演習問題 2.17

式（2.43）の多変量ガウス分布を考える。精度行列（逆共分散行列）$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ を対称行列と反対対称行列（歪対称行列）の和の形で書くと、反対称行列の項がガウス分布の指数部分には現れなくなるため、一般性を失うことなく、精度行列は対称であるとして良いことを示せ。この結果から、対称行列の逆行列も対称（⇒ **演習問題 2.22**）なので、一般性を失うことなく、共分散行列にも対称なものを選んで良いことになる。

［ 多変量ガウス分布 ］

$$N(\mathbf{x} \mid \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right\} \quad \cdots (2.43)$$

ただし、$\boldsymbol{\mu}$ は D 次元ベクトル、$\boldsymbol{\Sigma}$ は $D \times D$ の共分散行列、$|\boldsymbol{\Sigma}|$ は $\boldsymbol{\Sigma}$ の行列式を表す。

［ 対称行列 ］

対称行列とは、$\mathbf{A} = {}^t\mathbf{A}$ を満たす正方行列 $\mathbf{A}$ のことである。すなわち、$A_{ij} = A_{ji}$ がすべての i, j について成り立つ。

［ 反対称行列 ］

反対称行列とは、$\mathbf{A} = -{}^t\mathbf{A}$ を満たす正方行列 $\mathbf{A}$ のことである。すなわち、$A_{ij} = -A_{ji}$ がすべての i, j について成り立つ。反対称行列は、**交代行列**、または**歪対称行列**とも呼ぶ。

［ 解 ］

多変量ガウス分布において、精度行列（逆共分散行列）$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ を対称行列と反対対称行列（歪対称行列）の和の形で書くと、反対称行列の項がガウス分布の指数部分には現れなくなるため、一般性を失うことなく、精度行列は対称であるとして良いことを示す。このために、まず、成分 Λ_{ij}で構成される D 次元の正方行列 $\boldsymbol{\Lambda}$ を考える。これを精度行列（逆共分散行列）$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ とすると、演習問題 1.14 より、Λ_{ij} を成分とする D 次元の正方行列 $\boldsymbol{\Lambda}$ の成分は、

$$\Lambda_{ij}^{\mathrm{S}} = \frac{1}{2}(\Lambda_{ij} + \Lambda_{ji}), \quad \Lambda_{ij}^{\mathrm{A}} = \frac{1}{2}(\Lambda_{ij} - \Lambda_{ji})$$

とおくことで、

$$\Lambda_{ij} = \Lambda_{ij}^{\mathrm{S}} + \Lambda_{ij}^{\mathrm{A}}$$

という形で書き表せる。ここで、$\Lambda_{ij}^{\mathrm{S}}$ と $\Lambda_{ij}^{\mathrm{A}}$ は、それぞれ対称行列 $\boldsymbol{\Lambda}^{\mathrm{S}}$ と反対称行列 $\boldsymbol{\Lambda}^{\mathrm{A}}$ の成分であり、$\Lambda_{ij}^{\mathrm{S}} = \Lambda_{ji}^{\mathrm{S}}$ および $\Lambda_{ij}^{\mathrm{A}} = -\Lambda_{ji}^{\mathrm{A}}$ がすべての i, j について成り立つ。演習問題 1.14 より、D 次元の多変量ガウス分布（2.43）中の指数部における二次形式は、

$$\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{D} \sum_{j=1}^{D} (x_i - \mu_i) \Lambda_{ij} (x_j - \mu_j)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{D} \sum_{j=1}^{D} (x_i - \mu_i) \Lambda^{\mathrm{S}}_{ij} (x_j - \mu_j)$$

と書き表せるので、上記の式から、$\boldsymbol{\Lambda}^{\mathrm{S}} = \boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ となり、精度行列が対称となっていることがわかる。以上より、多変量ガウス分布において、精度行列（逆共分散行列）$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ を対称行列と反対対称行列（歪対称行列）の和の形で書くと、精度行列は対称となることが示せた。

[演習問題 1.14]

w_{ij} を成分とする任意の正方行列は、$w_{ij} = w^{\mathrm{S}}_{ij} + w^{\mathrm{A}}_{ij}$ という形で書くことができる。ただし、w^{S}_{ij} と w^{A}_{ij} は、それぞれ対称行列と反対称行列の成分であり、$w^{\mathrm{S}}_{ij} = w^{\mathrm{S}}_{ji}$ および $w^{\mathrm{A}}_{ij} = -w^{\mathrm{A}}_{ji}$ がすべての i, j について成り立つ。ここで、D 次元における高次の多項式の 2 次の項

$$\sum_{i=1}^{D} \sum_{j=1}^{D} w_{ij} x_i x_j \qquad \cdots (1.131)$$

を考えると、

$$\sum_{i=1}^{D} \sum_{j=1}^{D} w_{ij} x_i x_j = \sum_{i=1}^{D} \sum_{j=1}^{D} w^{\mathrm{S}}_{ij} x_i x_j \qquad \cdots (1.132)$$

となり、反対称行列の寄与が消えることを示せ。このことから、一般性を失うことなく、係数 w_{ij} は、対称に選んでよく、すべての D^2 の成分の選び方が独立ではないことがわかる。また、行列 w^{S}_{ij} の独立パラメータの数は、$D (D + 1) / 2$ で与えられる。