論できません。

双曲線と、交わる 2 直線

$$X^2 - Y^2 = 1 \quad \text{は双曲線,} \quad X^2 - Y^2 = 0 \iff (X - Y)(X + Y) = 0.$$

後者は $Y = X$ と $Y = -X$ の 2 直線です。

正定値の意味

対称行列 A について、すべての非零 x で $x^\top A x > 0$ となるとき、 A は正定値といいます。直交座標で $\sum_i \lambda_i X_i^2$ と表せるため、これは**固有値がすべて正**であることと同値です。正定値でも、右辺が負の等高線は存在しません。

4 放物線には 1 次項が重要になる

$\det A = 0$ は 2 次部分が退化していることを表しますが、1 次項を含む曲線全体が退化しているとは限りません。

$$x^2 - y = 0$$

では、2 次部分の行列は $\text{diag}(1, 0)$ で行列式は 0 ですが、曲線は非退化な放物線です。一方、 $x^2 = 1$ なら平行な 2 直線になります。

回転と平行移動を使い分ける

一般の 2 次式を

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top A \mathbf{x} + \mathbf{b}^\top \mathbf{x} + c_0$$

と書きます。 A が可逆なら、 $\mathbf{h} = -\frac{1}{2}A^{-1}\mathbf{b}$ とおき、 $\mathbf{x} = \mathbf{h} + \mathbf{u}$ とすると、

$$f(\mathbf{h} + \mathbf{u}) = \mathbf{u}^\top A \mathbf{u} + c_0 - \frac{1}{4}\mathbf{b}^\top A^{-1}\mathbf{b}.$$

これは行列による平方完成です。平行移動で 1 次項を消し、その後に直交変換で交差項を消せます。 A が可逆でない場合には、この公式は使えません。

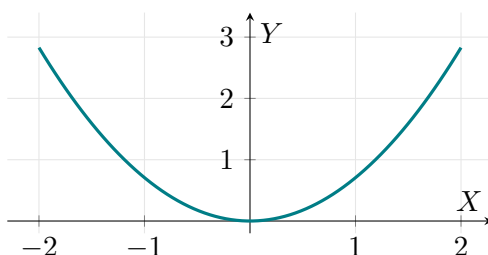
具体例：傾いた放物線を直す

$$(x + y)^2 - 2(x - y) = 0$$

に対し、 $X = (x + y)/\sqrt{2}$ 、 $Y = (x - y)/\sqrt{2}$ とすると、

$$2X^2 - 2\sqrt{2}Y = 0 \iff Y = \frac{X^2}{\sqrt{2}}.$$

零固有値方向に残った 1 次項が、放物線の形を作っています。



主軸座標で見た放物線。2 次形式だけの式と、1 次項を含む 2 次曲線の式を区別する。

5 本文の練習問題：解答

問 1 : $3x^2 + 4xy + 3y^2$

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad \det(A - \lambda I) = (3 - \lambda)^2 - 4 = (\lambda - 5)(\lambda - 1).$$

固有値 5, 1 に対応する単位固有ベクトルは、それぞれ $(1, 1)^\top/\sqrt{2}$, $(1, -1)^\top/\sqrt{2}$ です。したがって

$$X = \frac{x+y}{\sqrt{2}}, \quad Y = \frac{x-y}{\sqrt{2}} \implies Q = 5X^2 + Y^2.$$

実際、 $x = (X + Y)/\sqrt{2}$, $y = (X - Y)/\sqrt{2}$ を代入しても交差項が消えることを確認できます。

問 2 : $5x^2 + 6xy + 5y^2 = 8$

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}, \quad \det(A - \lambda I) = (\lambda - 8)(\lambda - 2).$$

問 1 と同じ主軸座標を使うと、

$$8X^2 + 2Y^2 = 8 \iff X^2 + \frac{Y^2}{4} = 1.$$

両固有値が正で右辺も正なので楕円です。半軸長は X 方向で 1、 Y 方向で 2。元の座標では短軸が $y = x$ 、長軸が $y = -x$ です。

問 3 : $A = \begin{pmatrix} 2 & a \\ a & 2 \end{pmatrix}$

$$\det(A - \lambda I) = (2 - \lambda)^2 - a^2, \quad \lambda = 2 + a, 2 - a.$$

両方が正となる条件は $2 + a > 0$ かつ $2 - a > 0$ 、すなわち

$$\boxed{-2 < a < 2}.$$

境界の値も確かめる

$a = 2$ では $Q = 2(x + y)^2$ 、 $a = -2$ では $Q = 2(x - y)^2$ です。値は常に非負ですが、非零ベクトルでも 0 になる方向があるため、正定値ではありません。 $|a| > 2$ では固有値の符号が異なります。

注意：「正」と「非負」は異なる条件。固有値 0 を含めるかどうかで、等高線の形や行列の可逆性が変わる。

6 PCA との関係と追加問題

交差項と共分散の関係は、行列の役割による

一般の 2 次形式の交差項が、そのまま観測データの相関を意味するわけではありません。 Σ が中心化データの共分散行列である場合に、直交変換 $\mathbf{Z} = P^T \mathbf{X}$ によって

$$\text{Cov}(\mathbf{Z}) = P^T \Sigma P = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$$

となり、新しい成分ごうしの共分散が 0 になります。これが PCA の基礎です。無相関だけから独立とは結論できません。

楕円の半軸と PCA の分散を混同しない

A が正定値、 $c > 0$ のとき、 $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} = c$ の半軸長は $\sqrt{c/\lambda_i}$ です。一方、正定値の共分散行列 Σ による $\mathbf{x}^T \Sigma^{-1} \mathbf{x} = c$ では半軸長は $\sqrt{c\lambda_i}$ 。後者では分散が大きい方向に楕円が長くなります。

追加問 A：平方差への変換

$Q = 2xy$ を $X = (x + y)/\sqrt{2}$ 、 $Y = (x - y)/\sqrt{2}$ で表し、 $Q = 1$ と $Q = 0$ を分類してください。

追加問 B：正定値でも楕円にならない？

$3x^2 + 4xy + 3y^2 = -1$ を満たす実数の点は存在しますか。

追加問 C：平行移動も使う

$3x^2 + 2xy + 3y^2 - 8x - 8y = 0$ の中心、主軸方向、半軸長を求めてください。

追加問題の解答

A $Q = X^2 - Y^2$ 。 $Q = 1$ は双曲線、 $Q = 0$ は $Y = \pm X$ の 2 直線です。元の座標では $x = 0$ または $y = 0$ です。

B 存在しません。標準形は $5X^2 + Y^2 = -1$ で、左辺は非負です。

C 中心は $(1, 1)$ 。 $u = x - 1, v = y - 1$ とおくと $3u^2 + 2uv + 3v^2 = 8$ です。 $X = (u + v)/\sqrt{2}, Y = (u - v)/\sqrt{2}$ により $4X^2 + 2Y^2 = 8$ 。中心を通る $(1, 1)^T$ 方向が半軸長 $\sqrt{2}$ 、 $(1, -1)^T$ 方向が半軸長 2 です。