2 次形式とグラフ

S16M079 三谷 和己

1　2 次形式について

自然数 n に対し，n 次の実対称行列 A が与えられたとする．$\boldsymbol{x}$ を $\mathbb{R}^n$ の列ベクトルとし，${}^t\boldsymbol{x}$ でその転置を表すとき写像 $q_A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R};\, \boldsymbol{x} \mapsto {}^t\boldsymbol{x}A\boldsymbol{x}$ を A の 2 **次形式**という．

定義 1.1. 0 でない任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対し $q_A(\boldsymbol{x}) > 0$ が成り立つとき，q_A は**正定値**であるという．

線形代数の知識より実対称行列は，適当な直交行列で対角化できて固有値は必ず実数になるのだった．さらに 2 次形式の正定値性に関して次のことが成立する．

補題 1.2. 2 次形式 q_A は正定値 $\Longleftrightarrow$ A の固有値は全て正．特にこのとき，A の行列式 $|A|$ は正．

Proof. まず A の固有値を $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ と表示する．すると行列式は $|A| = \lambda_1 \cdots \lambda_n$ と書けることに注意する．($\Rightarrow$) 各 i に対し，固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i$ を $A\boldsymbol{x}_i = \lambda_i \boldsymbol{x}_i$ を満たすようにとる．すると $q_A(\boldsymbol{x}_i) = {}^t\boldsymbol{x}_i \lambda_i \boldsymbol{x}_i = \lambda_i ||\boldsymbol{x}_i||^2$ となる．仮定より $q_A(\boldsymbol{x}_i) > 0$ なので λ_i は正となる．($\Leftarrow$) A が直交行列 P で対角化されているとき，0 でない任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対し，$\boldsymbol{y} = {}^t(y_1, \ldots, y_n) := P^{-1}\boldsymbol{x}$ とおく．すると，$q_A(\boldsymbol{x}) = q_A(P\boldsymbol{y}) = {}^t\boldsymbol{y}P^{-1}AP\boldsymbol{y} = {}^t\boldsymbol{y}\mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)\boldsymbol{y} = \lambda_1 y_1^2 + \cdots + \lambda_n y_n^2$ となる．ここで $\mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$ は対角に $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ が並んだ対角行列．よって $\boldsymbol{y} \neq 0$ であることと仮定より $q_A(\boldsymbol{x}) > 0$ とわかるので，q_A は正定値をとる．　□

例． 2 次の実対称行列 $A = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$ の 2 次形式は $q_A(\boldsymbol{x}) = 3x_1^2 - 2x_1x_2 + 3x_2^2$ である．この 2 次形式が正定値をとるかすぐには判断しにくいが，A の固有値は $2, 4$ なので補題 1.2 より q_A は正定値をとるとわかる．また，A を対角化する直交行列として $P = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ がとれ，証明中にあるように $\boldsymbol{y} = P^{-1}\boldsymbol{x}$ とおけば $q_A(\boldsymbol{x}) = 2y_1^2 + 4y_2^2$ と簡単な形 (標準形) になる．

定義 1.3. 行列 $A = (a_{ij})_{1 \le i,j \le n}$ に対し，$A_{[s]} = (a_{ij})_{1 \le i,j \le s}$ $(s = 1, 2, \ldots, n)$ を A の**主小行列**という．

定理 1.4. 2 次形式 q_A が正定値 $\Longleftrightarrow$ A の各主小行列式 $|A_{[s]}|$ $(s = 1, 2, \ldots, n)$ が正．

Proof. ($\Rightarrow$) 各 s に対し，$\boldsymbol{x} = {}^t(x_1, x_2, \ldots, x_s, 0, \ldots, 0)$ として考えると，${}^t\boldsymbol{x}A\boldsymbol{x} = {}^t\boldsymbol{x}_{[s]}A_{[s]}\boldsymbol{x}_{[s]}$ となる．ここで $\boldsymbol{x}_{[s]} = {}^t(x_1, x_2, \ldots, x_s)$ とおいている．よって，$q_{A_{[s]}}(\boldsymbol{x}_{[s]}) = q_A(\boldsymbol{x})$．従って仮定より $q_{A_{[s]}}$ も正定値をとる．従って補題 1.2 より $|A_{[s]}|$ は正とわかる．($\Leftarrow$)A を上手く対角化し対角要素 (固有値) が全て正となることを示す．まず A を次のようなブロック行列に分割する．

$$A = \left(\begin{array}{c|c} A_{[n-1]} & \boldsymbol{a} \\ \hline {}^t\boldsymbol{a} & a_{nn} \end{array}\right)$$

ここで $\boldsymbol{a}$ は $\mathbb{R}^{n-1}$ の適切な列ベクトル．仮定より $|A_{[n-1]}|$ は正で，特にこのとき $A_{[n-1]}$ は正則とわかるので上三角行列 $Q_1 = \left(\begin{array}{c|c} I & -A_{[n-1]}^{-1}\boldsymbol{a} \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right)$ を考えることができる．ここで I は単位行列．いま，${}^t(A_{[n-1]}^{-1}) = ({}^tA_{[n-1]})^{-1}$ であることに注意して計算すると，適当な $\mu_n \in \mathbb{R}$ を用いて，

$${}^tQ_1AQ_1 = \left(\begin{array}{c|c} A_{[n-1]} & 0 \\ \hline 0 & \mu_n \end{array}\right)$$

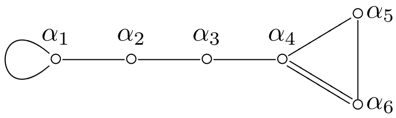
となることがわかる．特に μ_n は A の固有値である．ここで両辺の行列式をとると $|A| = |A_{[n-1]}|\mu_n$ となるから，仮定より $\mu_n > 0$ とわかった．次に，$A_{[n-1]}$ をブロック行列に分割し，$A_{[n-1]} = \left(\begin{array}{c|c} A_{[n-2]} & \boldsymbol{b} \\ \hline {}^t\boldsymbol{b} & a_{n-1n-1} \end{array}\right)$ と書く．ここで $\boldsymbol{b}$ は $\mathbb{R}^{n-2}$ の適切な列ベクトル．また仮定より $A_{[n-2]}$ は正則なので，上三角行列 $Q_2 = \left(\begin{array}{c|c|c} I & -A_{[n-2]}^{-1}\boldsymbol{b} & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$ を考えることができる．計算により適当な $\mu_{n-1} \in \mathbb{R}$ を用いて次のようになる．

$$
{}^tQ_2({}^tQ_1AQ_1)Q_2 = \left(\begin{array}{c|c|c} A_{[n-2]} & 0 & 0 \\ \hline 0 & \mu_{n-1} & 0 \\ \hline 0 & 0 & \mu_n \end{array}\right)
$$

両辺の行列式をとると $|A| = |A_{[n-2]}|\mu_{n-1}\mu_n$ となる．ここで仮定と $\mu_n > 0$ から $\mu_{n-1} > 0$ がわかる．この操作を繰り返すと対角要素 (固有値) が全て正の対角行列になるので，補題 1.2 より q_A は正定値をとる． □

2　グラフと 2 次形式

本稿で扱う**グラフ**とは，有限個の頂点とそれらを結ぶ有限個の辺 (重複及びループも許す) で構成される図形のことである．例えば，

$\Gamma =$ 

グラフ Γ の頂点を $\{\alpha_1, \ldots, \alpha_n\}$ とラベルをつけ，頂点 α_i と α_j を結ぶ Γ の辺の本数を d_{ij} と書く．このとき n 次正方行列 $M(\Gamma) = (a_{ij})_{1 \le i,j \le n}$ を次で定義すれば，$d_{ij} = d_{ji}$ より $M(\Gamma)$ は対称行列となる．

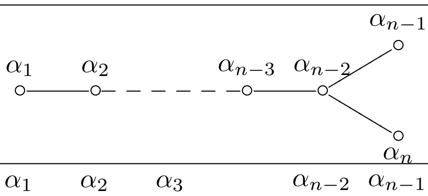
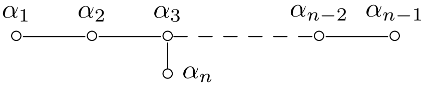
$$
a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if} \ \ i = j, \\ -\frac{1}{2}d_{ij} & \text{if} \ \ i \neq j. \end{cases}
$$

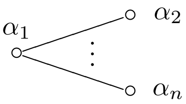
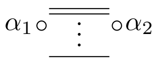
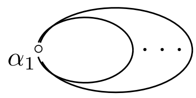
このときの 2 次形式 $q_{M(\Gamma)}$ を**グラフ Γ に付随する 2 次形式**という．

グラフに付随する 2 次形式の正定値性について次の問題を設定する．

問題．付随する 2 次形式が正定値をとるグラフを決定せよ．

問題に取り掛かる前にグラフと付随する 2 次形式の例をいくつか挙げる．

	Γ	$q_{M(\Gamma)}$
例 1($n \geq 1$)	$A_n =$ 	$x_1^2 + \cdots + x_n^2 - x_1x_2 - \cdots - x_{n-1}x_n$
例 2($n \geq 4$)	$D_n =$ 	$x_1^2 + \cdots + x_n^2 - x_1x_2 - \cdots - x_{n-2}x_{n-1} - x_{n-2}x_n$
例 3($n \geq 6$)	$E_n =$ 	$x_1^2 + \cdots + x_n^2 - x_1x_2 - \cdots - x_{n-2}x_{n-1} - x_3x_n$

	Γ		$q_{M(\Gamma)}$
例 4	1 つの頂点が $n-1$ 個の頂点と結ばれているグラフ		$x_1^2+\cdots+x_n^2-x_1(x_2+\cdots+x_n)$
例5	2 つの頂点を結ぶ辺が n 本あるグラフ		$x_1^2+x_2^2-nx_1x_2$
例 6	n 回ループのあるグラフ		$(1-n)x_1^2$

注意． グラフ Γ に対する対称行列 $M(\Gamma)$ は, 頂点のラベルを変えるとその見かけは変わる．いま, グラフ Γ の頂点のラベルを変えた対称行列を A とすると, ラベルの付け替えに応じた置換行列 P により $A=P^{-1}M(\Gamma)P$ と書けるので $|M(\Gamma)|=|A|$ とわかる．よって正定値性は頂点のラベルのとり方によらない.

以後, $q_{M(\Gamma)}$ の正定値性を調べるとき行列式の正負さえわかれば良い (= 定理 1.4) ので, 計算を簡単にするために $M'(\Gamma):=2M(\Gamma)$ とおき, これについて調べていく.

補題 2.1. $|M'(A_n)|=n+1$, $|M'(D_n)|=4$. また $q_{M(A_n)}$ と $q_{M(D_n)}$ は正定値.

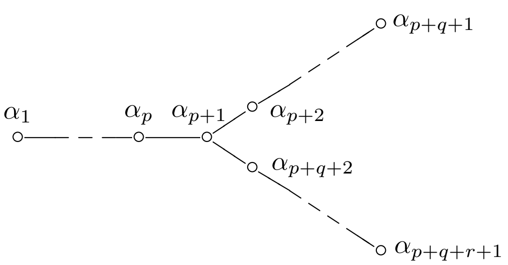
Proof. $M'(A_n)$ と $M'(D_n)$ の行列式は余因子展開で帰納的に $|M'(A_n)|=n+1$, $|M'(D_n)|=4$ と計算できる．また, A 型のグラフの主小行列式は $|M'(A_n)_{[s]}|=|M'(A_s)|=s+1>0$. 次に D 型のグラフの主小行列式を考えると, $|M'(D_n)_{[1]}|=2$, $|M'(D_n)_{[2]}|=\begin{vmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix}=3$. $s\geq 3$ のとき $|M'(D_n)_{[s]}|=|M'(D_s)|=4$. 従って, 定理 1.4 より $q_{M(A_n)}$ と $q_{M(D_n)}$ は正定値をとる. □

補題 2.2. 例 4 は $n\geq 4$ で, 例 5 は $n\geq 2$ で, 例 6 は $n\geq 1$ で付随する 2 次形式が正定値をとらない.

Proof. まず例 4 のグラフに対する対称行列の固有値は $1, \frac{2+\sqrt{n}}{2}, \frac{2-\sqrt{n}}{2}$ と計算でき, $n\geq 4$ のとき 0 以下の固有値をもつ．また, 例 5 のグラフに対する対称行列の固有値は $\frac{2+n}{2}, \frac{2-n}{2}$ となり, $n\geq 2$ のとき 0 以下の固有値をもつ．従って, 補題 1.2 より例 4 において $n\geq 4$ のとき, 例 5 において $n\geq 2$ のときに付随する 2 次形式は正定値をとらない．例 6 においては付随する 2 次形式の形を見れば明らかである. □

3 問題に対する解答

グラフに付随する 2 次形式が正定値になる可能性がある形としては補題 2.2 より, 次のような Y 字のグラフしかないことがわかった．ただし $p,q,r\geq 0$ とし, いずれかが 0 のとき A 型と同一視する.

$Y_{p,q,r}=$ 

$$M'(Y_{p,q,r})=\begin{array}{c} \overbrace{\hspace{7em}}^{p+q+1}\ \overbrace{\hspace{6em}}^{r} \\ \left(\begin{array}{cccccccc} 2 & -1 & & & & & & \\ -1 & 2 & \ddots & & & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & -1 & & & & \\ & & -1 & 2 & 0 & & & \\ & -1 & & 0 & 2 & -1 & & \\ & & & & -1 & 2 & \ddots & \\ & & & & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & & & & -1 & 2 \end{array}\right)\end{array}$$

グラフを見るとすぐに, $Y_{1,1,n}=D_{n+3}$ $(n\geq 1)$ かつ $Y_{1,2,n}=E_{n+4}$ $(n\geq 2)$ がわかる.

命題 3.1. $|M'(Y_{p,q,r})|=p+q+r-pqr+2$.

Proof. r に関する数学的帰納法を用いて証明する．$r=1$ のときを考える．まず $|M'(Y_{p,q,1})|$ の 1 番右側の列で余因子展開すると次のようになる．

$$|M'(Y_{p,q,1})| = \left|\begin{array}{ccccc:c} & & & & & 0 \\ & & & & & \vdots \\ & & M'(Y_{p,q,0}) & & & -1 \\ & & & & & \vdots \\ & & & & & 0 \\ \hdashline 0 & \cdots & -1 & \cdots & 0 & 2 \end{array}\right| = 2\,|M'(A_{p+q+1})| - \left|\begin{array}{c:c} M'(A_p) & 0 \\ \hdashline 0 & M'(A_q) \end{array}\right|$$

これは補題 2.1 より $2\,|M'(A_{p+q+1})| - |M'(A_p)|\,|M'(A_q)| = p+q-pq+3$ となる．よって主張は成立する．次に $r=k$ で主張が成立すると仮定すると，$r=k+1$ のとき 1 番下の行で余因子展開すると次のようになる．

$$|M'(Y_{p,q,k+1})| = \left|\begin{array}{cccc:c} & & & & 0 \\ & M'(Y_{p,q,k}) & & & \vdots \\ & & & & 0 \\ & & & & -1 \\ \hdashline 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{array}\right| = 2\,|M'(Y_{p,q,k})| + \left|\begin{array}{ccc:c} & & & 0 \\ & M'(Y_{p,q,k-1}) & & \vdots \\ & & & 0 \\ \hdashline 0 & \cdots & 0 & -1 \end{array}\right|$$

ここで最後の行列式を 1 番下の行で余因子展開すると $|M'(Y_{p,q,k+1})| = 2\,|M'(Y_{p,q,k})| - |M'(Y_{p,q,k-1})|$ となる．帰納法の仮定より $|M'(Y_{p,q,k+1})| = p+q+(k+1)-(k+1)pq+2$．よって主張は成立する． □

定理 3.2. 付随する 2 次形式が正定値になるグラフは，$A_n(n\geq 1), D_n(n\geq 4), E_6, E_7, E_8$ に限る．

Proof. $p=0$ または $q=0$ または $r=0$ ならば $Y_{p,q,r}$ は A 型のグラフである．よって，以下 $p\neq 0$ かつ $q\neq 0$ かつ $r\neq 0$ とする．まず，各 r を固定したときに行列式 $|M'(Y_{p,q,r})| = p+q+r-pqr+2$ が正になる p,q は以下のようになる．

- $r=1$ のとき，$p+q-pq > -3$ を満たす p,q は $\{p,q\} = \{1,n\},\{2,2\},\{2,3\},\{2,4\}.\ (n\in\mathbb{N})$
- $r=2$ のとき，$p+q-2pq > -4$ を満たす p,q は $\{p,q\} = \{1\},\{1,2\},\{1,3\},\{1,4\}.$
- $r=3$ のとき，$p+q-3pq > -5$ を満たす p,q は $\{p,q\} = \{1\},\{1,2\},\{1,3\}.$
- $r=4$ のとき，$p+q-4pq > -6$ を満たす p,q は $\{p,q\} = \{1\},\{1,2\}.$
- $r\geq 5$ のとき，$|M'(Y_{p,q,r})| > 0$ を満たす p,q は $p=q=1$.

よって $\mathcal{P} := \{(p,q,r)\in\mathbb{N}^3 = \mathbb{N}\times\mathbb{N}\times\mathbb{N} \mid |M'(Y_{p,q,r})| > 0\}$ とおけば，次が成立することがわかった．

$$\forall(a,b,c)\in\mathbb{N}^3,\quad (p-a,\ q-b,\ r-c)\in\mathbb{N}^3 \implies (p-a,\ q-b,\ r-c)\in\mathcal{P}.$$

次に，$M'(Y_{p,q,r})$ の主小行列を調べると

$$M'(Y_{p,q,r})_{[s]} = \begin{cases} M'(Y_{s,0,0}) & (1\leq s\leq p+1) \\ M'(Y_{p,s-p+1,0}) & (p+2\leq s\leq p+q+1) \\ M'(Y_{p,q,s-p+q+1}) & (p+q+2\leq s\leq p+q+r+1) \end{cases}$$

となる．よって次が成立することがわかった．

$$\forall(p,q,r)\in\mathbb{N}^3,\quad \exists(a,b,c)\in\mathbb{N}^3\ \ s.t.\ \ 1\leq\forall s\leq p+q+r+1,\quad M'(Y_{p,q,r})_{[s]} = M'(Y_{p-a,q-b,r-c}).$$

以上のことから，任意の $(p,q,r)\in\mathcal{P}$ に対し，$M'(Y_{p,q,r})$ の主小行列式 $\left|M'(Y_{p,q,r})_{[s]}\right|$ が全て正になるとわかる．一方で $\{Y_{p,q,r} \mid (p,q,r)\in\mathcal{P}\} = \{D_n(n\geq 4), E_6, E_7, E_8\}$ なので，主張は成立する． □

参考文献

[1] 草場 公邦（著），『行列特論』，裳華房，1979 年