LA-6　正定値行列

室田

実数には正負がある．行列に対しても「正負」の概念を定義したい

6.1　正定値行列の定義

定義 6.1 $A = (a_{ij})$ を n 次対称行列，$\boldsymbol{x} = (x_i)$ を n 次元ベクトルとするとき，

$$\boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_i x_j \tag{6.1}$$

を A の定める **2 次形式**とよぶ.

定義 6.2 対称行列 A が次の条件を満たすとき，**正定値**であるという：

$$\text{任意のベクトル } \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0} \text{ に対して } \boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} > 0. \tag{6.2}$$

定義 6.3 対称行列 A が次の条件を満たすとき，**半正定値**であるという：

$$\text{任意のベクトル } \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0} \text{ に対して } \boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} \geqq 0. \tag{6.3}$$

条件 (6.3) は，$\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ の条件を外して次のようにしても同値である：

$$\text{任意のベクトル } \boldsymbol{x} \text{ に対して } \boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} \geqq 0. \tag{6.4}$$

例 6.1 $A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ は，正定値行列である．実際，任意のベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して

$$\boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 2{x_1}^2 + 2{x_2}^2 + 2x_1x_2 = {x_1}^2 + {x_2}^2 + (x_1 + x_2)^2 \geqq 0$$

となり，(6.4) が成り立つので A は半正定値である．さらに，$\boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} = 0$ となるのは $x_1 = x_2 = 0$ に限られるので，A は正定値である．

例 6.2 $A = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$ は，正定値行列である．実際，任意のベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して

$$\boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 2{x_1}^2 + 2{x_2}^2 - 2x_1x_2 = {x_1}^2 + {x_2}^2 + (x_1 - x_2)^2 \geqq 0$$

となり，(6.4) が成り立つので A は半正定値である．さらに，$\boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} = 0$ となるのは $x_1 = x_2 = 0$ に限られるので，A は正定値である．この例から分かるように，行列の要素に負のものがあっても，正定値になる．

この資料は，室田，杉原：線形代数 I (丸善出版，2015) の 7 章に基づく．

例 6.3 $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$ は，正定値行列でも半正定値行列でもない．例えば，ベクトル $\boldsymbol{x} = [1, -1]^\top$ に対して

$$\boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} = -2 < 0$$

となるので，(6.2) も (6.4) も成り立たない．因みに 2 次形式を作ってみると，

$$\boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = {x_1}^2 + {x_2}^2 + 4x_1x_2 = -{x_1}^2 - {x_2}^2 + 2(x_1 + x_2)^2$$

となる．${x_1}^2$ や ${x_2}^2$ の符号がマイナスになってしまい，例 6.1 や例 6.2 とは状況が異なることが分かる．最後の変形の仕方を変えて

$${x_1}^2 + {x_2}^2 + 4x_1x_2 = -3{x_1}^2 + (2x_1 + x_2)^2$$

としてみても，${x_1}^2$ の符号がマイナスになってしまう．

例 6.4 グラフの Laplace 行列は半正定値行列である

例 6.5 分散共分散行列は半正定値行列である（6.3 節参照）．

6.2 正定値行列／半正定値行列の性質

正定値行列／半正定値行列の性質を述べる前に，必要な言葉を定義する．

定義 6.4 $A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$ を満たすベクトル $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ が存在するような λ を A の**固有値**という（固有値については後の講義で詳しく扱う）．対称行列の固有値はすべて実数である．

定義 6.5 n 次正方行列 $A = (a_{ij})$ において，行番号と列番号の集合がともに同じ k 個の番号 $i_1 < i_2 < \cdots < i_k$ に対応する小行列を，k 次**主小行列**という．また，その行列式を k 次**主小行列式** (principal minor) という．ここで $i_1 = 1, i_2 = 2, \ldots, i_k = k$ である場合には，とくに，**首座小行列**，**首座小行列式** (leading principal minor) とよぶ．

注意 6.1 A が n 次正方行列として，k を $1 \leq k \leq n$ の整数とする．A の k 次主小行列の個数は，n 個のものから k 個を選ぶ組合せの総数 $k!(n-k)!/n!$ に等しい．これに対して，k 次首座小行列は，1 個だけである．

例 6.6 行列 $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 5 \\ 3 & 5 & 6 \end{bmatrix}$ を考える．

- $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$ は主小行列であるが，$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$ は主小行列でない（小行列ではある）．

  $\det\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$ は主小行列式であるが，$\det\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$ は主小行列式でない（小行列式ではある）．

- 2 次の主小行列は，$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 6 \end{bmatrix}$ の 3 つである．

  2 次の主小行列式は，$\det\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$, $\det\begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}$, $\det\begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 3 & 6 \end{bmatrix}$ の 3 つである．

- 2 次の首座小行列は $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$ だけである．2 次の首座小行列式は $\det\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$ だけである．

- 3 次の主小行列式は $\det\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 5 \\ 3 & 5 & 6 \end{bmatrix}$ だけであり，これは 3 次の首座小行列式でもある．

定義 6.6 正方行列 Q が $Q^\top Q = QQ^\top = I$ を満たすとき，Q は**直交行列**であるという．$Q^\top Q = QQ^\top = I$ ということは，Q の転置行列 $Q^\top$ が Q の逆行列に等しいということである．

例 6.7

$$Q = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \tag{6.5}$$

は 2 次の直交行列である．

問 6.1 (6.5) の行列 Q に対して，$Q^\top Q$ と $QQ^\top$ を計算せよ．(答：ともに 2 次の単位行列 I）

例 6.8

$$Q = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{3} \\ 2/\sqrt{6} & 0 & 1/\sqrt{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1/\sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{3} \end{bmatrix} \tag{6.6}$$

は 3 次の直交行列である．

問 6.2 (6.6) の行列 Q に対して，$Q^\top Q$ と $QQ^\top$ を計算せよ．(答：ともに 3 次の単位行列 I）

定義 6.7 すべての非対角要素が 0 である正方行列を，**対角行列**とよぶ．対角要素が $d_1, d_2, \ldots, d_n$ である n 次対角行列を $\mathrm{diag}\,(d_1, d_2, \ldots, d_n)$ と記す[*1]．すなわち

$$\mathrm{diag}\,(d_1, d_2, \ldots, d_n) = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & d_2 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & d_n \end{bmatrix}$$

である．

正定値であるための条件として次のことが知られている．

定理 6.1 対称行列 A に関して，以下の 6 条件 (a)∼(f) は同値である．

(a) A は正定値である，すなわち，条件 (6.2) が成り立つ．

(b) A の固有値はすべて正である．

(c) ある直交行列 Q と対角要素が正の対角行列 D を用いて $A = QDQ^\top$ と書ける．

(d) ある正則行列 S を用いて $A = SS^\top$ と書ける．

(e) A のすべての主小行列式は正である．

(f) A のすべての首座小行列式は正である．

半正定値であるための条件として次のことが知られている．

定理 6.2 対称行列 A に関して，以下の 5 条件 (a)∼(e) は同値である．

(a) A は半正定値である，すなわち，条件 (6.4) が成り立つ．

(b) A の固有値はすべて非負である．

(c) ある直交行列 Q と対角要素が非負の対角行列 D を用いて $A = QDQ^\top$ と書ける．

(d) ある正方行列 S を用いて $A = SS^\top$ と書ける．

(e) A のすべての主小行列式は非負である．

注意 6.2 定理 6.1 により,「すべての主小行列式が正」と「すべての首座小行列式が正」は同値であるが，ここで「正」を「非負」に置き換えると同値でなくなる．すなわち,「すべての主小行列式が非負」と「すべての首座小行列式が非負」は同値ではない．実際,

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

[*1] “diag” という記号は，対角行列を意味する英語 diagonal matrix に由来する．

では，すべての首座小行列式が非負 (0) であるが，右下の 1 次主小行列式は負 (-1) である．したがって，

$$A \text{ のすべての首座小行列式が非負} \quad \not\Longrightarrow \quad A \text{ が半正定値}$$

である．主小行列式は 2^n 個，首座小行列式は n 個あることにも注意.

問 6.3 行列 $A = \begin{bmatrix} 1 & a \\ a & 2 \end{bmatrix}$ が正定値となる a の範囲を求めよ．(答：$|a| < \sqrt{2}$)

問 6.4 行列 $A = \begin{bmatrix} 2 & -a & 0 \\ -a & 2 & -a \\ 0 & -a & 2 \end{bmatrix}$ が半正定値となる a の範囲を求めよ．(答: $|a| \leq \sqrt{2}$)

定理 6.3
(1) 正定値行列のすべての主小行列は，正定値である.
(2) 半正定値行列のすべての主小行列は，半正定値である.

定理 6.4 S を正則行列とする.
(1) A が正定値ならば，$S^\top AS$ も正定値である.
(2) A が半正定値ならば，$S^\top AS$ も半正定値である.

定理 6.5 $\alpha, \beta > 0$ とする.
(1) A, B が正定値ならば，$\alpha A + \beta B$ は正定値である.
(2) A, B が半正定値ならば，$\alpha A + \beta B$ は半正定値である.

問 6.5 定理 6.5 を証明せよ.（ヒント：$\boldsymbol{x}^\top(\alpha A + \beta B)\boldsymbol{x}$ を計算する）

6.3 共分散行列の半正定値性

$\boxed{\text{分散} \geq 0 \text{ に対応して，共分散行列は（何らかの意味で）} \geq 0 \text{ であるに違いない}}$

6.3.1 共分散行列の定義 (復習)

N 個の p 変量データ $\begin{bmatrix} x_1^{(1)} \\ x_2^{(1)} \\ \vdots \\ x_p^{(1)} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} x_1^{(2)} \\ x_2^{(2)} \\ \vdots \\ x_p^{(2)} \end{bmatrix}, \ldots, \begin{bmatrix} x_1^{(N)} \\ x_2^{(N)} \\ \vdots \\ x_p^{(N)} \end{bmatrix}$ があるとする．x_i の平均 m_i と分散 V_i は次のように定義される：

$$x_i \text{ の平均 } m_i = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} x_i^{(k)}, \qquad x_i \text{ の分散 } V_i = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(x_i^{(k)} - m_i)^2. \tag{6.7}$$

x_i と x_j の共分散 C_{ij} は次のように定義される：

$$x_i \text{ と } x_j \text{ の共分散 } C_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(x_i^{(k)} - m_i)(x_j^{(k)} - m_j). \tag{6.8}$$

これは x_i と x_j の相関を表現する量である．上の定義式から明らかなように，x_i と x_j の共分散 C_{ij} は，x_j と x_i の共分散 C_{ji} に等しい．分散と共分散を並べた $p \times p$ 行列

$$C = \begin{bmatrix} V_1 & C_{12} & \cdots & C_{1p} \\ C_{21} & V_2 & \cdots & C_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{p1} & C_{p2} & \cdots & V_p \end{bmatrix} \tag{6.9}$$

を，**共分散行列**あるいは**分散共分散行列**という．$C_{ij} = C_{ji}$ が成り立つから，共分散行列 C は対称行列である．

行列 C の対角要素 V_i を C_{ii} で表すと統一的に書けるので便利なことが多い．式 (6.7) における V_i の定義は，C_{ij} の定義式 (6.8) で $i = j$ とおいたものに一致するので，$V_i = C_{ii}$ としても矛盾が生じないことに注意されたい．

6.3.2 半正定値性

共分散行列 C が半正定値行列であることを示そう．まず，$i = 1, 2, \ldots, p,\ k = 1, 2, \ldots, N$ に対して $z_i^{(k)} = x_i^{(k)} - m_i$ と定義すると，式 (6.8) より，

$$C_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(x_i^{(k)} - m_i)(x_j^{(k)} - m_j) = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} z_i^{(k)} z_j^{(k)} \tag{6.10}$$

が成り立つ ($i = j$ の場合も含めてこの式が成り立つ)．さらに $z_i^{(k)}$ を (i, k) 要素とする $p \times N$ 行列

$$Z = \begin{bmatrix} z_1^{(1)} & z_1^{(2)} & \cdots & z_1^{(N)} \\ z_2^{(1)} & z_2^{(2)} & \cdots & z_2^{(N)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ z_p^{(1)} & z_p^{(2)} & \cdots & z_p^{(N)} \end{bmatrix} \tag{6.11}$$

を考えると，式 (6.10) より

$$C = \frac{1}{N} Z Z^\top \tag{6.12}$$

という式が得られる．

任意のベクトル $\boldsymbol{u}$ に対して，半正定値性の条件 $\boldsymbol{u}^\top C \boldsymbol{u} \geqq 0$ が成り立つことを示そう．実際，ベクトル $\boldsymbol{u}$ に対して，$\boldsymbol{y} = Z^\top \boldsymbol{u}$ とおくと，

$$\boldsymbol{u}^\top C \boldsymbol{u} = \frac{1}{N}\boldsymbol{u}^\top Z Z^\top \boldsymbol{u} = \frac{1}{N}(Z^\top \boldsymbol{u})^\top (Z^\top \boldsymbol{u}) = \frac{1}{N}\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{y} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} {y_k}^2 \geqq 0 \tag{6.13}$$

となり，行列 C は条件 (6.4) を満たすことが分かる．

以上 (2016-07-20/.../2019-12-03/2020-04-13)