演習問題 2.19

固有ベクトルの方程式について、式 (2.45) が成立する実対称行列 $\mathbf{\Sigma}$ は、固有値を係数とする固有ベクトルで展開した、式 (2.48) の形で書けることを示せ。同様に、逆行列 $\mathbf{\Sigma}^{-1}$ は、式 (2.49) の形で表現できることを示せ。

[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。

[共分散行列 $\mathbf{\Sigma}$]

$$\mathbf{\Sigma} = \sum_{i=1}^{D} \lambda_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}}$$

… (2.48)

[共分散行列 $\mathbf{\Sigma}$ の逆行列 $\mathbf{\Sigma}^{-1}$]

$$\mathbf{\Sigma}^{-1} = \sum_{i=1}^{D} \frac{1}{\lambda_i} \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}}$$

… (2.49)

[解]

まず、式 (2.45) が成立する実対称行列 $\mathbf{\Sigma}$ は、固有値を係数とする固有ベクトルで展開した、式 (2.48) の形で書けることを示す。式 (2.48) の右辺は、行列形式に直すことができ、

$$\mathbf{\Sigma} = \sum_{i=1}^{D} \lambda_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^{\mathrm{T}} = \mathbf{M}$$

… ※

と書き直せ、これを $\mathbf{M}$ とおく。ただし、$\mathbf{U}$ は、固有ベクトル $\mathbf{u}_1$, … , $\mathbf{u}_D$ を横に並べて

構成される D 次元の正方行列であり、また、$\mathbf{\Lambda}$ は固有値 $\lambda_1, \cdots, \lambda_D$ で対角化された D 次元の対角行列である。上記の式の両辺に対し、$\mathbf{U}\,\mathbf{\Lambda}\,\mathbf{U}^{\mathrm{T}} = \mathbf{M}$ の左側から $\mathbf{U}^{\mathrm{T}}$ を、右側から $\mathbf{U}$ を掛けると、

$$\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{M}\,\mathbf{U} = \mathbf{U}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{U}\,\mathbf{\Lambda}\,\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{U} = \mathbf{\Lambda}$$

の関係式が得られる。また、式 (2.45), (2.46), (2.47) より、

$$\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{\Sigma}\,\mathbf{U} = \mathbf{U}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{\Lambda}\,\mathbf{U} = \mathbf{\Lambda}$$

の関係式が得られる。

式 (2.45) より、

$$\mathbf{\Sigma}\sum_{i=1}^{D}\mathbf{u}_i = \sum_{i=1}^{D}\lambda_i\mathbf{u}_i$$

とすると、上記の式の行列形式は、

$$\mathbf{\Sigma U} = \mathbf{\Lambda U}$$

と書くことができる。この式の両辺に対して、左側から $\mathbf{U}^{\mathrm{T}}$ を掛けると、

$$\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{\Sigma}\,\mathbf{U} = \mathbf{U}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{\Lambda}\,\mathbf{U}$$

と書き直せる。ここで、$\mathbf{U}$ は固有ベクトル $\mathbf{u}_1, \cdots, \mathbf{u}_D$ を横に並べて構成される D 次元の正方行列であるので、上記の式の右辺は、

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{\Lambda}\,\mathbf{U} &= [\ \mathbf{u}_1 \ \ \cdots \ \ \mathbf{u}_D\ ]^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda_1 & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & \cdots & \lambda_D\end{bmatrix}[\ \mathbf{u}_1 \ \ \cdots \ \ \mathbf{u}_D\ ]\\
&= [\ \mathbf{u}_1 \ \ \cdots \ \ \mathbf{u}_D\ ]^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda_1 & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & \cdots & \lambda_D\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_{11} & \cdots & u_{D1}\\ \vdots & \vdots & \vdots\\ u_{1D} & \cdots & u_{DD}\end{bmatrix}\\
&= [\ \mathbf{u}_1 \ \ \cdots \ \ \mathbf{u}_D\ ]^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda_1 u_{11} & \cdots & \lambda_1 u_{D1}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \lambda_D u_{1D} & \cdots & \lambda_D u_{DD}\end{bmatrix}\\
&= \begin{bmatrix}u_{11} & \cdots & u_{D1}\\ \vdots & \vdots & \vdots\\ u_{1D} & \cdots & u_{DD}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda_1 u_{11} & \cdots & \lambda_1 u_{D1}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \lambda_D u_{1D} & \cdots & \lambda_D u_{DD}\end{bmatrix}\\
&= \begin{bmatrix}u_{11} & \cdots & u_{1D}\\ \vdots & \cdots & \vdots\\ u_{D1} & \cdots & u_{DD}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\lambda_1 u_{11} & \cdots & \lambda_1 u_{D1}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \lambda_D u_{1D} & \cdots & \lambda_D u_{DD}\end{bmatrix}\\
&= \begin{bmatrix}\lambda_1 u_{11} u_{11} & \cdots & \lambda_1 u_{D1} u_{1D}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \lambda_D u_{1D} u_{D1} & \cdots & \lambda_D u_{DD} u_{DD}\end{bmatrix}
\end{aligned}$$

と整理でき、式 (2.46), (2.47) で与えられる固有ベクトルの正規直交性より、

$$= \begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots\\ \vdots & \ddots & \ddots & 0\\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_D\end{bmatrix} = \mathbf{\Lambda}$$

となる。

上記の 2 つの式から、$\mathbf{M} = \mathbf{\Sigma}$ であることがわかり、式 (2.48) が成立することがわかる。よって、式 (2.45) が成立する実対称行列 $\mathbf{\Sigma}$ は、固有値を係数とする固有ベクトルで展開

した、式 (2.48) の形で書けることを示せた。

同様に、逆行列 $\mathbf{\Sigma}^{-1}$ は、式 (2.49) の形で表現できることを示す。これは、式 ※ より、$\mathbf{\Sigma}^{-1}$ は、

$$\mathbf{\Sigma}^{-1} = (\mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^{\mathrm{T}})^{-1}$$

と書き表せ、逆行列の基本的性質から、

$$(\mathbf{U}\mathbf{\Lambda}\mathbf{U}^{\mathrm{T}})^{-1} = (\mathbf{U}^{\mathrm{T}})^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{U}^{-1}$$

が成り立ち、$\mathbf{U}$ が正規直交であることから、$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^{\mathrm{T}}$ が成り立ち、また、$(\mathbf{U}^{\mathrm{T}})^{-1} = (\mathbf{U}^{-1})^{-1} = \mathbf{U}$ であることから、

$$(\mathbf{U}^{\mathrm{T}})^{-1}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{U}^{\mathrm{T}}$$

と整理できる。ここで、$\mathbf{U}$ は、固有ベクトル $\mathbf{u}_1, \cdots, \mathbf{u}_D$ を横に並べて構成される D 次元の正方行列であり、また、$\mathbf{\Lambda}$ は固有値 $\lambda_1, \cdots, \lambda_D$ で対角化された D 次元の対角行列であったので、$\mathbf{\Lambda}^{-1}$ は、

$$\mathbf{\Lambda}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\lambda_2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{\lambda_D} \end{bmatrix}$$

と書き表すことができ、$\mathbf{U}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{U}^{\mathrm{T}}$ は、

$$\mathbf{U}\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{U}^{\mathrm{T}} = \sum_{i=1}^{D} \frac{1}{\lambda_i}\mathbf{u}_i\mathbf{u}_i^{\mathrm{T}}$$

と書き直せる。よって、逆行列 $\mathbf{\Sigma}^{-1}$ は、式 (2.49) の形で表現できることを示せた。

[逆行列の基本的性質]

○ $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}$

○ $(\mathbf{ABC})^{-1} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$

⇒ これは、任意の数の逆行列について成り立つ。

○ $(\mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{-1} = (\mathbf{A}^{-1})^{\mathrm{T}}$

($\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$: $N \times N$ 正方行列)