ビッグデータの計算科学 第3–4回
線形代数の基礎

京都大学 大学院情報学研究科 数理工学専攻/高度情報教育基盤コア準備室
關戸 啓人

目的

- 固有値分解，特異値分解を理解する
- 目標は，特異値分解が手計算（手計算と計算機で解くのは違う）できるようになること
  - 行列積など行列の計算
  - 連立一次方程式
  - 行列式
  - 固有値，固有ベクトル
  - 特異値，特異ベクトル

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 次正方行列とも言い，その集合は $M_n(\mathbb{R})$ 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

行列とベクトル

- 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，行列の掛け算（行列積）

★ 2つの n 次元のベクトル

$$x = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

$$y = \begin{pmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

の内積は

$$x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$$

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．

★ 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

ベクトルの内積，行列の掛け算（行列積）

- 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$AB \neq BA$

- 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$\mathbf{0}$の行列を零行列と言い$\mathbf{0}$と書く

$$A + \mathbf{0} = \mathbf{0} + A = A,\ \mathbf{0}A = \mathbf{0},\ A\mathbf{0} = \mathbf{0}$$

★ 行列のサイズ（n行m列）を明記する場合は$\mathbf{0}_{nm}$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$AB = \mathbf{0}$だからといって$A = \mathbf{0}$または$B = \mathbf{0}$とは言えない

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

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 の逆行列と言い $B = A^{-1}$
  - 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）

連立一次方程式

★ 例えば，以下の様な連立一次方程式

$$2x + 4y + 5z = 10,$$

$$3x + 6y + 9z = 8,$$

$$4x + 7y + 2z = -2$$

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

$$Ax = b$$

と書く．

- 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
- この講義では，$m = n$ の場合がメイン
- $m = n$ 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

ガウスの掃き出し法

★ $\begin{pmatrix} A & b \end{pmatrix}$，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，…，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

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

例題

★ 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

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

例題

- 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

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

$$
\begin{pmatrix} * & * & * & * \\ \mathbf{0} & * & * & * \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & * & * \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & * \end{pmatrix},
\begin{pmatrix} * & * & * & * \\ \mathbf{0} & * & * & * \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & * \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix},
\begin{pmatrix} * & * & * & * \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & * \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix},
\begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & * & * \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}
$$

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 $\mathbf{0}$ 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 $\mathbf{0}$ 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．

$$\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \cdots + \alpha_n x_n = 0 \Rightarrow a_1 = a_2 = \cdots a_n = 0$$

- 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 $\mathrm{sgn}\,\sigma$ を以下で定める：

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

- 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 $\mathrm{sgn}\,\sigma = 1$，奇数回のスワップが必要なら $\mathrm{sgn}\,\sigma = -1$ も言える

行列式と置換

- (1回のスワップで転倒数が奇数だけ変わることが言える．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，なども言える)
- 置換

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

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

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行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）

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

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

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

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

が成り立つ.（転地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，固有ベクトル

- n次正方行列Aに対して

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{x},\ \ \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0},\ \ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}},\ \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}$$

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

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（重複度1）と-1（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 $\alpha \in \mathbb{R}$ として

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

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

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

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$\alpha, \beta \in \mathbb{R}$として

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

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（$Au_k = \lambda u_k$）
- 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

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

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

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

とすると，

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

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：

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

    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，$\mathrm{rank}\ A = 1$で，一次独立な固有ベクトルが1つしかない
  - 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
  - $A^{-1} = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix}$ として $AA^{-1} = I$ の k 列目を考えると

$$A x_k = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$$

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，

$$A \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$$

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

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

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

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 $b_1, b_2, \ldots, b_m \in \mathbb{R}^n$ を作る
- $a_1, a_2, \ldots, a_m$ の線形結合で書けるベクトルは $b_1, b_2, \ldots, b_m$ 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 $\mathrm{span}(a_1, \ldots, a_m) = \mathrm{span}(b_1, \ldots, b_m)$
- $\|b_k\| = 1$ かつ $i \neq j$ のとき $(b_i, b_j) = 0$
- b_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

- $b_1 = \dfrac{a_1}{\|a_1\|}$
- $b_2' = a_2 - (a_2, b_1) b_1$
  - $b_2 = \dfrac{b_2'}{\|b_2'\|}$
- $b_3' = a_3 - (a_3, b_1) b_1 - (a_3, b_2) b_2$
  - $b_3 = \dfrac{b_3'}{\|b_3'\|}$

$\vdots$

- $b_k' = a_k - (a_k, b_1) b_1 - (a_k, b_2) b_2 - \cdots - (a_k, b_{k-1}) b_{k-1}$
  - $b_k = \dfrac{b_k'}{\|b_k'\|}$

$\vdots$

直交行列と線形写像

- 行列 A は写像と考えることができる
  - 写像は関数 $f(x)$ の一般化で，今回はベクトルを入れるとベクトルが出てくる箱
- ベクトル x に対してベクトル Ax を対応させる
- A が直交行列の場合
  - 内積を変えない：$(x, y) = (Ax, Ay)$
  - 特に長さを変えない：$\|x\| = \|Ax\|$
  - 特に直交していたものは直交する：$(x, y) = 0$ ならば $(Ax, Ay) = 0$

直交行列と線形写像

- 直交行列 A によってベクトル $x_1, x_2, \ldots$ を $Ax_1, Ax_2, \ldots$ とすることを考える
  - これは一種の変数変換になっている
- これは座標系を
  - 座標軸を入れ替える
  - 軸の向きを変える
  - 回転する
- などをすることに対応する

正定値，非負定値

- 実対称行列Aに対して
  - 任意のベクトル$x \neq 0$に対して$x^{\mathrm{T}} A x > 0$ならばAは正定値という
  - 任意のベクトル$x \neq 0$に対して$x^{\mathrm{T}} A x \geq 0$ならば$A$は非負定値という
- 同値な条件として
  - Aの固有値が全て正のとき，およびその時に限り，Aは正定値
  - Aの固有値が全て非負のとき，およびその時に限り，Aは非負定値
- $A^{\mathrm{T}} A$や$A A^{\mathrm{T}}$は必ず非負定値

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

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

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
- $A v_k = \sigma_k u_k, \quad A^{\mathrm{T}} u_k = \sigma_k v_k, \quad u_k \neq 0, \quad v_k \neq 0$
- 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，

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

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

$$\boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

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，

$$A = \begin{pmatrix} \boldsymbol{u}_1 & \boldsymbol{u}_2 \end{pmatrix} \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2) \begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$$

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

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

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