データ分析基礎
線形代数の基礎知識 (増強版)

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

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

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 $\left(A \mid b\right)$ 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，…，n行目に加える（倍率は行によって変える）
  - ★2行目，3行目，…，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，…，n行目に加える
  - ★3行目，4行目，…，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，…，n行目に加える
  - ★4行目，5行目，…，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 – PLU 分解

PLU 分解

★ ガウスの掃き出し法で行った操作（行基本変形と呼ばれる）は，特別な形の行列を左から掛けることによって達成できる

★ 正則な正方行列 A について $A = PLU$ と分解できる

- ★ P は置換行列（行の入れ替えを記憶）
- ★ L は下三角行列（ある行の定数倍を別の行に足しこむ操作を記憶）
- ★ U は上三角行列（ガウスの掃き出し法の結果）

★ もし $A = PLU$ と分解できれば，連立一次方程式 $Ax = b$ は簡単に解ける

- ★ $PLUx = b$ より $Ux = y$ と置くことで
  - ★ $Ly = P^{-1}b$
  - ★ $Ux = y$
- ★ を順番に解けば良い

PLU 分解

★ 左からかけると，i 行と j 行を入れ替える作用を持つ行列は

$$P_{ij} = \begin{pmatrix} \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

- ★ 単位行列から $(i,i),(j,j)$ 成分を 0 にし $(i,j),(j,i)$ 成分を 1 に変更したもの
- ★ 右からかけると，i 列と j 列を入れ替える作用を持つ

PLU 分解

★ 左から掛けると，i 行目の c 倍を j 行目に足し込む作用を持つ行列は

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

★ 単位行列から (j, i) 成分を c に変更したもの

LU 分解の例

★ 以下の行列 A の LU 分解を考えよう

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

- ★ ガウスの消去法のように行う
- ★ LU 分解は途中で対角成分に 0 が登場しなければ可能
  - ★ 任意の主座小行列式が 0 でなければ可能

★ 最初は $A = IA$ より,

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

LU 分解の例

★ 一列目を消去

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

★ 同様に2列目を消去

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 0 & 4 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -5 & 0 \end{pmatrix}$$

★ 同様に3列目を消去

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 0 & 4 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 2 & -5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 10 \end{pmatrix}$$

PLU 分解の例

- ★ 先程の行列 A の PLU 分解を考えよう
  - ★ PLU 分解は $\det A \neq 0$ ならば可能（$\det A = 0$ でも適当に定義を拡張すれば可能）
  - ★ 計算の安定性のためには，「軸」（注目する対角成分）が 0 になってしまったから，やむなく行を入れ替えるのではなく，積極的に行を入れ替え，軸の要素の絶対値ができるだけ大きくなるようにする
    - ★ 頑張るならば，列の入れ替えも許す $PLUS$ 分解も考えられるが，計算量の観点からあまり使われない

- ★ 最初は $A = IA$ より，

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

PLU 分解の例

★ 軸は絶対値最大より，このまま一列目を消去

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

★ 軸の要素の絶対値を大きくするため，2行目と4行目を入れ替え

$$P_{2,4} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = P_{2,4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} P_{2,4} P_{2,4} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$P_{2,4} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

PLU 分解の例

★2列目を消去

$$P_{2,4}\begin{pmatrix}2 & 2 & 0 & 4\\ 2 & 3 & 3 & 5\\ -2 & -2 & 1 & -2\\ 1 & 3 & 1 & 4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 1 & 0\\ 1 & \frac{1}{2} & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 2 & 0 & 4\\ 0 & 2 & 1 & 2\\ 0 & 0 & 1 & 2\\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0\end{pmatrix}$$

★軸の要素の絶対値を大きくするため，3行目と4行目を入れ替え

$$P_{3,4}P_{2,4}\begin{pmatrix}2 & 2 & 0 & 4\\ 2 & 3 & 3 & 5\\ -2 & -2 & 1 & -2\\ 1 & 3 & 1 & 4\end{pmatrix} = P_{3,4}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 1 & 0\\ 1 & \frac{1}{2} & 0 & 1\end{pmatrix}P_{3,4}P_{3,4}\begin{pmatrix}2 & 2 & 0 & 4\\ 0 & 2 & 1 & 2\\ 0 & 0 & 1 & 2\\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0\end{pmatrix}$$

$$P_{3,4}P_{2,4}\begin{pmatrix}2 & 2 & 0 & 4\\ 2 & 3 & 3 & 5\\ -2 & -2 & 1 & -2\\ 1 & 3 & 1 & 4\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0\\ 1 & \frac{1}{2} & 1 & 0\\ -1 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 2 & 0 & 4\\ 0 & 2 & 1 & 2\\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1 & 2\end{pmatrix}$$

PLU 分解の例

★3列目を消去

$$P_{3,4}P_{2,4}\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ -1 & 0 & \frac{2}{5} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

★両辺左から $P = P_{2,4}P_{3,4}$ をかける

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 2 & 3 & 3 & 5 \\ -2 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & 1 & 4 \end{pmatrix} = P\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ -1 & 0 & \frac{2}{5} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

BLAS と LU 分解

キャッシュ

★ スカラ型CPUをもつハードウェアの特性

- ★ 演算スピードに対して，メインメモリとCPUの間を命令列やデータが移動するスピードが遅い
- ★ そのため，CPUにはキャッシュ（L1, L2, L3, L4キャッシュ）が搭載されている

★ キャッシュとは

- ★ 最近使ったデータとその周辺のデータを一時的に蓄えておくところ
- ★ CPUの内部にあり，メインメモリよりはるかに容量が小さい代わりに，CPU（レジスタ）とキャッシュの間で（メインメモリと比較して）高速にデータのやりとりができる

★ このようなキャッシュが搭載されている理由

- ★ 統計的に，最近使ったデータとその周辺のデータは直後に必要とされることが多い
  - ★ 結果的に，そのようなプログラムが高速に動作する
  - ★ できるだけ，メモリの色々な場所を使うプログラムではなく，**同じ場所・その周辺のデータを近いうちに使い回すようなプログラムを書かなければならない**

BLAS

★ BLAS：Basic Linear Algebra Subprograms

　★ 行列，ベクトルの基本的な演算のライブラリ（下記参照）

★ LAPACK：Linear Algebra PACKage

　★ 連立一次方程式，最小二乗法，固有値分解，特異値分解など

★ Level 1 BLAS：ベクトルとベクトルの演算が主

　★ ベクトルの内積・2 ノルム，ベクトルのスワップ，ベクトルのコピー，ベクトルのスカラ倍

★ Level 2 BLAS：行列とベクトルの演算が主

　★ 行列とベクトルの乗算，Rank 1 更新

★ Level 3 BLAS：行列と行列の演算が主

　★ 行列と行列の乗算，右辺ベクトルが複数ある連立一次方程式の後退代入

★ レベルの高い BLAS ほど計算効率が良い（うまくデータを使い回せる）

Rank 1 更新

- ★ 行列 A を $A + \alpha x y^{\mathrm{T}}$ で置き換える演算
  - ★ $A \in M_{mn}(\mathbb{C})$：m 行 n 列の行列
  - ★ $x \in \mathbb{C}^m$：m 次元ベクトル
  - ★ $y \in \mathbb{C}^n$：n 次元ベクトル
  - ★ $\alpha \in \mathbb{C}$：スカラ

LU 分解と Rank 1 更新 (Level 2)

★ 例として以下の4行4列の行列 A の LU 分解を考える

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}$$

1列目の要素を0にしようとすると

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12} & a_{23} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{13} & a_{24} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{14} \\ 0 & a_{32} - \frac{a_{31}}{a_{11}}a_{12} & a_{33} - \frac{a_{31}}{a_{11}}a_{13} & a_{34} - \frac{a_{31}}{a_{11}}a_{14} \\ 0 & a_{42} - \frac{a_{41}}{a_{11}}a_{12} & a_{43} - \frac{a_{41}}{a_{11}}a_{13} & a_{44} - \frac{a_{41}}{a_{11}}a_{14} \end{pmatrix}$$

★ 行列 A の右下3行3列分を見て，B から B' に変更されたとすると Rank 1 更新 $B' = B - xy^{\mathrm{T}}$

$$x = \begin{pmatrix} \frac{a_{21}}{a_{11}} \\ \frac{a_{31}}{a_{11}} \\ \frac{a_{41}}{a_{11}} \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}, \quad y = \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ a_{14} \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$$

LU 分解と行列乗算 (Level 3)

★ 例として以下の4行4列の行列 A の LU 分解を考える

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ L_{21} & 1 & 0 & 0 \\ L_{31} & L_{32} & 1 & 0 \\ L_{41} & L_{42} & L_{43} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ 0 & U_{22} & U_{23} & U_{24} \\ 0 & 0 & U_{33} & U_{34} \\ 0 & 0 & 0 & U_{44} \end{pmatrix}$$

★ A の部分行列の LU 分解が（Rank 1 更新などを利用して）できているとする

$$A_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \\ a_{41} & a_{42} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ L_{21} & 1 \\ L_{31} & L_{32} \\ L_{41} & L_{42} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & U_{22} \end{pmatrix}$$

★ 連立一次方程式の後退代入（Level 3 BLAS）

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ L_{21} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{13} & U_{14} \\ U_{23} & U_{24} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{13} & a_{14} \\ a_{23} & a_{24} \end{pmatrix}$$

によって，$U_{13}, U_{14}, U_{23}, U_{24}$ が求まる

LU 分解と行列乗算 (Level 3)

★ 行列の右下2行2列分については，行列積（Level 3 BLAS）を用いて

$$\begin{pmatrix} L_{31} & L_{32} \\ L_{41} & L_{32} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{13} & U_{14} \\ U_{23} & U_{24} \end{pmatrix}$$

を引けば良い

★ 再帰的に，行列 A を横に分割して，LU 分解することで，**Level 3 BLAS を使うことができる**

連立一次方程式の数値解法

直接法と反復法

- ★ **直接法**
  - ★ 厳密に計算できるとすると，有限回の計算で厳密に解が計算できる方法
  - ★ 密行列の場合，できる限りの高精度が求められる場合
    - ★ PLU 分解，コレスキー分解
    - ★ 疎行列向け前処理：Nested–Dissection Ordering
- ★ **反復法**
  - ★ 適当な初期値から計算を繰り返していくと，徐々に答えに近づいていく方法
  - ★ 疎行列の場合，そこそこの精度で答えが求められれば十分な場合
    - ★ ヤコビ法，クリロフ部分空間法（共役勾配法など）

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

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

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

$$-(1+\lambda)^2(-1)(-1-(\lambda+3)) = 0$$
$$-(1+\lambda)^2(4+\lambda) = 0$$

★ 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：$U = \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_n \end{pmatrix}$

★ 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

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

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，

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

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，

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

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 $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ 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

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

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，$A^{\mathrm{T}} = A^{-1}$

対角化，固有値分解

★ 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

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

QR 分解 – QR 分解と CGS と MGS

QR 分解

★ グラムシュミットの正規直交化法に対する行列分解も存在

★ **正則な正方行列の場合**：A について $A = QR$ と分解できる

- ★ Q は直交行列（$Q^{\mathrm{T}}Q = QQ^{\mathrm{T}} = I$，列ベクトルが正規直交）
- ★ R は上三角行列（元のベクトルとの関係を記憶）

★ **列フルランクな長方行列の場合1**：$A \in M_{nm}(\mathbb{R})$ について $A = QR$ と分解できる

- ★ $Q \in M_{nm}(\mathbb{R})$ は $Q^{\mathrm{T}}Q = I$ を満たす（列ベクトルが正規直交）
- ★ $R \in M_m(\mathbb{R})$ は上三角行列

★ **列フルランクな長方行列の場合2**：$A \in M_{nm}(\mathbb{R})$ について $A = QR$ と分解できる

- ★ $Q \in M_n(\mathbb{R})$ は直交行列
- ★ $R \in M_{nm}(\mathbb{R})$ は上三角行列の下に零行列をくっつけたもの

古典グラムシュミット法と修正グラムシュミット法

★ グラムシュミット法では

$$q'_k = a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (a_k, q_i) q_i$$

という操作ですでに直交化したベクトルの成分を抜き取っていた

★ これを素直にやるのは**古典グラムシュミット法（CGS，Classical Gram–Schmidt）**

★ これは数学的には以下と同値

$$\begin{aligned}
q_k^{(1)} &= a_k - (a_k, q_1) q_1, \\
q_k^{(2)} &= q_k^{(1)} - (q_k^{(1)}, q_2) q_2, \\
q_k^{(3)} &= q_k^{(2)} - (q_k^{(2)}, q_3) q_3, \\
&\vdots \\
q'_k = q_k^{(k-1)} &= q_k^{(k-2)} - (q_k^{(k-2)}, q_{k-1}) q_{k-1}
\end{aligned}$$

★ これをやるのが**修正グラムシュミット法（MGS，Modified Gram–Schmidt）**

古典グラムシュミット法と修正グラムシュミット法

- ★ **古典グラムシュミット法の特徴**
  - ★ MGSと比べ精度が悪い
  - ★ うまく実装すれば高速（**工夫するとBLASが活用できる**）
  - ★ ベクトルが徐々に与えられる場合への対応が容易なことが多い
- ★ **修正グラムシュミット法の特徴**
  - ★ CGSと比べ精度が良い
  - ★ ある種の演算の順番の変更が可能（ベクトルが最初から全部ある場合）
    - ★ **Pivot選択**（ピボット選択）をいれることができる
    - ★ **ベクトルが一次従属な場合にも（少なくても数学的には）対応可能**

- ★ その他の方法
  - ★ ハウスホルダー変換を用いた方法
  - ★ Givens回転を用いた方法
  - ★ コレスキー分解を用いた方法

QR 分解の例：CGS で行う場合の基本的な手順

★ 以下の行列の QR 分解をしてみよう

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

★ まずは以下のように書ける

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

★ 1 列目の長さは $\sqrt{1^2 + 2^2 + 2^2 + 0} = 3$ より

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

QR 分解の例：CGS で行う場合の基本的な手順

★1列目と2列目の内積は $\frac{1}{3}\cdot 2+\frac{2}{3}\cdot 2+\frac{2}{3}\cdot 0+0\cdot 1=2$ より

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

★2列目の長さは $\sqrt{5}$ より

$$\begin{pmatrix}1&2&0&1\\2&2&0&1\\2&0&3&1\\0&1&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{3}&\frac{4}{3\sqrt{5}}&0&1\\\frac{2}{3}&\frac{2}{3\sqrt{5}}&0&1\\\frac{2}{3}&-\frac{4}{3\sqrt{5}}&3&1\\0&\frac{1}{\sqrt{5}}&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}3&2&0&0\\0&\sqrt{5}&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

QR 分解の例：CGSで行う場合の基本的な手順

★1列目と3列目の内積は $\sqrt{2}$ より

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{4}{3\sqrt{5}} & -\frac{2}{3} & 1 \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & -\frac{4}{3} & 1 \\ \frac{2}{3} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{5}{3} & 1 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & \sqrt{5} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

★2列目と3列目の内積は $-\frac{4}{\sqrt{5}}$ より

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{2}{5} & 1 \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & -\frac{4}{5} & 1 \\ \frac{2}{3} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{3}{5} & 1 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{4}{5} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & \sqrt{5} & -\frac{4}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

QR 分解の例：CGS で行う場合の基本的な手順

★3列目の長さは $\frac{3}{\sqrt{5}}$ より

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & 1 \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & 1 \\ \frac{2}{3} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{3}{3\sqrt{5}} & 1 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & \sqrt{5} & -\frac{4}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

★1列目と4列目の内積は $\frac{5}{3}$ より

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & \frac{4}{9} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & -\frac{1}{9} \\ \frac{2}{3} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{3}{3\sqrt{5}} & -\frac{1}{9} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 & \frac{5}{3} \\ 0 & \sqrt{5} & -\frac{4}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

QR 分解の例：CGS で行う場合の基本的な手順

★2列目と4列目の内積は $\frac{\sqrt{5}}{3}$ より

$$
\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{3}{3\sqrt{5}} & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & -\frac{1}{3} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 & \frac{5}{3} \\ 0 & \sqrt{5} & -\frac{4}{\sqrt{5}} & \frac{\sqrt{5}}{3} \\ 0 & 0 & \frac{3}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
$$

★3列目と4列目の内積は $\frac{\sqrt{5}}{3}$ より

$$
\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & -\frac{2}{9} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{1}{9} \\ \frac{2}{3} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{3}{3\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & -\frac{2}{9} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 & \frac{5}{3} \\ 0 & \sqrt{5} & -\frac{4}{\sqrt{5}} & \frac{\sqrt{5}}{3} \\ 0 & 0 & \frac{3}{\sqrt{5}} & \frac{\sqrt{5}}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
$$

QR 分解の例：CGS で行う場合の基本的な手順

★ 4列目の長さは $\frac{1}{3}$ より

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & -\frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3\sqrt{5}} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & \frac{3}{3\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{4}{3\sqrt{5}} & -\frac{2}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 & \frac{5}{3} \\ 0 & \sqrt{5} & -\frac{4}{\sqrt{5}} & \frac{\sqrt{5}}{3} \\ 0 & 0 & \frac{3}{\sqrt{5}} & \frac{\sqrt{5}}{3} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

CGSとMGSの計算手順の差

★ 先ほどの例だと，CGSの場合はRが以下の順番で決まっていった

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 & 7 \\ & 3 & 5 & 8 \\ & & 6 & 9 \\ & & & 10 \end{pmatrix}$$

- ★ q_1確定後，a_2からq_1方向成分を抜き取り，2本目のベクトルq_2を確定させる
- ★ a_3からq_1, q_2方向成分を抜き取り，3本目のベクトルq_3を確定させる

★ MGSの場合は，自然に以下の順番にすることもできる（CGSでこの手順で計算すると非効率）

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ & 5 & 6 & 7 \\ & & 8 & 9 \\ & & & 10 \end{pmatrix}$$

- ★ 1本目のベクトルq_1が確定した時点で，a_2, a_3, a_4の全てからq_1方向成分を抜き取る
- ★ 2本目のベクトルq_2が確定した時点で，a_3, a_4の全てからq_2方向成分を抜き取る

Pivot選択付き QR 分解

★ **Pivot選択付き QR 分解**

- ★ $a_1, a_2, \ldots, a_m$ の順番の入れ替えを許す場合
- ★ 置換行列 P を用いて $AP = QR$ と分解する

★ **基本的な戦略**

- ★ MGSにおいて，$q_1, q_2, \ldots, q_k$ まで確定し，$a'_{k+1}, a'_{k+2}, \ldots, a'_m$ には既に $q_1, \ldots, q_k$ 方向成分はないとする
- ★ $a'_{k+1}, \ldots, a'_m$ のうち，**ベクトルの長さが最大のものが $k+1$ 列目**になるように入れ替える

★ **特徴**

- ★ $a'_{k+1} = 0$ となっても，$a'_{k+1}, \ldots, a'_m$ のどれかが0でなければ計算を進められる
  - ★ 行列 A が列フルランクでなくても QR 分解（のようなこと）が可能
- ★ $a_1, \ldots, a_m$ の長さがほぼ同じ場合，より安定になる
  - ★ 長さが同じになるように最初に前処理しておいても良い

Pivot選択付き QR 分解の計算

★例として，以下の状況において，3列目と4列目を入れ替えることを考える

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{24} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & a'_{13} & a'_{14} \\ q_{21} & q_{22} & a'_{23} & a'_{24} \\ q_{31} & q_{32} & a'_{33} & a'_{24} \\ q_{41} & q_{42} & a'_{43} & a'_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

★ $\sqrt{a'^2_{13} + a'^2_{23} + a'^2_{33} + a'^2_{43}} < \sqrt{a'^2_{14} + a'^2_{24} + a'^2_{34} + a'^2_{44}}$

★3列目と4列目を入れ替える置換行列 $P_{3,4}$ を用いて

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{24} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{34} \end{pmatrix} P_{3,4} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & a'_{13} & a'_{14} \\ q_{21} & q_{22} & a'_{23} & a'_{24} \\ q_{31} & q_{32} & a'_{33} & a'_{24} \\ q_{41} & q_{42} & a'_{43} & a'_{34} \end{pmatrix} P_{3,4} P_{3,4} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} P_{3,4}$$

Pivot選択付き QR 分解の計算

★例として，以下の状況において，3列目と4列目を入れ替えることを考える

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{24} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & a'_{13} & a'_{14} \\ q_{21} & q_{22} & a'_{23} & a'_{24} \\ q_{31} & q_{32} & a'_{33} & a'_{24} \\ q_{41} & q_{42} & a'_{43} & a'_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

★ $\sqrt{a'^2_{13} + a'^2_{23} + a'^2_{33} + a'^2_{43}} < \sqrt{a'^2_{14} + a'^2_{24} + a'^2_{34} + a'^2_{44}}$

★3列目と4列目を入れ替える置換行列 $P_{3,4}$ を用いて

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{24} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{34} \end{pmatrix} P_{3,4} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & a'_{14} & a'_{13} \\ q_{21} & q_{22} & a'_{24} & a'_{23} \\ q_{31} & q_{32} & a'_{34} & a'_{23} \\ q_{41} & q_{42} & a'_{44} & a'_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{14} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{24} & r_{23} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

列フルランクでない行列のQR分解

★ 列フルランクでない場合は，例えば，以下のような形でQR分解される：

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{24} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{34} \end{pmatrix} P = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \\ q_{31} & q_{32} \\ q_{41} & q_{42} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} \end{pmatrix}$$

または

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{24} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{34} \end{pmatrix} P = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} & q_{14} \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} & q_{24} \\ q_{31} & q_{32} & q_{33} & q_{24} \\ q_{41} & q_{42} & q_{43} & q_{34} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

補足：Rの各要素はどのように計算すべきか？

★ 特に，MGSの場合，いつの段階での内積をRの要素にすれば良いか？

★ ベクトルの要素を抜き取るときに計算した内積を入れれば良い

★ 古典グラムシュミット法

$$q'_k = a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (a_k, q_i) q_i$$

★ 修正グラムシュミット法

$$\begin{aligned} q_k^{(1)} &= a_k - (a_k, q_1) q_1, \\ q_k^{(2)} &= q_k^{(1)} - (q_k^{(1)}, q_2) q_2, \\ &\vdots \\ q'_k = q_k^{(k-1)} &= q_k^{(k-2)} - (q_k^{(k-2)}, q_{k-1}) q_{k-1} \end{aligned}$$

★ 各内積の計算が1回で済み，これが精度的にも良い

QR 分解 – グラムシュミット法とBLAS

CGSにおける行列ベクトル積の利用（Level 2）

★ 古典グラムシュミット法における計算

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

★ 式通りに計算すると，ベクトルの内積・ベクトルの加減算のみなのでLevel 1 BLASで実装可能

★ これは行列 Q を

$$Q = (q_1 \ \ q_2 \ \ \cdots \ \ q_{k-1}) \in M_{n,k-1}(\mathbb{R})$$

とすると，

$$q'_k = a_k - QQ^{\mathrm{T}}a_k$$

とLevel 2 BLASである行列ベクトル積 $Q^{\mathrm{T}}a_k$ と $Q(Q^{\mathrm{T}}a_k)$ を利用して計算が可能

補足：行列積の順序と計算量

★ 疑問：$QQ^{\mathrm{T}}a_k$ の計算順序

- ★ 方法A：$Q(Q^{\mathrm{T}}a_k)$ と計算すると Level 2 BLAS（行列・ベクトル積）
- ★ 方法B：$(QQ^{\mathrm{T}})a_k$ と計算すると Level 3 BLAS が使える（行列積）！

★ 方法Bで計算してはいけない！

- ★ 方法Aと方法Bでは**根本的に計算回数が違う**（連鎖行列積問題）

★ 例として，Q を100行50列の行列，a_k を100次元のベクトルとする

- ★ x 行 y 列の行列と，y 行 z 列の行列の行列積に必要なコストを xyz とする
  - ★ 方法Aのコストは $50 \times 100 \times 1 + 100 \times 50 \times 1 = 10000$
  - ★ 方法Bのコストは $100 \times 50 \times 100 + 100 \times 100 \times 1 = 510000$ **（方法Aの51倍）**

CGSにおける行列積の利用（Level 3）

★ n 行4列の実行列に対する QR 分解の例で考える

$$(a_1\ a_2\ a_3\ a_4) = (q_1\ q_2\ q_3\ q_4)\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} \\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} \\ 0 & 0 & 0 & r_{44} \end{pmatrix}$$

★ q_1, q_2 まで（r_{11}, r_{12}, r_{22} も含む）何らかの方法で QR 分解を計算する

$$q_1 = \frac{a_1}{\|a_1\|},\ \ r_{12} = (a_2, q_1),$$

$$q_2' = a_2 - r_{12}q_1,\ \ q_2 = \frac{q_2}{\|q_2'\|}$$

★ R の右上 2×2 を一気に計算（行列積，Level 3 BLAS）

$$\begin{pmatrix} r_{13} & r_{14} \\ r_{23} & r_{24} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_1^{\mathrm{T}} \\ q_2^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} (a_3\ a_4)$$

CGSにおける行列積の利用（Level 3）

★ a_3, a_4 から q_1, q_2 方向の成分を一気に抜き取る（行列積，Level 3 BLAS）

$$(q_3' \;\; \tilde{a}_4) = (a_3 \;\; a_4) - (q_1 \;\; q_2) \begin{pmatrix} r_{13} & r_{14} \\ r_{23} & r_{24} \end{pmatrix}$$

★ q_3' の正規化，$\tilde{a}_4$ から q_3 成分の抜き取りと正規化

$$q_3 = \frac{q_3'}{\|q_3'\|}, \quad r_{34} = (a_4, q_3)$$

$$q_4' = \tilde{a}_4 - r_{34} q_3, \quad q_4 = \frac{q_4'}{\|q_4'\|}$$

★ LU 分解と同様に，再帰的に行列を分割し，QR 分解することで，Level 3 BLASの効果を最大限利用できる

QR 分解 – AllReduce アルゴリズム

★ **AllReduce アルゴリズム**

★ とても縦長の行列を，分散メモリ向けの並列計算で QR 分解する方法の1つ

★ 行列 A の QR 分解 $A = QR$ を3並列で計算する場合

★ 行列 A を縦に3分割する

$$A = \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}$$

★ 分割したそれぞれの行列を QR 分解する：$A_k = Q_k R_k$

★ R_k を縦につなげた行列 R_g を QR 分解する

$$R_g = \begin{pmatrix} R_0 \\ R_1 \\ R_2 \end{pmatrix} = Q_g R$$

AllReduce アルゴリズム

★ Q_k を並べたブロック対角行列と Q_g の積を計算

$$Q = \begin{pmatrix} Q_0 & 0 & 0 \\ 0 & Q_1 & 0 \\ 0 & 0 & Q_2 \end{pmatrix} Q_g$$

★ 以上で計算した Q, R は，行列 A の QR 分解を与える

$$A = \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_0 & 0 & 0 \\ 0 & Q_1 & 0 \\ 0 & 0 & Q_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_0 \\ R_1 \\ R_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_0 & 0 & 0 \\ 0 & Q_1 & 0 \\ 0 & 0 & Q_2 \end{pmatrix} Q_g R = QR$$

★ TSQR 法

★ 行列の分割を再帰的に用いる

★ 行列を分割すると条件数が大きくなるので，部分行列の QR 分解にハウスホルダー変換による方法を用いる

補足：条件数と精度

★ 行列 A の条件数は以下で定義される：

$$\mathrm{cond}(A) = \frac{\text{最大特異値}}{\text{最小特異値}}$$

★ 行列 A を $A = QR$ と分解したときの $\|Q^{\mathrm{T}}Q - I\|$ について

- ★ 古典グラム・シュミット法の場合：$O(\varepsilon \times \mathrm{cond}(A)^2)$ と思われている
- ★ 修正グラムシュミット法の場合：$O(\varepsilon \times \mathrm{cond}(A))$
- ★ ハウスホルダー変換を用いた方法の場合：$O(\varepsilon)$
- ★ ギブンズ回転を用いた方法の場合：$O(\varepsilon)$
- ★ **CGS2** の場合：$O(\varepsilon)$，ただし $O(\varepsilon \times \mathrm{cond}(A)) < 1$ ならば
  - ★ CGS2 は古典グラムシュミット法を 2 回繰り返す方法

★ ε はマシンイプシロンを表す（倍精度の場合 2^{-52} 程度）

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 AA^{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 AA^{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,

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

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

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

固有値計算概観

固有値問題（特異値問題）の種類

- ★ 対象となる行列による違い
  - ★ 密行列か，疎行列か
  - ★ 対称行列（エルミート行列）か，一般的な行列か
- ★ 求めたいものによる違い
  - ★ 全ての固有値，固有ベクトルが必要な場合
  - ★ 一部の固有値，固有ベクトルが必要な場合
    - ★ 大きい固有値，小さい固有値，絶対値が大きい固有値，絶対値が小さい固有値，特定の範囲の固有値
  - ★ 固有値のみ必要な場合，固有値・固有ベクトルの両方が必要な場合
  - ★（特異値問題の場合）右特異ベクトル，左特異ベクトルの片方のみ必要な場合

- ★ 特異値分解の計算法の多くは，対称行列の固有値分解の計算法を特異値分解に「チューニング」したもの

シンプルな方法：べき乗法

★ 最も絶対値が大きい固有値・固有ベクトルを計算

★ 適当な初期ベクトル x を取り，以下の操作を繰り返す

$$x \longleftarrow Ax,$$
$$x \longleftarrow \frac{x}{\|x\|}$$

★ 最も絶対値が大きい固有値に対応する固有ベクトルに収束

★ 最も絶対値が大きい（異なる）固有値が複数あると困ることも

★ **実対称行列の場合**，グラムシュミット法などと併用すると，2番目に絶対値が大きい固有値・固有ベクトル，3番目に…なども計算可能

★ ただし，計算スピード・頑健さなどの理由であまり実用的ではない（同時反復法の方が実用的）

べき乗法の変形

★ 固有値を変形してべき乗法を適用する

★ 固有値シフトして $A - \alpha I$ にべき乗法を適応すると，$|\lambda - \alpha|$ が最大の固有値・固有ベクトルを計算できる

- ★ 実対称なら最も値が大きい固有値，最も値が小さい固有値が計算できることになる
- ★ シフトによって情報が潰れるため実用的でない

★ 逆行列 A^{-1} にべき乗法を適応すると，絶対値最小の固有値・固有ベクトルを計算できる

- ★ 実際には $y = A^{-1}x$ は $Ay = x$ と連立一次方程式を解いて計算

★ 逆行列+固有値シフトで $(A - \alpha I)^{-1}$ にべき乗法を適応すると，α に最も近いの固有値・固有ベクトルを計算できる

逆反復法

- ★ 固有値 $\tilde{\lambda}$ のみ計算できている場合, $(A-\tilde{\lambda}I)^{-1}$ に対するべき乗法で固有ベクトルを計算できる
  - ★ 固有ベクトルも計算できている場合も，このべき乗法で固有ベクトルの精度を高められる
  - ★ **実対称行列の場合**，実際は，近接固有値が存在する場合は，QR 分解などで直交化して近くの固有値の情報を混ぜない（同時逆反復）

同時反復法

★ 仮定：**実対称行列**

★ 絶対値が大きい方から k 個の固有値・固有ベクトルを計算する

★ 適当な初期ベクトルを k 本（列ベクトルとして）並べて初期行列 X を作り以下を繰り返す

$$X \longleftarrow AX,$$
$$X = QR \quad (QR\text{分解をする}),$$
$$X \longleftarrow Q$$

★ k 番目と $k+1$ 番目の固有値の絶対値が等しく，値が異なると困る

★ 同様にして，**同時逆反復法**も定式化される

密行列を密行列のまま，全ての固有値を求める方法

- ★ ヤコビ法（**実対称行列**の場合のみ）
  - ★ 回転行列を駆使し，非対角成分を徐々に対角成分に追いやっていく
  - ★ 計算時間量が少し多いので，行列サイズが大きいと実用的ではないが，計算誤差の面では優秀
- ★ LR 法
  - ★ $A = LU$ と分解し，$A \longleftarrow UL$ とすることを繰り返すと対角行列に収束（2×2 のブロックを含む場合も）
  - ★ LU 分解がそもそも計算できないこともあるし，あまり実用的ではない
- ★ QR 法
  - ★ $A = QR$ と分解し，$A \longleftarrow RQ$ とすることを繰り返すと対角行列に収束
  - ★ ロバストな方法だが，計算に時間がかかる

前処理（三重対角化，ヘッセンベルグ化）

- ★ 前処理として，行列を
  - ★ **実対称行列の場合**：三重対角行列に変換
  - ★ 一般の行列の場合：ヘッセンベルグ行列に変換
- ★ 方法
  - ★ ハウスホルダー変換を用いる方法
  - ★ **実対称行列の場合**：Givens 回転を用いる方法
  - ★ **実対称行列の場合**：Bischof–Wu の方法（帯行列に変換）＋村田法
  - ★ 一般の行列の場合：アーノルディ（Arnoldi）法，**実対称行列の場合**：ランチョス（Lanczos）法
    - ★ Arnoldi 法，Lanczos 法は，行列を変形するのではなく，行列ベクトルの積と，ベクトルの漸化式を用いて計算していく
    - ★ 疎行列の場合に非常に効率的（Arnoldi は結局密行列ができあがるが…）
    - ★ 数値誤差のため，あまり行列サイズが大きいと途中で破綻する（再直交化を入れると少しマシだがそれでも…．また再直交化を入れると計算量が増える）

前処理（三重対角化，ヘッセンベルグ化）

- ★ 前処理を行うと，QR 分解など効率的に計算できる
- ★ **実対称行列の場合**：その他の手法も生まれる（固有値計算のみのものも）
  - ★ 二分法
  - ★ qd 法とその系列（dqds 法など）
  - ★ 分割統治法（ロバストではないが，高速なことが多い）

大規模疎行列向けの方法

- ★ Arnoldi 法，Lanczos 法を途中まで行い，途中までのヘッセンベルグ・三重対角で固有値を計算する
  - ★ 求めたい固有値に対応する固有空間が十分に近似されていればOK
  - ★ そうでなければ，欲しい固有値に対する固有空間を残しつつ，リスタート（いろいろな方法がある）
  - ★ 実際は，絶対値が大きい方から k 個の固有値・固有ベクトルが欲しい場合が実用的

- ★ イメージとしては：
  - ★ $2k$ 行 $2k$ 列の三重対角行列を作る
  - ★ $2k$ 個の固有値のうち，大きい方の k 個を残す（小さい方から k 個を捨て）て，k 行 k 列の三重対角行列にする
  - ★ Lanczos 法を行い $k+1$ 行から作って，再び $2k$ 行 $2k$ 列の三重対角行列を作る

その他の手法

- ★ Jacobi–Davidson 法
  - ★ Arnoldi 法，Lanczos 法と関連
  - ★ 絶対値が大きい方から k 個以外にも対応
- ★ Sakurai–Sugiura 法
  - ★ 複素平面で（数値的に）周回積分する方法
  - ★ 大規模並列に対応，スパコン向け

固有値のべき乗法

べき乗法のアルゴリズム

★ 最も絶対値が大きい固有値・固有ベクトルを計算

★ 適当な初期ベクトル x を取り，以下の操作を繰り返す

$$x \longleftarrow Ax,$$
$$x \longleftarrow \frac{x}{\|x\|}$$

★ 議論の簡単のため，正規化を省略し，反復回数がわかるように以下のように置いておく

★ 固有値を計算したい行列：$A \in M_n(\mathbb{R})$

★ 初期ベクトル：$x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$

★ 反復の式：$x^{(k)} = Ax^{(k-1)}$

★ **ここでは対称行列を対象とする**

べき乗法が収束する条件

- ★ 行列 A の固有値を絶対値が大きい順に $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ とする
  - ★ つまり，$|\lambda_1| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$

- ★ べき乗法は以下のときに収束する（**ほとんどの初期ベクトルに対して**）
  - ★ 任意の k に対して，$|\lambda_1| = |\lambda_k|$ ならば $\lambda_1 = \lambda_k$
- ★ 特に以下の場合には収束する
  - ★ $|\lambda_1| \neq |\lambda_2|$，つまり，$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$

べき乗法の収束証明

★ 固有ベクトルは一次独立であるから，初期ベクトル $x^{(0)}$ は固有ベクトル $u_1, \ldots, u_n$ を用いて書ける：

$$x^{(0)} = c_1 u_1 + \cdots c_n u_n$$

★ ただし，u_k は固有値 λ_k に付随する固有ベクトルとする

★ $c_k \neq 0$ と仮定しておく

★ 初期ベクトルをランダムに選べば，ほぼ満たされる．実際には0であっても計算を進めると誤差のため0でない場合に帰着される

★ べき乗法の反復によって，$x^{(k)}$ は以下のようになる

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= A^k x^{(0)} \\ &= c_1 \lambda_1^k u_1 + \cdots + c_n \lambda_n^k u_n \end{aligned}$$

べき乗法の収束証明

★ 今，$|\lambda_1| > |\lambda_2|$ だとすると

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= A^k x^{(0)} \\ &= c_1 \lambda_1^k \left(u_1 + \frac{c_2}{c_1} \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k + \cdots + \frac{c_n}{c_1} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k \right) \end{aligned}$$

であり，$k = 2, 3, \ldots, n$ に対し，$|\lambda_k / \lambda_1| < 1$ であるから，$k \to \infty$ のとき，絶対値最大の固有値 λ_1 に付随する固有ベクトル $c_1 \lambda_1^k u_1$ が優越してくる

★ $\lim_{k \to \infty} x^{(k)}$ は一般には 0 だったり発散するが，正規化しておけば u_1 の定数倍に収束する

べき乗法の収束証明

★一般に，$\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_i,\ |\lambda_i| > |\lambda_{i+1}|$だとすると

$$
\begin{aligned}
x^{(k)} &= A^k x^{(0)} \\
&= \lambda_1^k \left(c_1 u_1 + \cdots + c_i u_i + c_{i+1} \left(\frac{\lambda_{i+1}}{\lambda_1} \right)^k + \cdots + c_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k \right)
\end{aligned}
$$

であり, $k \to \infty$のとき, 絶対値最大の固有値λ_1に付随する固有ベクトルの**うちの1つ**$\lambda_1^k(c_1 u_1 + \cdots + c_i u_i)$が優越してくる

べき乗法が収束しない例

★ 例えば，行列 A を

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

とし，初期ベクトルを $a \neq 0, b \neq 0$ とし，

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

とする

★ べき乗法の反復を行うと

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}, x^{(2)} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, x^{(3)} = \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}, \ldots$$

固有値の計算方法

★ 固有値の計算にはレイリー商を用いる：

$$\lambda^{(k)} = \frac{(x^{(k)})^{\mathrm{T}} A x^{(k)}}{(x^{(k)})^{\mathrm{T}} x^{(k)}} = \frac{(x^{(k)})^{\mathrm{T}} x^{(k+1)}}{(x^{(k)})^{\mathrm{T}} x^{(k)}}$$

Wilkinsonの定理

★ Wilkinsonの定理

★ 実対称行列 $A \in M_n(\mathbb{R})$ の固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ とする．$r = Ax - \tilde{\lambda}x$ ならば

$$\min_i |\tilde{\lambda} - \lambda_i| \leq \frac{\|r\|}{\|x\|}$$

が成り立つ．

べき乗法の収束判定

★ 以上より，べき乗法の収束判定は以下のように行う

★ 固有ベクトルの候補 $x^{(k)}$ から，固有値の候補を

$$\lambda^{(k)} = \frac{(x^{(k)})^{\mathrm{T}} x^{(k+1)}}{(x^{(k)})^{\mathrm{T}} x^{(k)}}$$

と計算し，

$$\frac{\|x^{(k+1)} - \lambda^{(k)} x^{(k)}\|}{\|x^{(k)}\|} \leq \varepsilon$$

となれば，反復を終了する．ただし，ε はあらかじめ決めておいた小さい正の定数．

★ Wilkinson の定理より，固有値は精度良く計算できていることが（ある程度）保証されるが，**固有ベクトルの精度については何も保証されないことに注意**

べき乗法の収束判定

★ 実際に計算機で計算する場合は，$x^{(k)}$ が 0 に収束しない，発散しないように何らかの正規化を行う

★ 正規化を行う際に，$\|x^{(k)}\| = 1$ になるようにしておくと，固有ベクトルの計算，収束判定が以下のように簡略化される

★ 固有ベクトルの候補 $x^{(k)}$ から，固有値の候補を

$$\lambda^{(k)} = (x^{(k)})^{\mathrm{T}} x^{(k+1)}$$

と計算し，

$$\|x^{(k+1)} - \lambda^{(k)} x^{(k)}\| \leq \varepsilon$$

となれば，反復を終了する．

固有値の絶対値が大きい方からk個求める

★ 固有値の絶対値が大きい方から1つずつ求めていく

★ 既に固有値の絶対値が大きい方から$i-1$個の固有値・固有ベクトルが求まっているならば，絶対値が大きい方からi個目の固有値・固有ベクトルを求めるべき情報は以下のようになる

★ 適当な初期ベクトル x を取り，以下の操作を繰り返す

$$
\begin{aligned}
x &\longleftarrow Ax, \\
x &\longleftarrow x - (u_1, x)u_1 - \cdots - (u_{i-1}, x)u_{i-1}, \\
x &\longleftarrow \frac{x}{\|x\|}
\end{aligned}
$$

★ ただし，$u_1, \ldots, u_{i-1}$ は既に計算された固有ベクトルで長さが1になるように正規化されているとする

★ このアルゴリズムが収束する条件は，任意の$i = 1, 2, \ldots, k$，および，任意の$j = 1, 2, \ldots, n$に対して$|\lambda_i| = |\lambda_j|$ならば$\lambda_i = \lambda_j$である

★ 特に，$|\lambda_1| > \ldots > |\lambda_k| > |\lambda_{k+1}| \geq |\lambda_{k+2}| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$の場合は収束する．

特異値のべき乗法

特異値の捉え方

★ 行列 A の特異対を (σ_i, u_i, v_i) と書く

★ (1) 行列の A の特異値は以下の行列の固有値の正の平方根

$$B = A^{\mathrm{T}} A$$

★ $A^{\mathrm{T}} A v_i = \sigma_i^2 v_i, \ \ A A^{\mathrm{T}} u_i = \sigma_i^2 u_i$

★ (2) 行列の A の特異値は以下の行列の固有値（ただし2回ずつ出てくる）

$$B = \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^{\mathrm{T}} & 0 \end{pmatrix}$$

★ $\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^{\mathrm{T}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_i/\sqrt{2} \\ u_i/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \sigma_i \begin{pmatrix} v_i/\sqrt{2} \\ u_i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$

特異値の捉え方

★ 行列 A の特異対を (σ_i, u_i, v_i) と書く

★ (1) 行列の A の特異値は以下の行列の固有値の正の平方根

$$A^{\mathrm{T}}A$$

★ (2) 行列の A の特異値は以下の行列の固有値（ただし2回ずつ出てくる）

$$\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^{\mathrm{T}} & 0 \end{pmatrix}$$

★ 特異値・得意ベクトルを計算するべき乗法において

- ★ **反復計算を行う際には (1) の考え方**を使う
- ★ **収束判定を行う際には (2) の考え方**を使う

特異値を求めるべき乗法のアルゴリズム

★ 最も大きい特異値・特異ベクトルを計算

★ 適当な初期ベクトル u を取り，以下の操作を繰り返す

$$
\begin{aligned}
v &\longleftarrow A^{\mathrm{T}} u, \\
v &\longleftarrow \frac{v}{\|v\|}, \\
u &\longleftarrow Av, \\
u &\longleftarrow \frac{u}{\|u\|}
\end{aligned}
$$

★ これも反復回数がわかるように以下のようにする：

$$
\begin{aligned}
v^{(k+1)} &= A^{\mathrm{T}} u^{(k)}, \\
u^{(k+1)} &= Av^{(k)}
\end{aligned}
$$

特異値の計算方法

★ 特異値の近似はレイリー商を用いて計算：

$$\sigma^{(k)} = \frac{\left\| \begin{pmatrix} v^{(k)}/\sqrt{2} \\ u^{(k)}/\sqrt{2} \end{pmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^{\mathrm{T}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v^{(k)}/\sqrt{2} \\ u^{(k)}/\sqrt{2} \end{pmatrix} \right\|^2}{\left\| \begin{pmatrix} v^{(k)}/\sqrt{2} \\ u^{(k)}/\sqrt{2} \end{pmatrix} \right\|^2}$$

$$= \frac{(v^{(k)})^{\mathrm{T}} A u^{(k)}}{((u^{(k)})^{\mathrm{T}} u^{(k)} + (v^{(k)})^{\mathrm{T}} v^{(k)})/2} = \frac{(v^{(k)})^{\mathrm{T}} v^{(k+1)}}{((u^{(k)})^{\mathrm{T}} u^{(k)} + (v^{(k)})^{\mathrm{T}} v^{(k)})/2}$$

★ もし，$u^{(k)}, v^{(k)}$ が正規化されている場合

$$\sigma^{(k)} = (v^{(k)})^{\mathrm{T}} v^{(k+1)}$$

収束判定

★ 収束判定はWilkinsonの定理を考え，以下のr, xについて，$\|r\|/\|x\| \leq \varepsilon$なら収束したと判定：

$$
\begin{aligned}
r &= \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^{\mathrm{T}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v^{(k)}/\sqrt{2} \\ u^{(k)}/\sqrt{2} \end{pmatrix} - \sigma^{(k)} \begin{pmatrix} v^{(k)}/\sqrt{2} \\ u^{(k)}/\sqrt{2} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} v^{(k+1)}/\sqrt{2} \\ u^{(k+1)}/\sqrt{2} \end{pmatrix} - \sigma^{(k)} \begin{pmatrix} v^{(k)}/\sqrt{2} \\ u^{(k)}/\sqrt{2} \end{pmatrix} \\
x &= \begin{pmatrix} v^{(k)}/\sqrt{2} \\ u^{(k)}/\sqrt{2} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

★ もし，$u^{(k)}, v^{(k)}$ が正規化されている場合は $\|x\| = 1$

特異値を求めるべき乗法の収束性

★ 行列に依らず最大特異値に付随する特異ベクトルに収束する

★ ごく一部の初期ベクトルを除いて