演習問題 2.20

正定値行列 $\mathbf{\Sigma}$ は、次の二次形式が、任意の実ベクトル $\mathbf{a}$ について正になるということで定義できる。

$$\mathbf{a}^{\mathrm{T}} \mathbf{\Sigma} \mathbf{a}$$

… (2.285)

$\mathbf{\Sigma}$ が正定値になる必要十分条件は、式 (2.45) で定義される $\mathbf{\Sigma}$ のすべての固有値 λ_i が正となることであることを示せ。

[固有ベクトルの方程式]

$$\mathbf{\Sigma}\mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i$$

… (2.45)

ここで、$\mathbf{\Sigma}$ は $D \times D$ の共分散行列である。また、演習問題 2.18 より、$\mathbf{\Sigma}$ には対称であるものを選んでよいことが示されている。

[固有ベクトルの正規直交性]

$\mathbf{\Sigma}$ が実数の対称行列であるため、その固有値も実数となり、2 つの固有値が $\lambda_i \neq \lambda_j$ であるとき、それに対応する固有ベクトル $\mathbf{u}_i$ と $\mathbf{u}_j$ は、

$$\mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_j = I_{ij}$$

… (2.46)

となる。ただし、I_{ij} は単位行列の i , j 要素で、

$$I_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \text{ のとき} \\ 0, & \text{それ以外のとき} \end{cases}$$

… (2.47)

を満たす。

[**正定値行列** (positive definite matrix)]

固有値がすべて正である行列のことである。

[**半正定値行列** (positive semidefinite matrix)]

固有値がすべて非負である行列のことである。

[解]

$\mathbf{\Sigma}$ が正定値になる必要十分条件は、式 (2.45) で定義される $\mathbf{\Sigma}$ のすべての固有値 λ_i が正となることであることを示す。$\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$ であると仮定すると、任意の実ベクトル $\mathbf{a}$ は、$\mathbf{\Sigma}$ の固有ベクトル $\mathbf{u}_i$ の線形結合

$$\mathbf{a} = \sum_{i=1}^{D} c_i \mathbf{u}_i$$

で表せる。ただし、D は各ベクトルの次元数、c_i は $\mathbf{a}$ を $\mathbf{u}_1$, … , $\mathbf{u}_D$ に射影した際に得られる係数である。$\mathbf{\Sigma}$ の固有値を λ_i とすると、固有方程式 (2.45) を用いて、

$$\mathbf{a}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}\, \mathbf{a} = \left(\sum_{i=1}^{D} c_i\, \mathbf{u}_i \right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma} \left(\sum_{j=1}^{D} c_j\, \mathbf{u}_j \right)$$

$$= \left(\sum_{i=1}^{D} c_i\, \mathbf{u}_i \right)^{\mathrm{T}} \left(\sum_{j=1}^{D} c_j\, \lambda_j\, \mathbf{u}_j \right)$$

となる。式（ 2.46 ），（ 2.47 ）より、$i = j$ のときのみ、$\mathbf{u}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{u}_j = 1$ となるので、上記の式は、

$$= c_1^2\, \lambda_1 + \cdots + c_D^2\, \lambda_D = \sum_{i=1}^{D} c_i^2\, \lambda_i$$

となる。ここで、$\mathbf{a}$ は実ベクトルであり、$\mathbf{a}$ の成分はすべて 0 でないので、すべての固有値が厳密に正であるとき、上記の式は厳密に正となることがわかる。

$$\sum_{i=1}^{D} c_i^2\, \lambda_i > 0$$

(任意の実ベクトル $\mathbf{a}$ の成分 c_i は負の値であっても c_i^2 より、0 でない限り許容される。)
ゆえに、$\boldsymbol{\Sigma}$ が正定値行列である場合にしか成し得ない。もしいくつかの固有値 λ_i が 0 、または負の値であれば、$\mathbf{a} = \mathbf{u}_i$ となるようなベクトル $\mathbf{a}$ が存在し得ることを意味する。すなわち、上記の式が 0 以下になり得ることを意味する。これらのことから、$\boldsymbol{\Sigma}$ のすべての固有値 λ_i が正であることは、$\boldsymbol{\Sigma}$ が正定値になる必要十分条件であることを意味している。

固有値 λ_k が 0 であると仮定すると、固有方程式（ 2.45 ）より、$\boldsymbol{\Sigma}\, \mathbf{u}_k = \lambda_k\, \mathbf{u}_k = 0$ となり、両辺に対し、左側から $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ を掛けると、$\mathbf{u}_k = 0$ が得られる。しかし、演習問題 2.18 より、 $\mathbf{u}_k \neq 0$ であるので、背理法より、$\lambda_k \neq 0$ でなくてはならないことがわかる。