データ分析基礎
線形代数の基礎知識

京都大学 国際高等教育院 附属データ科学イノベーション教育研究センター

せきど ひろと
關戸 啓人

sekido.hiroto.7a@kyoto-u.ac.jp

行列とベクトル

行列とベクトル

★縦にn行，横にm列，mn個の実数を並べたものn行m列の実**行列**という．

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}$$

- ★a_{ij}を行列Aの(i,j)成分，i行j列の成分などと言いA_{ij}とも書く

★n行m列の実行列全体からなる集合を$M_{nm}(\mathbb{R})$または$\mathbb{R}^{n\times m}$と書く

★n行n列の行列をn次正方行列ともいい，その全体からなる集合は$M_n(\mathbb{R})$または$\mathbb{R}^{n\times n}$

- ★要素が複素数の複素行列などもあるが，この講義では実行列を扱う

★n行1列の行列をn次元の**縦ベクトル**，1行n列の行列をn次元の**横ベクトル**という

- ★両者をまとめてベクトルと言うが，単にベクトルと言った時は縦ベクトルを指すことが多い
- ★n次元ベクトルからなる集合を$\mathbb{R}^n$とも書く
- ★1行1列のベクトルを単なる実数と同一視することもある

行列の足し算，引き算

★ 対応する要素を足したり引いたりする

★ サイズが違う行列では足し算，引き算できない

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} & \cdots & a_{1m}+b_{1m} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} & \cdots & a_{2m}+b_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}+b_{n1} & a_{n2}+b_{n2} & \cdots & a_{nm}+b_{nm} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}-b_{11} & a_{12}-b_{12} & \cdots & a_{1m}-b_{1m} \\ a_{21}-b_{21} & a_{22}-b_{22} & \cdots & a_{2m}-b_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}-b_{n1} & a_{n2}-b_{n2} & \cdots & a_{nm}-b_{nm} \end{pmatrix}$$

ベクトルの内積

★2つの**実**のn次元のベクトル

$$
\begin{aligned}
x &= (x_1 \;\; x_2 \;\; \cdots \;\; x_n) \in \mathbb{R}^n, \\
y &= (y_1 \;\; y_2 \;\; \cdots \;\; y_n) \in \mathbb{R}^n
\end{aligned}
$$

の**（標準）内積**は

$$
(x, y) = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n
$$

で定義される．**次元が違うベクトル同士の内積は定義されない．**

行列の掛け算（行列積）

★ n 行 k 列の行列 A と，k 行 m 列の行列 B の積 $AB = C$ は，n 行 m 列の行列で C_{ij} は A の第 i 行と B の第 j 列との内積

★ 実行列の場合！（**複素数を並べた行列では内積の定義が違うのでダメ**）

★ 例：

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g & h \\ i & j \\ k & l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ag + bi + ck & ah + bj + cl \\ dg + ei + fk & dh + ej + fl \end{pmatrix}$$

★ **A の列の数と B の行の数が異なる場合，行列積 AB は定義されない**

★ **一般的に** $AB \neq BA$

★ 複素数の場合：

★ 行列積 AB の各要素 $(AB)_{ij}$ は A の i 行と B の j 列の要素を掛けて足す

★ ベクトル a, b の内積は，例えば，$(a, b) = \overline{a_1} b_1 + \cdots + \overline{a_n} b_n$

行列の掛け算（行列積）

★ **結合法則**は（掛け算が定義できるならば）成り立つ

★ $(AB)C = A(BC)$

★ **分配法則**は（掛け算が定義できるならば）成り立つ

★ $A(B + C) = AB + AC, \quad (A + B)C = AC + BC$

★ **交換法則が成り立たない**（$AB \neq BA$）ことには注意が必要だが，それ以外は普通に計算してもだいたい大丈夫（なことが多い）

行列のスカラー倍

★ 行列のスカラー倍（行列に実数kを掛ける）と全ての要素がk倍される

$$k\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ka & kb & kc \\ kd & ke & kf \end{pmatrix}$$

零行列，単位行列，逆行列

★ 全ての要素が0の行列を**零行列**と言い0と書く

$$A + 0 = 0 + A = A, \ 0A = 0, \ A0 = 0$$

★ 行列のサイズ（n 行 m 列）を明記する場合は0_{nm}と書くこともあるが文脈から判断できる場合は省略することが多い

★ 今回，次回講義では(i, j)要素の記号と混同するので使用しない

★ **行列では $AB = 0$ だからといって $A = 0$ または $B = 0$ とは言えない**

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^2 = 0$$

零行列，単位行列，逆行列

★ 対角成分のみ 1 で，残りの要素が全て 0 の正方行列を**単位行列** I という

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

$$AI = A, \ \ IA = A$$

★ 正方行列 A に対して，$AB = I$ となる行列 B を A の**逆行列**といい $B = A^{-1}$

- ★ この時，$BA = I$ も成り立ち，逆に $BA = I$ ならば $AB = I$ も成り立つ
- ★ **逆行列は存在しないこともある**．存在すれば一意
- ★ 逆行列をもつ行列 A を**正則行列**という

転置

★ $A \in M_{nm}(\mathbb{R})$ の**転置** $A^{\mathrm{T}} \in M_{mn}(\mathbb{R})$ は $(A^{\mathrm{T}})_{ij} = A_{ji}$ で定義される

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} a & d \\ b & e \\ c & f \end{pmatrix}$$

★ 性質：

$$(A^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} = A,$$
$$(AB)^{\mathrm{T}} = B^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}}$$

★ $A^{\mathrm{T}} = A$ となる正方行列 A を**対称行列**という

特別な形の行列

★ 正方行列 A で対角成分にのみ値を持つ行列は**対角行列**

$$\begin{pmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$$

★ 上の行列を以下のようにも書く：

$$\mathrm{diag}(a_1, a_2, \ldots, a_n)$$

特別な形の行列

★ 正方行列 A で対角成分とその上下の副対角にのみ値を持つ行列は3重対角行列

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & \cdots & 0 \\ 0 & c_2 & a_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$$

特別な形の行列

★ 正方行列 A で上三角成分と，対角から1つ下の副対角にのみ値を持つ行列はヘッセンベルグ行列

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a2n \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

特別な形の行列

★ 正方行列 A で対角成分およびその上側にのみ値を持つ行列は**上三角行列**

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

★ 正方行列 A で対角成分およびその下側にのみ値を持つ行列は**下三角行列**（転置したら上三角行列になる行列）

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

連立一次方程式 – ガウスの消去法

連立一次方程式

★ 例えば，以下の様な連立一次方程式

$$\begin{aligned} 2x + 4y + 5z &= 10, \\ 3x + 6y + 9z &= 8, \\ 4x + 7y + 2z &= -2 \end{aligned}$$

は次のようにも書ける：

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 5 \\ 3 & 6 & 9 \\ 4 & 7 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 8 \\ -2 \end{pmatrix}$$

連立一次方程式

★ **連立一次方程式**は行列 $A \in M_{nm}(\mathbb{R})$ とベクトル $x \in \mathbb{R}^m, b \in \mathbb{R}^n$ を用いて以下のように書ける

$$Ax = b$$

- ★ x が未知ベクトルで，A と b が既知
- ★ n が条件（式）の数で，m が未知変数の数
- ★ $m = n$ かつ A が逆行列を持つ場合は，答えは一意に定まって $x = A^{-1}b$
（$Ax = b$ の両辺に，左から A^{-1} を掛ければ良い）

Aが上三角行列の場合

★ 連立一次方程式は行列 A が上三角行列（で対角成分が 0 でない）の場合は簡単に解ける．例えば，

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 5 \\ 0 & 6 & 9 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 8 \\ -2 \end{pmatrix}$$

の場合は，下の式から順番に見ていくと，z, y, x の順番に定まる．

★ 連立一次方程式を上のような状況に変形することによって解く方法が**ガウスの掃き出し法**（**ガウスの消去法**）

ガウスの掃き出し法

★ $(A\ \ b)$，または $\left(A\,\middle|\,b\right)$ でもって連立一次方程式を表す例えば,

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 5 \\ 3 & 6 & 9 \\ 4 & 7 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 8 \\ -2 \end{pmatrix}$$

は次のように書く：

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 5 & 10 \\ 3 & 6 & 9 & 8 \\ 4 & 7 & 2 & -2 \end{pmatrix}$$

基本操作

- ★ やっても良い操作は以下の通り
  - ★ i行目とj行目を入れ替える
    - ★ 式の順番を入れ替えている
  - ★ i行目のc倍をj行目に足す（$c \in \mathbb{R}$）
    - ★ j行目の両辺に等しい値を足している（i行目の両辺は等しい）
  - ★ i行目をc倍する（$c \neq 0$）
    - ★ i行目の両辺に等しい値をかけている

基本方針

- ★1行目を何倍かを2行目，3行目，$\cdots$，n行目に加える（倍率は行によって変える）
  - ★2行目，3行目，$\cdots$，n行目の1列目が0になるようにする
- ★2行目を何倍かを3行目，4行目，$\cdots$，n行目に加える
  - ★3行目，4行目，$\cdots$，n行目の2列目が0になるようにする
- ★3行目を何倍かを4行目，5行目，$\cdots$，n行目に加える
  - ★4行目，5行目，$\cdots$，n行目の3列目が0になるようにする
- ★以下同様
- ★途中で第(k,k)成分が0になったら，k行目以降でk列目が0でない行と入れ替える（部分ピボット選択）

例題

★ 以下の連立一次方程式を解こう

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ -2 & -2 & 2 & -2 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ 1 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 18 \\ -12 \\ 28 \\ 16 \end{pmatrix}$$

これは次のように書いた：

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 & 18 \\ -2 & -2 & 2 & -2 & -12 \\ 2 & 3 & 3 & 5 & 28 \\ 1 & 2 & 1 & 4 & 16 \end{pmatrix}$$

例題

★1行目を2行目に加える

★1行目 $\times(-1)$ を3行目に加える

★1行目 $\times(-1/2)$ を4行目に加える

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 & 18 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 6 \\ 0 & 1 & 3 & 1 & 10 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & 7 \end{pmatrix}$$

例題

★ このままでは2行目を何倍して3行目に加えても $(2,3)$ 成分は0にできない

★2行目と3行目を入れ替える

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 & 18 \\ 0 & 1 & 3 & 1 & 10 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 6 \\ 0 & 1 & 1 & 2 & 7 \end{pmatrix}$$

★2行目 $\times(-1)$ を4行目に加える

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 & 18 \\ 0 & 1 & 3 & 1 & 10 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 6 \\ 0 & 0 & -2 & 1 & -3 \end{pmatrix}$$

例題

★3行目を4行目に加える

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 & 18 \\ 0 & 1 & 3 & 1 & 10 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 3 \end{pmatrix}$$

- ★4行目は$3x_4 = 3$より$x_4 = 1$
- ★3行目は$2x_3 + 2x_4 = 6$つまり$2x_3 + 2 = 6$より$x_3 = 2$
- ★2行目は$x_2 + 3x_3 + x_4 = 10$つまり$x_2 + 6 + 1 = 10$より$x_2 = 3$
- ★1行目は$2x_1 + 2x_2 + 4x_4 = 18$つまり$2x_1 + 6 + 4 = 18$より$x_1 = 4$

★ **この方法で行列Aが正方行列かつ正則の場合，必ず解ける．** このとき，解は存在し一意

連立一次方程式 – 正則行列ではない場合

Aが正則でない場合

★ 行列Aが正方行列でなかったり，正則でない場合は上三角行列ではなく**階段行列**を目指す

★ 階段行列：i行目の左からz_i個が0であるとすると，$z_1 < z_2 < \cdots$ となる行列

$$\begin{pmatrix} \# & * & * & * \\ 0 & \# & * & * \\ 0 & 0 & \# & * \\ 0 & 0 & 0 & \# \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \# & * & * & * \\ 0 & \# & * & * \\ 0 & 0 & 0 & \# \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \# & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & \# \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & \# & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

★ $\#$は0でない実数，$*$は何でも良い

例題

★ 以下の連立一次方程式を解こう

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

これは次のように書いた：

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

例題

★1行目 $\times(-1)$ を2行目に加える

★1行目 $\times(-1)$ を4行目に加える

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

★2列目は2行目以降全部0になったので飛ばす

★2行目を使って，3列目の下の方を0にしたい

例題

★2行目 $\times(-1)$ を3行目に加える

★2行目 $\times(-1/2)$ を4行目に加える

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

例題

★ 3行目と4行目の式は$0 = 0$という式

　★ 見た目は4つの式があったが，実質的には2つしか式がなかった

★ 2行目の式は，x_3かx_4を決めればもう片方も決まる

★ x_3, x_4が決まっていれば，1行目の式は，x_1かx_2を決めればもう片方も決まる

★ $x_4 = \alpha$とすると，$x_3 = 1 - \alpha$

★ $x_2 = \beta$とすると，$x_1 = 2 - \alpha - \beta$

例題

★ よって

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2-\alpha-\beta \\ \beta \\ 1-\alpha \\ \alpha \end{pmatrix}$$

ただし $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$

例題・改

★もし

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となった場合：

★3行目と4行目は意味のない式

★2行目からx_4が定まる

★1行目は，x_1, x_2, x_3のどれか2つが定まれば残り1つが定まる．よって$x_2 = \alpha, x_3 = \beta$などとする

例題・改

★もし以下のようになった場合：

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- ★2行目，3行目，4行目は意味のない式
- ★1行目から x_1, x_4 は何でもよく，x_2, x_3 の片方が定まればもう一方も定まる．よって $x_1 = \alpha, x_3 = \beta, x_4 = \gamma$ などとする
- ★その行までで定まっていない変数のうち，係数が0でないものを1つ選び，その他の変数を任意定数で置けば良い

例題・改

★もし

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となった場合は，4行目が$0 = 1$という矛盾した式になっているため，解は存在しない

行列のランクと解の性質

- ★ 行列 $A \in M_{nm}(\mathbb{R})$ を階段行列に変形した時，全ての要素が 0 というわけではない行の数を行列 A のランク（階数）といい $\mathrm{rank}\ A$ で表す
- ★ 解は存在しないか，存在するなら任意定数を $n - \mathrm{rank}\ A$ 個用いて書ける
- ★ 右辺ベクトル b が 0 の場合は，必ず解は存在し，解は一次独立な $n - \mathrm{rank}\ A$ 個のベクトルの線形結合となる

一次独立と線形結合

★ $x_1, x_2, \ldots, x_n$ をベクトルと $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ を実数とした時

$$\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \cdots + \alpha_n x_n$$

を，ベクトル $x_1, x_2, \ldots, x_n$ の線形結合という．$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ をその係数という．

★ $x_1, x_2, \ldots, x_n$ の線形結合が0となるのは，係数が全て0のときに限る場合を，一次独立という．

$$\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \cdots + \alpha_n x_n = 0 \;\Rightarrow\; \alpha_1 = \alpha_2 = \cdots \alpha_n = 0$$

★ 一次独立でないなら一次従属という

例題：右辺ベクトルが0の場合

★ 以下のようになったとする（最後の列は右辺ベクトルを表すが，右辺ベクトルが0なら省略することが多い）

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

★ この行列のランクは $\mathrm{rank}\, A = 2$ であるから，$4 - 2 = 2$ 個の一次独立なベクトルの線形結合で解は表される

例題：右辺ベクトルが0の場合

★ 第2行より，$x_4 = \alpha$ とすると $x_3 = -\alpha$

★ 第1行より，$x_2 = \beta$ とすると $x_1 = -\alpha - \beta$

★ よって解は

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\alpha - \beta \\ \beta \\ -\alpha \\ \alpha \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

と2つのベクトルの線形結合になる

- ★ 右辺ベクトルが0で，ベクトル y_1, y_2 が解なら，$\alpha_1 y_1 + \alpha_2 y_2$ も解

行列のランクに関する性質

- ★ 行列のランクは行列の一次独立な行ベクトルの数に等しい
- ★ 行列のランクは行列の一次独立な列ベクトルの数に等しい
- ★ 次数nの正方行列のランクは，正則ならばn，正則でなければnより小さい
- ★ 次数nの正方行列のランクは，その行列式が0でなければn，行列式が0ならばランクはnより小さい
  - ★ 右辺ベクトルが0で，正則行列の場合，解は0のみ
  - ★ 0以外の解を持つかの判定に行列式を用いる

行列式

行列式と置換

★ 1からnまでの整数を並び替えるものをn次の置換という

★ n次の置換からなる集合を$\mathfrak{S}_n$と書く（$\mathfrak{S}$はS）

★ $\sigma \in \mathfrak{S}_5$は$1,2,3,4,5$を$4,5,1,3,2$に並び替えるものとすると，並び替えた後の1番目の数は4，2番目の数は5，…なので,

$$\sigma(1) = 4,\ \sigma(2) = 5,\ \sigma(3) = 1,\ \sigma(4) = 3,\ \sigma(5) = 2$$

と書き，更にσを以下のように表す：

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 5 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

行列式と置換

★ $\sigma \in \mathfrak{S}_n$ に対して，$1 \leq i < j \leq N$ で $\sigma(i) > \sigma(j)$ を満たすペア (i, j) の数を転倒数という

★ 置換 σ に対して符号 $\operatorname{sgn}\sigma$ を以下で定める：

$$\operatorname{sgn}\sigma = (-1)^{\sigma\text{の転倒数}} = \begin{cases} 1 & (\text{転倒数が偶数}) \\ -1 & (\text{転倒数が奇数}) \end{cases}$$

★ 1から n までが順番に並んでいる状態から，2つの要素の位置を入れ替える（スワップ）を繰り返して σ の並べ替えの状態にするまでに偶数回のスワップが必要なら $\operatorname{sgn}\sigma = 1$，奇数回のスワップが必要なら $\operatorname{sgn}\sigma = -1$ もいえる

★ 1回のスワップで転倒数が奇数だけ変わることがいえる．また偶数回のスワップで σ を表せるなら奇数回のスワップで表せないこと，などもいえる

★ 置換

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 5 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

の転倒数は7より，$\operatorname{sgn}\sigma = -1$.

行列式と置換

★ n 次正方行列 A の行列式 $\det A$ は

$$\det A = \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_n} \operatorname{sgn} \sigma \times A_{1,\sigma(1)} A_{2,\sigma(2)} \cdots A_{n,\sigma(n)}$$

と定義される．$|A|$ と書くこともある．

★ 例：

$$\det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = ad - bc,$$

$$\det \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = aei - afh - bdi + bfg + cdh - ceg$$

行列式の性質

★ ある行の何倍かを別の行に足しても行列式は不変

★ ある列の何倍かを別の列に足しても行列式は不変

$$\det\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = \det\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g+ka & h+kb & i+kc \end{pmatrix}$$

★ ある行をk倍すると，行列式もk倍される（列も同様）

$$\det\begin{pmatrix} a & b & c \\ kd & ke & kf \\ g & h & i \end{pmatrix} = k\det\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}$$

行列式の性質

★ ある行と別の行を入れ替えると行列式は -1 倍される（列も同様）

$$\det\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = -\det\begin{pmatrix} g & h & i \\ d & e & f \\ a & b & c \end{pmatrix}$$

★ $\det A = \det A^{\mathrm{T}}$, $\det(AB) = (\det A)(\det B)$

★ PLU 分解することで行列式を求めることが可能（文字などが入っていなければ）

★ L の対角成分がすべて 1 ならば，$\det P_{ij} = -1$, $\det L = 1$, $\det U = \prod_k U_{kk}$

余因子展開

★ $A(i,j)$ で行列 A の i 行目 j 列目を取り除いた行列を表す．任意の k に対して

$$\begin{aligned}\det A = (-1)^{k+1}A_{k,1}\det A(k,1)\\ + (-1)^{k+2}A_{k,2}\det A(k,2) + \cdots + (-1)^{k+n}A_{k,n}\det A(k,n)\end{aligned}$$

が成り立つ．（転置の性質を使えば列に関してもできる）

★ 例（1 行目に対する余因子展開）：

$$\det\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = a\det\begin{pmatrix} e & f \\ h & i \end{pmatrix} - b\det\begin{pmatrix} d & f \\ g & i \end{pmatrix} + c\det\begin{pmatrix} d & e \\ g & h \end{pmatrix}$$

★ 他の性質を利用して a,b,c の幾つかを 0 にして余因子展開すると計算が楽なことが多い

固有値問題

固有値，固有ベクトル

★ n 次正方行列 A に対して

$$Ax = \lambda x, \quad x \neq 0, \quad x \in \mathbb{C}^n, \ \lambda \in \mathbb{C}$$

を満たすペア (λ, x) を考える．λ を固有値，x を固有ベクトルという．

★ 上の式を変形すると $(A - \lambda I)x = 0$ となり，$A - \lambda I$ が逆行列を持つなら $x = 0$ になってしまう

★ よって $A - \lambda I$ は逆行列を持ってはいけない．つまり $\det(A - \lambda I) = 0$

- ★ $\det(\lambda I - A)$ は λ についての n 次多項式になり，これを固有多項式，あるいは特性多項式と呼ぶ

★ 方針：$\det(A - \lambda I) = 0$ を解き，各固有値 λ について固有ベクトルを求める

★ 後々あまり本質的ではなくなるが，ここでは一応複素数の範囲で考えることにする

例題

★ 行列

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & -1 \\ 1 & -2 & 1 \\ -1 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

の固有値，固有ベクトルを求めよう．

★ まず特性方程式

$$\det(A - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} -2-\lambda & 1 & -1 \\ 1 & -2-\lambda & 1 \\ -1 & 1 & -2-\lambda \end{pmatrix} = 0$$

を解く．

例題

★3行目を2行目に加える

$$\det\begin{pmatrix} -2-\lambda & 1 & -1 \\ 0 & -1-\lambda & -1-\lambda \\ -1 & 1 & -2-\lambda \end{pmatrix} = 0$$

★3行目$\times(-2-\lambda)$を1行目に加える

$$\det\begin{pmatrix} 0 & -1-\lambda & 3+2\lambda+\lambda^2 \\ 0 & -1-\lambda & -1-\lambda \\ -1 & 1 & -2-\lambda \end{pmatrix} = 0$$

例題

★2行目の$(-1-\lambda)$を括りだす

$$(-1-\lambda)\det\begin{pmatrix} 0 & -1-\lambda & 3+4\lambda+\lambda^2 \\ 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -2-\lambda \end{pmatrix} = 0$$

★第$(1,3)$要素を因数分解

$$(-1-\lambda)\det\begin{pmatrix} 0 & -1-\lambda & (\lambda+1)(\lambda+3) \\ 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -2-\lambda \end{pmatrix} = 0$$

例題

★ 1行目の $(1+\lambda)$ を括りだす

$$-(1+\lambda)^2 \det\begin{pmatrix} 0 & -1 & \lambda+3 \\ 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -2-\lambda \end{pmatrix} = 0$$

★ 第1列で余因子展開

$$-(1+\lambda)^2(-1)\det\begin{pmatrix} -1 & \lambda+3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = 0$$

例題

★2×2の行列式を計算する

$$
\begin{aligned}
&-(1+\lambda)^2(-1)(-1-(\lambda+3))=0\\
&-(1+\lambda)^2(4+\lambda)=0
\end{aligned}
$$

★以上より，固有値は-4（代数的重複度1）と-1（代数的重複度2）

例題

★ 次に，固有値 -4 に対応する固有ベクトルを求めよう．連立一次方程式

$$(A - \lambda I)x = (A + 4I)x = 0$$

を解けば良い．

★ $A + 4I$ は

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 1 \\ -1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

例題

★2行目，3行目を2倍する

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 2 & 4 & 2 \\ -2 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

★1行目$\times(-1)$を2行目に，1行目を3行目に加える

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & 3 & 3 \\ 0 & 3 & 3 \end{pmatrix}$$

例題

★ 2行目 $\times(-1)$ を3行目に加える

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 0 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

★ 以上より，固有値 -4 に付随する固有ベクトルは $\alpha \in \mathbb{C}$ として

$$\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \alpha \neq 0$$

例題

★ 次に，固有値 -1 に対応する固有ベクトルを求めよう．連立一次方程式

$$(A - \lambda I)x = (A + I)x = 0$$

を解けば良い．

★ $A + I$ は

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

例題

★1行目を2行目に，1行目 $\times(-1)$ を3行目に加える

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

★以上より，固有値 -1 に付随する固有ベクトルは $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ として

$$\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\alpha, \beta) \neq (0,0)$$

固有値分解（対角化）

- ★ n 次正方行列 A の固有値は (代数的) 重複度を含めて n 個存在する
- ★ 重複度 k の固有値に対応する一次独立な固有ベクトルは最大で k 個
- ★ もし全ての固有ベクトルに対して重複度の数だけ一次独立な固有ベクトルが存在するなら固有値分解できる
- ★ $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ を重複度を含めての固有値，$u_1, u_2, \ldots, u_n$ を対応する固有ベクトルとする $(Au_k = \lambda_k u_k)$
- ★ u_k を並べた n 次正方行列を U とする：$U = (u_1 \; u_2 \; \cdots \; u_n)$
- ★ 相異なる固有値に付随する固有ベクトルは互いに一次独立であり，U は正則であることがわかる

固有値分解（対角化）

★ $U^{-1}AU = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$ と対角化される

★ $A = U\mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)U^{-1}$ と固有値分解される

$$\begin{aligned} AU &= A\begin{pmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} Au_1 & Au_2 & \cdots & Au_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1 u_1 & \lambda_2 u_2 & \cdots & \lambda_n u_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_n \end{pmatrix} \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n) \\ &= U\mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n) \end{aligned}$$

で両辺に左からU^{-1}をかけると対角化が, 両辺に右からU^{-1}をかけると固有値分解が出てくる

対角化，固有値分解

★ よって，先の例にて

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

とすると，

$$A = U \begin{pmatrix} -4 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} U^{-1}, \quad U^{-1}AU = \begin{pmatrix} -4 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

注意点

★ 全ての行列が固有値分解できるわけではない

- ★ 例えば，重複度が2の固有値に付随する一次独立な固有ベクトルが1つしかない場合がある：

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

を考えると，固有多項式はλ^2で固有値0の重複度が2だが，$\operatorname{rank} A = 1$で，一次独立な固有ベクトルが1つしかない

  - ★ 代数的重複度は2だが，幾何的重複度は1

★ 実行列を考えていても，固有値や固有ベクトルは複素数，複素ベクトルになる場合がある

（補足）逆行列の求め方

★ 逆行列は連立一次方程式を解くことで求まる

★ $A^{-1} = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n)$ として $AA^{-1} = I$ の k 列目を考えると

$$Ax_k = (0 \ 0 \ \cdots \ 0 \ 1 \ 0 \ \cdots \ 0)^{\mathrm{T}}$$

を解けば良い．一度に同時に n 個の連立一次方程式を考えて，

$$A\left(x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n\right) = (e_1 \ e_2 \ \cdots \ e_n)^{\mathrm{T}}$$

を解けば楽．e_k は k 番目の要素だけ1で残りが0のベクトル

固有値の性質

★ 行列 A の固有値を λ，対応する固有ベクトルを x とする

★ 行列 A^n の固有値は λ^n，対応する固有ベクトルは x

★ $A^n x = A^{n-1}Ax = \lambda A^{n-1}x = \cdots = \lambda^n x$

★ 行列 A の固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ とする

★ $\mathrm{trace} A = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n$

★ $\det A = \lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n$

★ 以下の2式より証明可能

$$\det(\lambda I - A) = \lambda^n - (\mathrm{trace} A)\lambda^{n-1} + \cdots + \det A,$$
$$\det(\lambda I - A) = (\lambda - \lambda_1) \cdots (\lambda - \lambda_n)$$

実対称行列の場合

★ 行列 A が実対称行列の場合（$A = A^{\mathrm{T}}$）
- ★ **固有値は全て実数**
- ★ 対角化可能
- ★ 異なる固有値に付随する固有ベクトルは直交する
  - ★ **実対称行列は直交行列を用いて対角化可能**

実対称行列の場合

★ ベクトル $x = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n)^{\mathrm{T}}, y = (y_1 \ y_2 \ \cdots \ y_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^n$ に対して：

★ 内積を

$$(x, y) = x^{\mathrm{T}} y = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$$

などと書く．$(x, y) = 0$ のとき，ベクトル x と y は直交するという．

★ ベクトル x の長さ，または，2ノルムを

$$\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2} = \sqrt{(x, x)}$$

と書く（単に $\|x\|$ とも書く）．

★ $(x, y) = \|x\| \|y\| \cos\theta$，ただし θ はベクトル x, y のなす角

実対称行列の場合

- ★ 直交行列とは，正方行列であって，列ベクトルが全て直交し，全ての列ベクトルの長さが1であるものである
- ★ 同値な条件として以下が存在する
  - ★ 正方行列で行ベクトルが全て直交し，全ての行ベクトルの長さが1であるものである
  - ★ 行列を A としたとき，$A^{\mathrm{T}} = A^{-1}$

★ 先程の例にて，行列 A は

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & -1 \\ 1 & -2 & 1 \\ -1 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

と実対称行列であったので，直交行列を用いて対角化できる．

★ 固有値は -4（重複度1）と -1（重複度2）で，その固有ベクトルは

$$w_{-4} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix},\ w_{-1} = \beta \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},\ \alpha \neq 0,\ (\beta, \gamma) \neq 0$$

であった．$(w_{-4}, w_{-1}) = 0$ であることがわかる．

対角化，固有値分解

★ u_1 として，w_{-4} の長さを1にしたもの

$$u_1 = \frac{w_{-4}}{\|w_{-4}\|_2} = \frac{1}{\sqrt{3}\alpha} w_{-4} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

を選ぶ.

★ u_2, u_3 として，$(\beta, \gamma) = (1/\sqrt{2}, 0), (1/\sqrt{6}, 2/\sqrt{6})$ とした

$$u_2 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_3 = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix}$$

を選ぶ（選び方は例えば後述のグラムシュミットの直交化法を用いる）.

対角化，固有値分解

★ こうすると $\|u_1\| = \|u_2\| = \|u_3\| = 1$，$(u_1, u_2) = (u_1, u_3) = (u_2, u_3) = 0$ となる

★ u_1, u_2, u_3 を並べて，行列 U を作ると：

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}$$

★ 対称行列 A は直交行列 U を用いて対角化される：

$$U^{\mathrm{T}} A U = \begin{pmatrix} -4 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

QR 分解 – グラムシュミットの正規直交化法

実行列の内積とノルム

★ ベクトル $x = (x_1\ \ x_2\ \ \cdots\ \ x_n)^{\mathrm{T}}, y = (y_1\ \ y_2\ \ \cdots\ \ y_n)^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^n$ に対して：

★ **内積**を

$$(x, y) = x^{\mathrm{T}} y = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$$

などと書く．$(x, y) = 0$ のとき，ベクトル x と y は直交するという．

★ ベクトル x の**長さ**，または，**2 ノルム**を

$$\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2} = \sqrt{(x, x)}$$

と書く（単に $\|x\|$ とも書く）．

★ $(x, y) = \|x\| \|y\| \cos\theta$，ただし θ はベクトル x, y のなす角

グラムシュミットの正規直交化法

★ 仮定：$a_1, a_2, \ldots, a_m \in \mathbb{R}^n$ が一次独立

★ $a_1, a_2, \ldots, a_m \in \mathbb{R}^n$ から $q_1, q_2, \ldots, q_m \in \mathbb{R}^n$ を作る

★ $a_1, a_2, \ldots, a_m$ の線形結合で書けるベクトルは $q_1, q_2, \ldots, q_m$ の線形結合でも書ける

- ★ 書けなかったベクトルは書けない
- ★ $a_1, \ldots, a_m$ の線形結合で書けるベクトルの集合を $a_1, \ldots, a_m$ の張る空間 $\mathrm{span}(a_1, \ldots, a_m)$ と書くと

$$\mathrm{span}(a_1, \ldots, a_m) = \mathrm{span}(q_1, \ldots, q_m)$$

★ $\|q_k\| = 1$ かつ $i \neq j$ のとき $(q_i, q_j) = 0$

★ q_k は $a_1, a_2, \ldots, a_k$ の線形結合で書く

グラムシュミットの正規直交化法

★ $q_1 = \frac{a_1}{\|a_1\|}$

★ $q_2' = a_2 - (a_2, q_1)q_1$

★ $q_2 = \frac{q_2'}{\|q_2'\|}$

★ $q_3' = a_3 - (a_3, q_1)q_1 - (a_3, q_2)q_2$

★ $q_3 = \frac{q_3'}{\|q_3'\|}$

★ $q_k' = a_k - (a_k, q_1)q_1 - (a_k, q_2)q_2 - \cdots - (a_k, q_{k-1})q_{k-1}$

★ $q_k = \frac{q_k'}{\|q_k'\|}$

★ 長さが1のベクトル q_k に対して，$x - (x, q_k)q_k$ でベクトル x の q_k 方向成分を抜き取ることができる

★ $x/\|x\|$ でベクトルの長さを1にすることができる

QR 分解

★ $A = (a_1 \ a_2 \ \cdots \ c_m) \in M_{n,m}(\mathbb{R})$ として

$$
\begin{aligned}
A &= QR \\
&= (q_1 \ \cdots \ q_m) \begin{pmatrix} \|a_1\| & (a_2, q_1) & (a_3, q_1) & \cdots & (a_m, q_1) \\ 0 & \|q_2'\| & (a_3, q_2) & \cdots & (a_m, q_2) \\ 0 & 0 & \|q_3'\| & & (a_m, q_3) \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \|q_m'\| \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

特異値分解

行列の特異値分解（統計であまり使わない定義）

★ 行列 $A \in M_{m,n}(\mathbb{R})$ のランクを r とする．この時

$$A = U\Sigma V^{\mathrm{T}}, \quad U \in M_m(\mathbb{R}), \quad \Sigma \in M_{m,n}(\mathbb{R}), \quad V \in M_n(\mathbb{R})$$

と分解することを特異値分解という．ここで，U, V は直交行列で，Σ は

$$\Sigma_{i,j} = \begin{cases} \sigma_i & (i = j \leq r) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}, \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$$

とする．

★ $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r$ を特異値といい，特異値 σ_k の左特異ベクトルは U の第 k 列のベクトル，右特異ベクトルは V の第 k 列のベクトルである

行列の特異値分解（よく使う別定義）

★ 行列 $A \in M_{m,n}(\mathbb{R})$ のランクを r とする．この時

$$A = U\Sigma V^{\mathrm{T}}, \quad U \in M_{m,r}(\mathbb{R}), \quad \Sigma \in M_r(\mathbb{R}), \quad V \in M_{n,r}(\mathbb{R})$$

と分解することを特異値分解という．ここで，U, V の列ベクトルは互いに直交し（$U^{\mathrm{T}}U = V^{\mathrm{T}}V = I$），$\Sigma$ は対角行列で

$$\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r), \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$$

とする．

★ $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r$ を特異値といい，特異値 σ_k の左特異ベクトルは U の第 k 列のベクトル，右特異ベクトルは V の第 k 列のベクトルである

行列の特異値と特異ベクトル

- ★ 特異値σ_kの左特異ベクトルをu_k，右特異ベクトルをv_kとすると
- ★ $Av_k = \sigma_k u_k, \quad A^{\mathrm{T}} u_k = \sigma_k v_k, \quad u_k \neq 0, \quad v_k \neq 0$
- ★ つまり，
  - ★ $A^{\mathrm{T}} A v_k = \sigma_k A^{\mathrm{T}} u_k = \sigma_k^2 v_k$
  - ★ $A A^{\mathrm{T}} u_k = \sigma_k A v_k = \sigma_k^2 u_k$
    - ★ σ_kは$A^{\mathrm{T}} A$（または$A A^{\mathrm{T}}$）の固有値の正の平方根
    - ★ v_kは$A^{\mathrm{T}} A$の固有ベクトル
    - ★ u_kは$A A^{\mathrm{T}}$の固有ベクトル

行列の分解

- ★ $A = U\Sigma V^{\mathrm{T}}$ より
- ★ $A = \sigma_1 u_1 v_1^{\mathrm{T}} + \sigma_2 u_2 v_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \sigma_r u_r v_r^{\mathrm{T}}$
  - ★ A をランク1の行列 r 個の和で書いている
- ★ $k < r$ として，行列 A を $\sigma_1 u_1 v_1^{\mathrm{T}} + \sigma_2 u_2 v_2^{\mathrm{T}} + \cdots + \sigma_k u_k v_k^{\mathrm{T}}$ と近似できる
  - ★ 小さい特異値の影響は小さい
  - ★ 実際にビッグデータの処理を行う場合は，大きい方から数個〜数十個の特異値，特異ベクトルが必要となることが多い

注意点

- ★ 固有値分解は正方行列でなければできない，正方行列でもできないことがある
  - ★ 特異値分解は必ず可能
- ★ 特異値分解の定義の違いは，2つ目の定義は，1つ目の定義において，0になる部分を省いたもの
  - ★ 1つ目の定義において特異値分解されていれば，U, V の最初の r 列のみを取ってくることによって，2つ目の定義に対する特異値分解になる
  - ★ 2つ目の定義において特異値分解されていれば，U, V の最初の r 列以外の残りの部分は U, V が直交行列になるように付け加えれば何でも良い（乱数で埋めてグラムシュミットを行うなど）

例題

★ 次の行列 A の特異値分解を求めてみよう

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 2 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}$$

★ 特異値，右特異ベクトルを求めるため，$A^{\mathrm{T}}A$ の固有値固有ベクトルを求める：

$$A^{\mathrm{T}}A = \begin{pmatrix} 14 & 10 \\ 10 & 14 \end{pmatrix}$$

例題

★ $A^{\mathrm{T}}A$ の固有方程式は

$$\det(\lambda I - A^{\mathrm{T}}A) = \det\begin{pmatrix} \lambda - 14 & -10 \\ -10 & \lambda - 14 \end{pmatrix} = 0$$

$$(\lambda - 14)^2 - 10^2 = 0$$

$$\lambda = 4, 24$$

★ よって $A^{\mathrm{T}}A$ の固有値は $4, 24$ で，A の特異値は $2, 2\sqrt{6}$.

例題

★ 固有ベクトルを求めてみると，特異値$\sigma_1 = 2\sqrt{6}$に対する右特異ベクトルは，例えば,

$$v_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

となり，特異値$\sigma_2 = 2$に対する右特異ベクトルは，例えば,

$$v_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

となる.

例題

★ それぞれの特異値に対する左特異ベクトルを求める.

★ $Av_k = \sigma_k u_k$ より, $u_k = Av_k/\sigma_k$ だから

$$u_1 = \frac{1}{2\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1 & 3\\ 2 & 2\\ 3 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

$$u_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 3\\ 2 & 2\\ 3 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$

例題

★ よって,

$$
\begin{aligned}
A &= \begin{pmatrix} u_1 & u_2 \end{pmatrix} \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2) \begin{pmatrix} v_1 & v_2 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2\sqrt{6} & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

例題

★1つ目の定義の場合は,

$$A=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & * \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & * \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & *\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2\sqrt{6} & 0 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$

の $*$ を U が直交行列になるように埋めれば良い，例えば

$$A=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2\sqrt{6} & 0 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$