レッスン３　線形代数の概要

ここまでのレッスンで行列算、ベクトル空間（線形空間）、線形変換（線形写像）について説明した。これで線形代数を語る言葉ができたわけである。このレッスンでは、ラーナーの便宜のため、このコンテンツで学ぶ線形代数の話題を次のように整理してそれぞれの概要をのべることにする：分解定理（同値分解、LDU 分解、QR 分解、シュール分解、ジョルダン分解、特異値分解、CS 分解)、行列式、内積とノルム、行列とグラフ。

分解定理の価値はそれが多くの重要事実をいわば内蔵し、これらを解凍すれば線形代数の概要となる点にある。

行列式は正方行列に対してのみ定義され、「線分の長さ→平行四辺形の面積→平行 6 面体の体積→高次元空間内の平行多面体の体積（いずれも符号付)」という一般化の結果を表す。「可逆性⇔行列式の非零性」「正方連立一次方程式の解の各成分は行列式の比で表せる（クラーメルの公式)」が代表的成果である。行列式の歴史は、１９世紀半ばから興った行列論 matrix theory の系統的研究より一世紀以上も古い。このことは行列 matrix が「行列式を生む母体 ***matrix***」として捉えられたいい方にも反映されている。

内積は余弦定理の巧みな読み替えで、これにより角度と距離（ノルム）の考えが一般のベクトル空間に導入される。

ノルムは矢線ベクトルの長さの一般化である。二つのベクトルの差のノルムを両者間の距離と定義することにより、ベクトル列の極限過程（収束）の定義が可能となる。その研究は本来解析学の任務だが、これを代数学から完全に切り離すことはできない。行列固有値の存在を保証する「代数学の基本定理」は実は解析学（複素関数論）の定理である。

行列のグラフを定義することによりグラフ理論の線形代数への応用が期待できる。一例として「グラフが強連結な優対角行列は可逆である」ことを最後のレッスンで示す。

数値計算法についてはごく簡単に触れるにとどめ、詳細は専門書に譲る。

3.1　同値分解

次の分解を同値分解 equivalence decomposition という（注意：この呼び名は標準的ではない、同値な行列 equivalent matrices という標準的ないい方からの流用である)：「任意の $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ （$\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$）はつねに $\mathbf{A} = \mathbf{P}\begin{bmatrix} \mathbf{I}_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}\mathbf{Q} \equiv \mathbf{PDQ}$ の形に分解可能である。ここに、$\mathbf{I}_r$ は r 次単位行列（$1 \le r \le \min\{m,n\}$）、 $\mathbf{P} \in \mathbf{R}^{m\times m}, \mathbf{Q} \in \mathbf{R}^{n\times n}$ はそれぞれ適当な m 次、n 次の可逆行列を表す。また、r の値は $\mathbf{A}$ のみによって一意的に定まり、$\mathbf{A}$ の階数 rank という。また、行列 $\mathbf{D}$ を標準形 canonical form という。」

線形変換 $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$ に対して座標変換 $\mathbf{y} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{y}', \ \mathbf{x} = \mathbf{Qx}'$ を行うと、$\mathbf{y}' = \mathbf{PAQx}' = \mathbf{Dx}'$ とな

る。すなわち、問題の線形変換を新座標から見ると、標準形$\begin{bmatrix}\mathbf{I}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}$に見えるというわけである。

$\mathbf{A}\in\mathbf{C}^{m\times n}$ の場合も同じ形に同値分解できるが、この場合は$\mathbf{P}\in\mathbf{C}^{m\times m},\mathbf{Q}\in\mathbf{C}^{n\times n}$ である。

導出には、一連の行または列演算（レッスン１「腕試し問題」参照）による消去演算を実行し、標準形を導く。これを行列算で表現すれば、$\mathbf{P}_k\cdots\mathbf{P}_1\mathbf{A}\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_l=\mathbf{D}$（標準形）となるので、これを$\mathbf{A}$について解いた形が同値分解を表す。ここに、$\mathbf{P}_1,\cdots,\mathbf{Q}_1,\cdots$はすべて可逆行列である。

同値分解は、のちほど示すように、ベクトル空間の基底と次元に関する性質、線形変換の零空間と値域の構造などに関する基礎的な事実を内蔵している。代表例をあげると：

(1)「線形代数の基礎定理」 $\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n}$ かつ$m<n$なら$\mathbf{Ax}=\mathbf{0}$は非零解$\mathbf{0}\neq\mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$をもつ。」

(2)「$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times m}$が逆行列をもつ$\Leftrightarrow$ $\mathbf{Ax}=\mathbf{0}$の解が$\mathbf{x}=\mathbf{0}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$に限る$\Leftrightarrow$すべての$\mathbf{b}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$に対して$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$が可解。」

(3)「$\mathbf{A},\mathbf{B}\in\mathbf{R}^{m\times m}$に対して$\mathbf{AB}=\mathbf{I}$が真なら$\mathbf{BA}=\mathbf{I}$も真である。」

(4)「n次元ベクトル空間の基底は必ずn個のベクトルからなる。」

（以上は前レッスン 2.17 節で別法により証明済み）

(5)「（次元定理） $\dim(\mathbf{S}\cap\mathbf{T})=\dim(\mathbf{S})+\dim(\mathbf{T})-\dim(\mathbf{S}+\mathbf{T})$　ここに$\mathbf{S},\mathbf{T}$は与えられたベクトル空間内の任意の部分空間を表す。」（ゆえに、右辺が 1 以上なら、$\mathbf{S}\cap\mathbf{T}$は少なくとも一つの非零ベクトルを含む。）

(6)「方程式$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$（$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n},\mathbf{b}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$は既知、$\mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$は未知）が可解であるための必要十分条件は$\mathbf{y}^T\mathbf{A}=\mathbf{0}$（$\mathbf{y}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$）なら必ず$\mathbf{y}^T\mathbf{b}=0$が成り立つことである。」（必要性は明らか。これが十分性を兼ねる点が値打ち。）

(7)「$\mathbf{R}^{m\times n}$上の関係「$\mathbf{A}\sim\mathbf{B}\Leftrightarrow$適当な可逆行列$\mathbf{P},\mathbf{Q}$に対して$\mathbf{A}=\mathbf{PBQ}$」は同値関係を表し、同値類は階数の値による類別を表す。ここに階数rは$r=0,1,\cdots,\min\{m,n\}$の各値をとる」

3.2　LDU 分解

次の分解を LDU 分解 LDU decomposition という：「任意の$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n}$（$\mathbf{A}\neq\mathbf{0}$）に対して$m$次順列行列$\mathbf{P}$、$n$次順列行列$\mathbf{Q}$を適当に取れば、$\mathbf{PAQ}$を

(1) $$\mathbf{PAQ}=\begin{bmatrix}\mathbf{L}_{11} & \mathbf{0}\\ \mathbf{L}_{21} & \mathbf{I}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{D}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{U}_{11} & \mathbf{U}_{12}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I}\end{bmatrix}\equiv\mathbf{LDU}$$

の形に分解できる。ここに$\mathbf{L}_{11}$はr次単位下三角行列、$\mathbf{D}_r$は可逆r次対角行列、$\mathbf{U}_{11}$はr次単位上三角行列、$\mathbf{L}_{21}$は$(m-r)\times r$行列、$\mathbf{U}_{12}$は$r\times(n-r)$行列を表し、$r=rank(\mathbf{A})$である。」

$\mathbf{L}_{11},\mathbf{D}_r,\mathbf{U}_{11}$の形は

$$\mathbf{L}_{11}=\begin{bmatrix}1 & & & \mathbf{O}\\ x & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ x & \cdots & x & 1\end{bmatrix}、\mathbf{D}_r=\begin{bmatrix}d_1 & & \mathbf{O}\\ & \ddots & \\ \mathbf{O} & & d_r\end{bmatrix}\ (d_1,\cdots,d_r\neq 0)、\mathbf{U}_{11}=\begin{bmatrix}1 & x & \cdots & x\\ & 1 & x\cdots & x\\ & & \ddots & \\ \mathbf{O} & & & 1\end{bmatrix}$$

これらはいずれも可逆行列を表す。$\mathbf{PAQ}$ は $\mathbf{A}$ の行と列に適当な並べ替えを施した行列を表す。⑴を $\mathbf{A}$ について解くと（$\mathbf{P}^T=\mathbf{P}^{-1}$, $\mathbf{Q}^T=\mathbf{Q}^{-1}$ に注意)、

⑵ $$\mathbf{A}=(\mathbf{P}^T\mathbf{L})\begin{bmatrix}\mathbf{I}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}(\begin{bmatrix}\mathbf{D}_r & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I}\end{bmatrix}\mathbf{UQ}^T)$$

これは $\mathbf{A}$ の同値分解形に他ならない。また $\mathbf{PAQ}$ の左上 $r\times r$ 小行列 $\mathbf{L}_{11}\mathbf{D}_r\mathbf{U}_{11}$ は可逆行列であることに注意。すなわち、$\mathbf{A}$ から適当に選んだ r 行、r 列から構成される r 次行列は可逆である。この事実は「$\mathbf{A}$ の階数とは $\mathbf{A}$ 中の可逆小行列の最大次数に等しい」ことを示すために必要となる事実である。

LDU 分解の導出には同値分解の場合と同じ考えを使う。この場合、予め行と列の並べ替えを適当に済ませ、第 i 対角成分の適当なスカラー倍を、$(i,i+1),\cdots,(i,n)$ 、$(i+1,i),\cdots,(m,i)$ 成分に加えてゼロ化する作業を、行演算、列演算として滞りなく行えるようにしておく。このような行および列の並び替えが実際可能であることを示すことが証明のポイントとなる。詳しくはレッスン５で説明する。

LDU 分解は $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ 型正方行列方程式の数値解法として価値が高い。すなわち、$m=n$ で $\mathbf{A}$ が可逆行列の場合、LDU 分解 $\mathbf{PAQ}=\mathbf{LDU}$ が知られれば $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ は $\mathbf{LDU}(\mathbf{Q}^T\mathbf{x})=\mathbf{Pb}$ と同値となるから、下三角行列方程式 $\mathbf{Ly}=\mathbf{Pb}$ を $\mathbf{y}$ についてとき、この $\mathbf{y}$ を右辺においた上三角行列方程式 $(\mathbf{DU})\mathbf{z}=\mathbf{y}$ を $\mathbf{z}$ について解き、最後に $\mathbf{Q}^T\mathbf{x}=\mathbf{z}$ を解いて $\mathbf{x}=\mathbf{Qz}$ を得る。この方法は $\mathbf{A}$ が低次密行列 dense matrix（成分のほとんどが非零である行列、疎行列 sparse matrix に対する用語）である場合に適している。$\mathbf{A}$ を固定し右辺 $\mathbf{b}$ をいろいろ変えてとく場合でも、$\mathbf{A}$ の LDU 分解を利用するのがよく、$\mathbf{A}^{-1}$ を陽に求め、$\mathbf{x}=\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ から $\mathbf{x}$ を求める計算法は一般には避けるべきである。LDU 分解の計算法は「部分軸選択式ガウスの消去法」が代表的であるが、その前に予備的処理の施されることが多い。詳細は数値計算の専門書に譲る。

3.3　行列式

行列式は正方行列に対してのみ定義される。行列式 determinant の一般的定義は次式である：

⑴ $$\det\mathbf{A}=\det\begin{bmatrix}a_{11} & \cdots & a_{1n}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{n1} & \cdots & a_{nn}\end{bmatrix}=\sum_{(i_1,\cdots,i_n)}\operatorname{sgn}\begin{pmatrix}1 & \cdots & n\\ i_1 & \cdots & i_n\end{pmatrix}a_{i_1,1}\cdots a_{i_n,n}$$

ここに右辺の和は$1,\cdots,n$のすべての順列$(i_1,\cdots,i_n)$についてとり、符号数 signature $\mathrm{sgn}\begin{pmatrix}\cdots \\ \cdots\end{pmatrix}$の値は$i_1,\cdots,i_n$が偶順列なら$1$、奇順列なら$-1$である。ここに、基準となる順列$(1,\cdots,n)$から、異なる位置にある数を偶数回（奇数解）入れ替えて、順列$(i_1,\cdots,i_n)$が得られるとき、これを偶順列（奇順列）という。同じ順列が同時に偶順列かつ奇順列となることはなく、$n\geq 2$なら両タイプの順列の総数は相等しい。行列式の値は数（実数か複素数）である。

とくに$n=1,2,3$の場合は

$$\det[a_{11}]=a_{11}、\det\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}\end{bmatrix}=a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}$$

$$\det\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33}\end{bmatrix}=a_{11}a_{22}a_{33}-a_{11}a_{32}a_{23}+a_{21}a_{32}a_{13}-a_{21}a_{12}a_{33}+a_{31}a_{12}a_{23}-a_{31}a_{22}a_{13}$$

行列式の値は何を表すのか？$n=2$の場合は、$\det\mathbf{A}$は$\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2$によって決定される平行四辺形の符号つき面積を表し、$n=3$の場合、$\det\mathbf{A}$は$\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\mathbf{a}_3$によって決定される平行六面体の符号つき体積を表すことが知られている。$n>3$の場合は類推によって、$\mathbf{a}_1,\cdots,\mathbf{a}_n$によって決定される$n$次平行多面体の符号付体積を表すと定義する。

行列式の定義法として別法もある。まず$\mathbf{A}$の第j列$\mathbf{a}_j$（$j=1,\cdots,n$）を、単位列ベクトル

$\mathbf{e}_1=[10\cdots0]^T,\cdots,\mathbf{e}_n=[0\cdots01]^T$で展開し$\det\mathbf{A}$を次のように書く：

(2)　$\det\mathbf{A}=\det[\mathbf{a}_1\,\mathbf{a}_2\cdots\mathbf{a}_n]=\det[(a_{11}\mathbf{e}_1+\cdots+a_{n1}\mathbf{e}_n)\cdots(a_{1n}\mathbf{e}_1+\cdots+a_{nn}\mathbf{e}_n)]$

ここで$\det[\ \ ]$記号を取り払ってこれを一見“積”に見える形に書く：

(3)　$\det\mathbf{A}=\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2\cdots\mathbf{a}_n=(a_{11}\mathbf{e}_1+\cdots+a_{n1}\mathbf{e}_n)(a_{12}\mathbf{e}_1+\cdots a_{n2}\mathbf{e}_n)\cdots(a_{1n}\mathbf{e}_1+\cdots+a_{nn}\mathbf{e}_n)$
右辺を“積”と思って展開し（ただ$\mathbf{e}_1,\cdots$の現れる順序は尊重)、積の各項を法則

(4)　$\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j=-\mathbf{e}_j\mathbf{e}_i,\ \mathbf{e}_i\mathbf{e}_i=0\ \ (i,j=1,\cdots,n)$

を使って$\alpha\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2\cdots\mathbf{e}_n$の形に書き改め（$\cdots\mathbf{e}_i\cdots\mathbf{e}_i\cdots$型の項は$0$となる)、全体の和を$A\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2\cdots\mathbf{e}_n$の形にまとめる：
(5)　$\det\mathbf{A}=A\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2\cdots\mathbf{e}_n$
ここで
(6)　$\mathbf{e}_1\mathbf{e}_2\cdots\mathbf{e}_n=\det\mathbf{I}=1$
と定義すると

(7)　$\det \mathbf{A} = A$

実際、こうして得られた A の値は定義式(1)の右辺と一致するのである。試みに $n = 1,2,3$ の場合について検算して頂きたい。以上の別法はグラスマン代数 Grassmann algebra の一部を借用したものである。

　次の事実は行列式応用の典型例である：

「$\mathbf{A}$ が逆行列をもつための必要十分条件は $\det \mathbf{A} \neq 0$ である。」

「$\mathbf{A}$ が逆行列をもてば、$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ の解はクラーメルの公式 Cramer's rule によって与えられる：

$$x_j = \det(\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_{j-1}\ \mathbf{b}\ \mathbf{a}_{j+1} \cdots \mathbf{a}_n) / \det \mathbf{A} \quad (j = 1, \cdots, n) \quad (\mathbf{x} = [x_1, \cdots, x_n]^T)$$

ここに右辺分子は $\mathbf{A}$ の行列式の第 j 列を $\mathbf{b}$ で置き換えたものを表す。」

　クラ―メルの公式は並列計算可能性を示唆し一見魅力的に見えるが、精度上から数値計算には適しないことが知られている（$n = 2$ の場合においてさえ不適である)。

　行列式の定義式は $n!$ 個の積の和であるから、数値計算用には適さない。行列式の計算は

　「任意行または列を c 倍すれば行列式も c 倍される。」

　「任意行または列のスカラー倍を他行または他列に加えても行列式の値は不変である。」

　「$\det(\mathbf{AB}) = \det \mathbf{A} \det \mathbf{B}$ （$\mathbf{A}, \mathbf{B}$ は正方行列)」

　「$\det \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C} \end{bmatrix} = \det \mathbf{A} \det \mathbf{C}$ （$\mathbf{A}, \mathbf{C}$ は正方行列、次数は異なってよい)」

などの法則を使って行う。今日では行列式は理論的考察に使われることが多い。

3.4　QR 分解

　（実行列に対する）QR 分解の一般形は $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ である。ここに、$\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m \times n}$ 、 $m \geq n$ 、$\mathbf{Q} \in \mathbf{R}^{m \times m}$ は直交行列（$\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}^{-1}$)、$\mathbf{R}$ は $m \times n$ 上三角行列を表す。すなわち、

(1)
$$\underset{(m\times n)}{[\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n]} = \underset{(m\times m)}{[\mathbf{q}_1 \cdots \mathbf{q}_m]} \underset{(m\times n)}{\begin{bmatrix} r_{11} \cdots r_{1n} \\ \ddots \\ \mathbf{0} \quad r_{nn} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}}\text{、あるいは}\quad \underset{(m\times n)}{[\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n]} = \underset{(m\times n)}{[\mathbf{q}_1 \cdots \mathbf{q}_n]} \underset{(n\times n)}{\begin{bmatrix} r_{11} \cdots r_{1n} \\ \ddots \\ \mathbf{0} \quad r_{nn} \end{bmatrix}}$$

前半の式を完全形 full form、後半の式を簡約形 reduced form という。QR 分解に関する問題は、QR 分解計算法、QR 分解の応用問題、に大別できる。以下、簡単に説明しよう。

(I) QR 分解計算法　簡単のため、$\mathbf{A}$ が 3 次可逆行列の場合を考える（$m = n = 3$)。この場合の分解形は

(1)　$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}\mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \mathbf{q}_3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}r_{11} & r_{12} & r_{13}\\ 0 & r_{22} & r_{23}\\ 0 & 0 & r_{33}\end{bmatrix}\equiv\mathbf{QR}$　（$\mathbf{Q}^T\mathbf{Q}=\mathbf{I}$）

である。$\mathbf{A}$ は可逆行列としているから、$\mathbf{R}$ も可逆行列となり、従って $r_{ii}\neq 0\ (i=1,2,3)$ である。また、(1)式の最初の k 列を等置すれば（$k=1,2,3$）、

(2)　$\begin{bmatrix}\mathbf{a}_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{q}_1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}r_{11}\end{bmatrix}$、$\begin{bmatrix}\mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}r_{11} & r_{12}\\ 0 & r_{22}\end{bmatrix}$、$\begin{bmatrix}\mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \mathbf{q}_3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}r_{11} & r_{12} & r_{13}\\ 0 & r_{22} & r_{23}\\ 0 & 0 & r_{33}\end{bmatrix}$

すなわち、

$span\{\mathbf{a}_1\}=span\{\mathbf{q}_1\},\ span\{\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2\}=span\{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2\},\ span\{\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\mathbf{a}_3\}=span\{\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\mathbf{q}_3\}$

が成り立つ。これは QR 分解の特徴をよく表している。

　$\mathbf{Q},\mathbf{R}$ を定める方法は二つある。一つは、(1)において対応する列を等置し、$\mathbf{Q}$ の直交性 $\mathbf{Q}^T\mathbf{Q}=\mathbf{I}$、すなわち、$\mathbf{q}_i{}^T\mathbf{q}_j=\delta_{ij}$（$\delta_{ij}$ はクロネッカーのデルタ）を利用して $\mathbf{Q}$ の列 $\mathbf{q}_i$、$\mathbf{R}$ の成分 r_{ij} を順次定めていく<u>グラム・シュミット法</u> Gram-Schmitt process である。すなわち、(1)において対応する列を等置すれば

(3)　$\mathbf{a}_1=\mathbf{q}_1 r_{11}$、$\mathbf{a}_2=\mathbf{q}_1 r_{12}+\mathbf{q}_2 r_{22}$、$\mathbf{a}_3=\mathbf{q}_1 r_{13}+\mathbf{q}_2 r_{23}+\mathbf{q}_3 r_{33}$

対角成分 r_{ii} の符号には自由度があるので、$r_{ii}>0$ とした場合の計算順序を示すと以下の通りである（$\mathbf{x}^T\mathbf{y}=(\mathbf{x},\mathbf{y}),\ \sqrt{(\mathbf{x},\mathbf{x})}=\|\mathbf{x}\|$ と書く）：$r_{11}=\|\mathbf{a}_1\|\ \rightarrow\ \mathbf{q}_1=\mathbf{a}_1/r_{11}\ \rightarrow\ r_{12}=(\mathbf{q}_1,\mathbf{a}_2)\rightarrow$ $r_{22}=\|\mathbf{a}_2-\mathbf{q}_1 r_{12}\|\ \rightarrow\ r_{13}=(\mathbf{q}_1,\mathbf{a}_3)\ \rightarrow\ r_{23}=(\mathbf{q}_2,\mathbf{a}_3-\mathbf{q}_1 r_{13})$（$r_{23}=(\mathbf{q}_2,\mathbf{a}_3)$ としても同じだが、数値計算上はこの方がよい）$\rightarrow\ r_{33}=\|\mathbf{a}_3-\mathbf{q}_1 r_{13}-\mathbf{q}_2 r_{23}\|\ \rightarrow\ \mathbf{q}_3=(\mathbf{a}_3-\mathbf{q}_1 r_{13}-\mathbf{q}_2 r_{23})/r_{33}$

$\mathbf{A}$ が可逆であれば、計算途上において 0 による割算は発生しないことが知られている。

　QR 分解の第 2 の計算法は反射行列（ハウスホルダー行列）を用いる方法である。これは LAPACK、MATLAB などが採用している方法でもある。この場合鍵となるのは次の事実である（検算して頂きたい）：

(4)　$\mathbf{a},\mathbf{b}\in\mathbf{R}^{n\times 1},\ \mathbf{a}\neq\mathbf{b},\ \|\mathbf{a}\|=\|\mathbf{b}\|$ なら $\mathbf{Ha}=\mathbf{b}$、ここに $\mathbf{H}=\mathbf{I}-2\mathbf{cc}^T/\mathbf{c}^T\mathbf{c}\ (\mathbf{c}=\mathbf{a}-\mathbf{b})$

この型の行列を<u>反射行列</u>（または<u>ハウスホルダー行列</u>）reflection matrix(or Householder matrix)という。「$\mathbf{H}=\mathbf{H}^T,\ \mathbf{H}^2=\mathbf{I}$」が成立するから、$\mathbf{H}$ は実対称直交行列である。幾何学的には、$\mathbf{H}$ は部分空間（平面）$S:\mathbf{c}^T\mathbf{x}=0$ に関する反射を表す。すなわち、任意の $\mathbf{y}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ に対

して

$\frac{1}{2}(\mathbf{y}+\mathbf{H}\mathbf{y}) \in S$ （$\mathbf{y},\mathbf{H}\mathbf{y}$ の中点は S に属する）、

$\mathbf{c}^T\mathbf{x}=0$ なら $\mathbf{x}^T(\mathbf{y}-\mathbf{H}\mathbf{y})=0$ （$\mathbf{y},\mathbf{H}\mathbf{y}$ を結ぶ直線は S 内の各ベクトルに直交する）

が成り立つ。逆にこの 2 個の要請を満たす $\mathbf{H}$ は $\mathbf{H}=\mathbf{I}-2\mathbf{c}\mathbf{c}^T/\mathbf{c}^T\mathbf{c}$ の形であることを証明できる。

再び行列(1)を例にとると､反射行列を利用する QR 分解は次のようになる：$\mathbf{a}_1=\begin{bmatrix}a_{11} & 0 & 0\end{bmatrix}^T$ の場合は $\mathbf{H}_1=\mathbf{I}$ （$a_{11}>0$ の場合）、$-\mathbf{I}$ （$a_{11}<0$ の場合）とする。$\mathbf{a}_1=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{21} & a_{31}\end{bmatrix}^T$ 、$a_{21}{}^2+a_{31}{}^2>0$ の場合は、$\mathbf{b}_1=\begin{bmatrix}\|\mathbf{a}_1\| & 0 & 0\end{bmatrix}^T$ とすれば、$\mathbf{a}_1 \neq \mathbf{b}_1,\ \|\mathbf{a}_1\|=\|\mathbf{b}_1\|$ だから、(4)により $\mathbf{c}_1=\mathbf{a}_1-\mathbf{b}_1$ 、$\mathbf{H}_1=\mathbf{I}-2\mathbf{c}_1\mathbf{c}_1{}^T/\mathbf{c}_1{}^T\mathbf{c}_1$ とすれば、$\mathbf{H}_1\mathbf{a}_1=\mathbf{b}_1$ が成り立つ。これは積 $\mathbf{H}_1\mathbf{A}$ が次の形となることを示す：

$$\mathbf{H}_1\mathbf{A}=\begin{bmatrix}\mathbf{H}_1\mathbf{a}_1 & \mathbf{H}_1\mathbf{a}_2 & \mathbf{H}_1\mathbf{a}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}r_{11} & r_{12} & r_{13}\\ 0 & x & x\\ 0 & x & x\end{bmatrix}$$ （$r_{11}>0$ 、“x” 印は非零成分を表す）

つぎに、右下 2 x 2 行列に対して同様に（2 次）反射行列 $\mathbf{H}_2$ を計算し、$\mathbf{H}_2{}'=\begin{bmatrix}1 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_2\end{bmatrix}$ とすれば、$\mathbf{H}_2{}'\mathbf{H}_1\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}r_{11} & r_{12} & r_{13}\\ 0 & x & x\\ 0 & x & x\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}r_{11} & r_{12} & r_{13}\\ 0 & r_{22} & r_{23}\\ 0 & 0 & r_{33}\end{bmatrix}\equiv\mathbf{R}$ となる。これを $\mathbf{A}$ について解けば、QR 分解 $\mathbf{A}=\{\mathbf{H}_1{}^T(\mathbf{H}_2{}')^T\}\mathbf{R}\equiv\mathbf{Q}\mathbf{R}$ が得られる。ここに $\mathbf{H}_1,\mathbf{H}_2{}'$ は直交行列を表すから、$\mathbf{H}_1{}^T(\mathbf{H}_2{}')^T$ も直交行列を表す。

ここで分解の一意性に注意：実際、$\mathbf{A}=\mathbf{Q}_1\mathbf{R}_1=\mathbf{Q}_2\mathbf{R}_2$ （ただし、$\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2$ の対角成分はすべて正）なら $\mathbf{Q}_1=\mathbf{Q}_2,\ \mathbf{R}_1=\mathbf{R}_2$（$\because$ $\mathbf{A}$ の可逆性より、$\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2$ も可逆ゆえ、$\mathbf{Q}_2{}^T\mathbf{Q}_1=\mathbf{R}_2\mathbf{R}_1{}^{-1}$。左辺は直交行列、右辺は上三角行列。$\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2$ の対角成分はすべて正だから、これは

$\mathbf{Q}_2{}^T\mathbf{Q}_1 = \mathbf{R}_2\mathbf{R}_1{}^{-1} = \mathbf{I}$ を意味する)。

(II) QR 分解の応用例

(i) 行列方程式への応用　可逆行列 $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times m}$ の QR 分解 $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ が知られれば、行列方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$（$\mathbf{b} \in \mathbf{R}^{m\times 1}$）は $\mathbf{QRx} = \mathbf{b}$ となり、解 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{m\times 1}$ を求めるには三角行列方程式 $\mathbf{Rx} = \mathbf{Q}^T\mathbf{b}$ を解けばよい。これは精度上からは良法であるが、QR 分解は LDU 分解に比べて計算量が多くなる。

(ii) 最小自乗問題 $\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|$ ＝最小（$\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}, \mathbf{b} \in \mathbf{R}^{m\times 1}$ は既知、$\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{n\times 1}$ は未知、ふつう $m \gg n$）への応用：これは $\|\mathbf{Q}^T(\mathbf{Ax}-\mathbf{b})\| = \|\mathbf{Rx}-\mathbf{Q}^T\mathbf{b}\|$ ＝最小（∵ $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$）。$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{11} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$、

$\mathbf{Q}^T\mathbf{b} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}_2 \end{bmatrix}$（$\mathbf{c}_1 : n\times 1$)）と分割し、$\mathbf{R}_{11}$（$n\times n$ 上三角行列）が可逆行列なら、解は $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{11}{}^{-1}\mathbf{c}_1 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$、

最小値＝$\|\mathbf{c}_2\|$、となる。最小自乗問題は後述の特異値分解を利用しても解ける。

(iii)　QR 法（固有値問題解法）への応用。便宜上次節で説明する。

3.5　シュール分解

与えられた $\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{n\times n}$ に対して、$\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}$ が逆行列をもたないような複素数 λ の値を $\mathbf{A}$ の固有値 eigenvalue という。ゆえに、λ が $\mathbf{A}$ の固有値であるための必要十分条件は $\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}) = 0$ である（前節参照）。これを $\mathbf{A}$ の特性方程式 characteristic equation と呼ぶ。左辺（特性多項式 characteristic polynomial）を展開すると λ の n 次多項式となり、代数学の基本定理により、$\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}) = (\lambda_1-\lambda)\cdots(\lambda_n-\lambda)$ の形に因数分解できる。ここに $\lambda_1,\cdots,\lambda_n$ は（順序を無視すれば）$\mathbf{A}$ によって一意的に定まる。これらはすべて相異なるとは限らず、たとえ $\mathbf{A}$ が実行列であっても一般には複素数となる。ゆえに、n 次行列の固有値は重複するものを重複する回数（重複度）だけ数えることにすれば、ちょうど n 個存在することになる。固有値は $\mathbf{A}$ の性質を調べる上で重要な量である。

次の事実をシュール分解 Schur decomposition といい、線形代数における主要定理の一つを表す：「$\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{n\times n}$ の特性多項式を $\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}) = (\lambda_1-\lambda)(\lambda_2-\lambda)\cdots(\lambda_n-\lambda)$ とすれば、適当

なユニタリ行列 $\mathbf{U} \in \mathbf{C}^{n\times n}$ （$\mathbf{U}^* \equiv \overline{\mathbf{U}}^T = \mathbf{U}^{-1}$）に対して $\mathbf{U}^*\mathbf{AU}$ が次の形の上三角行列となる：

$$\mathbf{U}^*\mathbf{AU} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & x & x \cdots x \\ & \lambda_2 & x \cdots x \\ & & \ddots \quad x \\ \mathbf{O} & & \lambda_n \end{bmatrix} \equiv \mathbf{T} \quad \text{あるいは} \quad \mathbf{A} = \mathbf{U}\begin{bmatrix} \lambda_1 & x & x \cdots x \\ & \lambda_2 & x \cdots x \\ & & \ddots \quad x \\ \mathbf{O} & & \lambda_n \end{bmatrix}\mathbf{U}^* \equiv \mathbf{UTU}^*$$」

どの固有値を $\lambda_i\,(i=1,\cdots,n)$ と呼ぶかは任意だから、この式は $\mathbf{A}$ の固有値を任意の順に $\mathbf{T}$ の対角線上に並べられることをのべている。変換 $\mathbf{A} \to \mathbf{U}^*\mathbf{AU}$ を $\mathbf{A}$ の $\mathbf{U}$ によるユニタリ相似変換 unitary similarity transformation という。$\mathbf{A}$ のシュール分解が知られれば、その固有値は $\mathbf{T}$ の対角成分によって与えられる。

重要な特別の場合は $\mathbf{A}$ がエルミート行列 Hermitian matrix、すなわち、$\mathbf{A}^* = \mathbf{A}$、を満たす行列、の場合である。このとき上三角行列 $\mathbf{T}$ は対角行列でなければならず、$\lambda_1,\cdots,\lambda_n$ はすべて実数となる。これを対角化定理 diagonalization theorem と呼ぶ。

シュール分解は応用の広い定理である。以下に代表的な応用例をあげよう：

(i) 自由連成振動　弾性バネで結合されたいくつかの質点の自由連成振動を解析する問題は、定係数連立微分方程式 $d^2\mathbf{y}/dt^2 = \mathbf{Ay}$ を解く問題に還元される。ここに $\mathbf{y}$ の各成分は対応する質点の平衡位置からの変位のスカラー倍を表し、t は時間、$\mathbf{A}$ は t に依存しない実対称行列を表す。対角化定理により $\mathbf{A} = \mathbf{UDU}^T$（$\mathbf{U}$ は実直交行列、すなわち、$\mathbf{U}^T = \mathbf{U}^{-1}$、$\mathbf{D}$ は実対角行列）と分解し、$\mathbf{z} = \mathbf{U}^T\mathbf{y}$ とおけば、問題の微分方程式は $d^2\mathbf{z}/dt^2 = \mathbf{Dz}$ $(d^2 z_1/dt^2 = \lambda_1 z_1,\cdots)$ となり、$z_1(t),\cdots,z_n(t)$ を独立に解くことができる。結果的に各 λ_i は負の実数となるから、各 $z_i(t)$ は単振動を表す。

(ii) 固有値単調定理　対角化定理と 3.1 節でのべた次元定理「任意の部分空間 $\mathbf{S},\mathbf{T}$ に対して $\dim(\mathbf{S}\cap\mathbf{T}) = \dim\mathbf{S} + \dim\mathbf{T} - \dim(\mathbf{S}+\mathbf{T})$」を組み合わせると、$\mathbf{A}+\mathbf{B}=\mathbf{C}$ を満たすエルミート行列 $\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C}$ の対応する固有値間の関係が導出される。すなわち、

$\alpha_1 \le \cdots \le \alpha_n,\ \beta_1 \le \cdots \le \beta_n,\ \gamma_1 \le \cdots \le \gamma_n$ をそれぞれ n 次エルミート行列 $\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C}$ の固有値とすれば、$\alpha_i + \beta_1 \le \gamma_i \le \alpha_i + \beta_n \quad ,i=1,\cdots,n$。

この不等式は $\mathbf{A}$ が $\mathbf{B}$ だけ変動すれば、どの固有値も少なくとも $\mathbf{B}$ の最小固有値分だけ増加し、$\mathbf{B}$ の最大固有値分以上に増加することはないことを示す。これは一般の行列に対しては成り立たない事実である。

(iii) スペクトル写像定理（特別の場合）$f(\lambda)$ を λ の分数式 $p(\lambda)/q(\lambda)$（分子、分母はともに λ の多項式）、$q(\lambda_i)\ne 0(i=1,\cdots,n)$ とすれば、$f(\mathbf{A}) = p(\mathbf{A})q(\mathbf{A})^{-1} = \mathbf{U}f(\mathbf{T})\mathbf{U}^*$ となり、$f(\mathbf{T})$ は $f(\lambda_1),\cdots,f(\lambda_n)$ を対角成分とする上三角行列となるので、

$\det(f(\mathbf{A}) - \lambda I) = (f(\lambda_1)-\lambda)\cdots(f(\lambda_n)-\lambda)$。すなわち $f(\mathbf{A})$ の固有値は $f(\lambda_1),\cdots,f(\lambda_n)$ で

与えられる。

(iv)　ケーリー・ハミルトンの定理　$\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}) \equiv f(\lambda)$ とすれば $f(\mathbf{A})=\mathbf{0}$

実際、特性多項式の因数分解形 $\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})=(\lambda_1-\lambda)(\lambda_2-\lambda)\cdots(\lambda_n-\lambda)$ を用いると

$f(\mathbf{A})=(\lambda_1\mathbf{I}-\mathbf{A})\cdots(\lambda_n\mathbf{I}-\mathbf{A})=\mathbf{U}(\lambda_1\mathbf{I}-\mathbf{T})\cdots(\lambda_n\mathbf{I}-\mathbf{T})\mathbf{U}^*=\mathbf{0}$ （$\because\ \mathbf{A}=\mathbf{UTU}^*$）

(v)　一般固有ベクトルの完備性　　いま、μ を $\mathbf{A}$ の任意の固有値とすれば、$(\mathbf{A}-\mu\mathbf{I})\mathbf{x}=\mathbf{0}$（あるいは $\mathbf{Ax}=\mu\mathbf{x}$）を満たす $\mathbf{x}\neq\mathbf{0}$ が少なくとも一つ存在する。このような $\mathbf{x}$ を固有値 μ に対応する固有ベクトル eigenvector という。一般に、$(\mathbf{A}-\mu\mathbf{I})^{k-1}\mathbf{x}\neq\mathbf{0},\ (\mathbf{A}-\mu_1\mathbf{I})^k\mathbf{x}=\mathbf{0}$ を満たすような k の値（$1\leq k$）が存在すれば、$\mathbf{x}$ を固有値 μ に対応する k 階一般固有ベクトル generalized eigenvector of rank k という。ここに $(\mathbf{A}-\mu\mathbf{I})^0=\mathbf{I}$ と規約している。とくに１階一般固有ベクトルは固有ベクトルに他ならない。次の事実はジョルダン分解（後述）証明の出発点となる重要な事実を表す：「与えられた $\mathbf{A}\in\mathbf{C}^{n\times n}$ の異なる固有値を $\mu_1,\cdots,\mu_r$ とし、特性多項式の因数分解形を　$\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})=(\mu_1-\lambda)^{n_1}\cdots(\mu_r-\lambda)^{n_r}\ (n_1+\cdots+n_r=n)$ とすれば、μ_1 に対応する一般固有ベクトル n_1 個、・・・、μ_r に対応する一般固有ベクトル n_r 個、から構成される $\mathbf{C}^{n\times 1}$ の基底が存在し、どの一般固有ベクトルの階数も対応する固有値の重複度を超えない」

　シュール分解の標準的計算法は有名な QR 法である。$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{n\times n}$ を与えられた行列とすれば QR 法の原形（「シフトなし QR 法」）とは次の反復法を意味する：

$\mathbf{A}_0=\mathbf{A}$

$k=1,2,\cdots$ に対して、$\mathbf{A}_{k-1}=\mathbf{Q}_k\mathbf{R}_k$ （$\mathbf{A}_{k-1}$ を QR 分解）、$\mathbf{A}_k=\mathbf{R}_k\mathbf{Q}_k$ （逆順に乗じる）

すると　$(\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_k)(\mathbf{R}_k\cdots\mathbf{R}_1)=\mathbf{A}^k$（$\mathbf{A}^k$ の QR 分解）、$(\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_k)^T\mathbf{A}(\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_k)=\mathbf{A}_k$（$\mathbf{A}$ は $\mathbf{A}_k$ にユニタリ相似）。とくに、$\mathbf{A}$ を実対称行列、シュール分解を

$\mathbf{A}=\mathbf{UDU}^T$ （$\mathbf{D}=\begin{bmatrix}\lambda_1 & & \mathbf{0}\\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \lambda_n\end{bmatrix}$、$\mathbf{U}^T\mathbf{U}=\mathbf{I}$）、$|\lambda_1|>\cdots>|\lambda_n|$、$\mathbf{U}$ のすべての主座小行列は可逆、とすれば、$\mathbf{A}_k$ は $\mathbf{D}$ に収束し、$\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_k$ は $\mathbf{U}$ に収束することが知られている。収束速度の評価、算法の実際については行列算法専門書に譲る。

3.6 ジョルダン分解

　次の分解をジョルダン分解 Jordan decomposition という：任意の $\mathbf{A}\in\mathbf{C}^{n\times n}$ に対して可逆行列 $\mathbf{V}$ を適当に選ぶと $\mathbf{A}$ は次の形に分解できる：

(1)　$\mathbf{A} = \mathbf{VJV}^{-1}$

ここにジョルダン標準形 Jordan canonical or normal form $\mathbf{J}$ は次の形をもつブロック対角行列を表す：

(2)　$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{J}_1 & & \mathbf{O} \\ & \ddots & \\ \mathbf{O} & & \mathbf{J}_r \end{bmatrix}$

ここに、各ジョルダンブロック Jordan block or cell $\mathbf{J}_k\,(k=1,\cdots,r)$ は主対角成分がすべて同一値、その直上の対角線（上位対角線 super-diagonal）の成分値がすべて１、その他の成分がすべて０であるような（正方）上三角行列を表す。ゆえに、ジョルダンブロックの一般形は

(3)　1×1 の場合：$\begin{bmatrix} a \end{bmatrix}$　2×2 の場合：$\begin{bmatrix} a & 1 \\ 0 & a \end{bmatrix}$　3×3 の場合：$\begin{bmatrix} a & 1 & 0 \\ 0 & a & 1 \\ 0 & 0 & a \end{bmatrix}$、・・・

$\mathbf{J}_k\,(k=1,\cdots,r)$ が対角線上に並ぶ順序を問題にしなければ、$\mathbf{J}$ は $\mathbf{A}$ のみによって一意的に確定することが知られている。

ジョルダン標準形 $\mathbf{J}$ の形をブロック数によって分類すると：

(4)　ジョルダンブロック数が n の場合：$\mathbf{J}$ の形は　$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \lambda_n \end{bmatrix}$（対角行列）

この場合、$\mathbf{A}$ は対角化可能 diagonalizable であるという。

(5)　ジョルダンブロック数が１の場合：$\mathbf{J}$ の形は　$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 1 & \ddots & \mathbf{0} \\ & \ddots & 1 & \ddots \\ & & \ddots & 1 \\ \mathbf{0} & & & \lambda_1 \end{bmatrix}$（$n\times n$）

(6)　$\mathbf{J}$ の一般形：

$$
\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ \mathbf{0} & & & \lambda_1 \end{bmatrix} (= \mathbf{J}_1) & & & \mathbf{0} \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & (\mathbf{J}_r =) & \begin{bmatrix} \lambda_r & 1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ \mathbf{0} & & & \lambda_r \end{bmatrix} \end{bmatrix}
$$

この一般形より $\mathbf{A}$ の特性多項式は次式で与えられることがわかる：

(7)　$\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}) = \det(\mathbf{J}-\lambda\mathbf{I}) = (\lambda_1-\lambda)^{n_1}\cdots(\lambda_r-\lambda)^{n_r}$

ここに $n_1,\cdots,n_r$ は、それぞれ、ジョルダンブロック $\mathbf{J}_1,\cdots,\mathbf{J}_r$ の次数を表す。従って、$\mathbf{A}$ の固有値は $\lambda_1,\cdots,\lambda_1$（$n_1$ 個），$\cdots,\lambda_r,\cdots,\lambda_r$（$n_r$ 個）で与えられる（$n_1+\cdots+n_r=n$）。

ジョルダン分解は固有値問題の構造を完全に解明している。証明法は定理を“解凍”すれば出てくる。以下これについて簡単に説明しよう。

ジョルダン分解をほぐす最初の手続きは、分解形 $\mathbf{A}=\mathbf{VJV}^{-1}$ を $\mathbf{AV}=\mathbf{VJ}$ と書き直し、両辺の対応する列を等置することから始まる。

例１　$\mathbf{J}$ のジョルダンブロックが１個である場合

(8)　$\mathbf{A}=\mathbf{VJV}^{-1}=\mathbf{V}\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}\mathbf{V}^{-1},\quad \det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})=\det(\mathbf{J}-\lambda\mathbf{I})=(2-\lambda)^4$

$\mathbf{A}$ の固有値は $2,2,2,2$（4 重固有値）で与えられる。$\mathbf{V}$ を列に分割し、

(9)　$\mathbf{V}=[\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2,\mathbf{v}_3,\mathbf{v}_4],\ \mathbf{v}_1,\cdots\in\mathbf{C}^{4\times1}$

と書き、(8)を次の形に変形する：

(10)　$\mathbf{AV}=\mathbf{VJ}$ ：　$\mathbf{A}[\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2,\cdots,\mathbf{v}_6]=[\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2,\cdots,\mathbf{v}_6]\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$

両辺の対応する列を等置すると

(11)　$\mathbf{Av}_1=2\mathbf{v}_1,\ \mathbf{Av}_2=\mathbf{v}_1+2\mathbf{v}_2,\ \mathbf{Av}_3=\mathbf{v}_2+2\mathbf{v}_3,\ \mathbf{Av}_4=\mathbf{v}_3+2\mathbf{v}_4$

書き直して

(12)　$(\mathbf{A}-2\mathbf{I})\mathbf{v}_1=\mathbf{0},(\mathbf{A}-2\mathbf{I})\mathbf{v}_2=\mathbf{v}_1,(\mathbf{A}-2\mathbf{I})\mathbf{v}_3=\mathbf{v}_2,(\mathbf{A}-2\mathbf{I})\mathbf{v}_4=\mathbf{v}_3$

さらに書き直すと

(13)
$$\begin{aligned}&\mathbf{v}_3=(\mathbf{A}-2\mathbf{I})\mathbf{v}_4,\ \mathbf{v}_2=(\mathbf{A}-2\mathbf{I})\mathbf{v}_3=(\mathbf{A}-2\mathbf{I})^2\mathbf{v}_4,\\&\mathbf{v}_1=(\mathbf{A}-2\mathbf{I})\mathbf{v}_2=(\mathbf{A}-2\mathbf{I})^3\mathbf{v}_4,\ (\mathbf{A}-2\mathbf{I})\mathbf{v}_1=(\mathbf{A}-2\mathbf{I})^4\mathbf{v}_4=\mathbf{0}\end{aligned}$$

すなわち、$\mathbf{V}$の列は$\mathbf{v}_4$を始点とする鎖列 chain（塔 tower）と呼ばれる構造をなす：

(14)　$\mathbf{V}=\left[\mathbf{v}_1,\mathbf{v}_2,\mathbf{v}_3,\mathbf{v}_4\right]=\left[(\mathbf{A}-2\mathbf{I})^3\mathbf{v}_4,(\mathbf{A}-2\mathbf{I})^2\mathbf{v}_4,(\mathbf{A}-2\mathbf{I})\mathbf{v}_4,\mathbf{v}_4\right],\quad (\mathbf{A}-2\mathbf{I})^4\mathbf{v}_4=\mathbf{0}$

ゆえに、第k列$\mathbf{v}_k\,(k=1,2,3,4)$は次の関係を満たすことがわかる：

(15)　$(\mathbf{A}-2\mathbf{I})^k\mathbf{v}_k=\mathbf{0},\ (\mathbf{A}-2\mathbf{I})^{k-1}\mathbf{v}_k\neq\mathbf{0}\ (k=1,2,3,4)$

ゆえに、$\mathbf{v}_k$は固有値2に対応するk階一般固有ベクトルを表す（前節参照）。とくに、

(16)　$(\mathbf{A}-2\mathbf{I})\mathbf{v}_1=\mathbf{0},\ (\mathbf{A}-2\mathbf{I})^0\mathbf{v}_1=\mathbf{v}_1\neq\mathbf{0}$　（ただし、$(\mathbf{A}-2\mathbf{I})^0\equiv\mathbf{I}$）

であるから、$\mathbf{v}_1$は固有ベクトル（＝1階一般固有ベクトル）を表す。以上を表にまとめると次のようになる：

固有値	対応する一般固有ベクトル	階数
	$\mathbf{v}_1$	1
	$\mathbf{v}_2$	2
2	$\mathbf{v}_3$	3
	$\mathbf{v}_4$	4

例２　ジョルダンブロックが２個以上の場合

(17)
$$\mathbf{A}=\mathbf{V}\begin{bmatrix}\mathbf{J}_1&&&&\mathbf{0}\\&\mathbf{J}_2&&&\\&&\mathbf{J}_3&&\\&&&\mathbf{J}_4&\\\mathbf{0}&&&&\mathbf{J}_5\end{bmatrix}\mathbf{V}^{-1}\in\mathbf{C}^{10\times10},\ \mathbf{V}=\left[\mathbf{v}_1,\cdots,\mathbf{v}_{10}\right],\ \mathbf{v}_1=\mathbf{V}\text{の第1列},\cdots$$

$$\mathbf{J}_1=\left[2\right],\ \mathbf{J}_2=\begin{bmatrix}2&1\\0&2\end{bmatrix},\ \mathbf{J}_3=\left[3\right],\ \mathbf{J}_4=\begin{bmatrix}4&1\\0&4\end{bmatrix},\ \mathbf{J}_5=\begin{bmatrix}4&1&0&0\\0&4&1&0\\0&0&4&1\\0&0&0&4\end{bmatrix}$$

$\mathbf{A}$の固有値は$2,2,2,3,4,4,4,4,4,4$で与えられる。前例の方法を踏襲すれば次表が得られる：

固有値	対応する一般固有ベクトル	階数

2	$\mathbf{v}_1$	1
	$\mathbf{v}_2$	1
	$\mathbf{v}_3$	2
3	$\mathbf{v}_4$	1
4	$\mathbf{v}_5$	1
	$\mathbf{v}_6$	2
	$\mathbf{v}_7$	1
	$\mathbf{v}_8$	2
	$\mathbf{v}_9$	3
	$\mathbf{v}_{10}$	4

すでにのべたように、ジョルダン標準形はジョルダンブロックの配列順序を無視すれば一意的に定まる。これは次の事実から従うのである：

(18)　任意かつ特定の固有値 λ_1 に対応する k 次ジョルダンブロックの総数

$$= 2\dim N_k(\lambda_1) - \dim N_{k+1}(\lambda_1) - \dim N_{k-1}(\lambda_1) \quad (k = 1, 2, \cdots)$$

ここに $N_k(\lambda_1)$ は $(\mathbf{A} - \lambda_1\mathbf{I})^k \mathbf{x} = \mathbf{0}$ の解 $\mathbf{x} \in \mathbf{C}^{n\times 1}$ 全体のつくる部分空間、すなわち、

$(\mathbf{A} - \lambda_1\mathbf{I})^k$ の零空間を表す（ただし $N_0(\lambda_1) = \{\mathbf{0}\}$ と規約する)。$\dim N_k(\lambda_1)$ は k とともに単調増大するが、n を超えないことは明らかだから、k が一定数に達した後はすべて等しくなる。k 次ジョルダンブロックの総数を、$k = 1, 2, \cdots$ について和をとれば、それは固有値 λ_1 に対応するジョルダンブロックの総数を表すはずである。計算すれば

(19)　任意かつ特定の固有値 λ_1 に対応する、ジョルダンブロックの総数 $= \dim N_1(\lambda_1)$

$= \lambda_1$ に対応する、一次独立な固有ベクトルの総数

以上を振り返ると、「$\mathbf{J}$ を知るには、異なる固有値ごとに、対応する零空間 N_k（$k = 1, 2, \cdots$）の次元値のみを知れば十分であり、ジョルダン分解 $\mathbf{A} = \mathbf{VJV}^{-1}$ における $\mathbf{V}$ を知る必要はない」ことがわかる。

例 3 ジョルダン標準形計算例　$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$　（6 次上三角行列）

固有値は$2,\cdots,2$（6 重固有値）で与えられる。そこで$(\mathbf{A}-2\mathbf{I}),(\mathbf{A}-2\mathbf{I})^2,(\mathbf{A}-2\mathbf{I})^3,\cdots$を計算し、$(\mathbf{A}-2\mathbf{I})^k$の零空間$\equiv N_k$の次元$\dim N_k$ $(k=0,1,2,\cdots)$を計算すると、次表が得られる：

k	$\dim N_k$	k次ジョルダンブロックの総数$=2\dim N_k-\dim N_{k-1}-\dim N_{k+1}$
0	0	0
1	3	1　(=2 x 3 – 0 – 5)
2	5	1　(=2 x 5 – 3 – 6)
3	6	1　(=2 x 6 – 5 – 6)
4	6	0　(=2 x 6 – 6 – 6)
5	6	0　（$N_3,N_4,\cdots$以下はすべて全空間$\mathbf{C}^{6\times1}$に等しくなる）

以上の結果から$\mathbf{A}$のジョルダン標準形$\mathbf{J}$は 1,2,3 次ジョルダンブロック各 1 個から構成されることがわかる。すなわち、$\mathbf{J}$は次式で与えられる：

$$\mathbf{J}=\begin{bmatrix}2&0&0&0&0&0\\0&2&1&0&0&0\\0&0&2&0&0&0\\0&0&0&2&1&0\\0&0&0&0&2&1\\0&0&0&0&0&2\end{bmatrix}\ \blacksquare$$

ジョルダン分解の応用例：

(i)　関数$f(\mathbf{A})$の定義　複素変数λの関数$f(\lambda)$に対して、$\mathbf{A}\in\mathbf{C}^{n\times n}$の関数$f(\mathbf{A})$を次の要請を満たすように定義することを考える：$f(\lambda)$が整式（多項式）または分数式または収束半径無限大の冪級数である場合、$f(\mathbf{A})$とはλに$\mathbf{A}$を代入したものに等しくなること。例：

$f(\lambda)=\lambda^2-\lambda+2(=\lambda^2-\lambda+2\lambda^0)$なら$f(\mathbf{A})=\mathbf{A}^2-\mathbf{A}+2\mathbf{I}(=\mathbf{A}^2-\mathbf{A}+2\mathbf{A}^0)$

$f(\lambda)=(\lambda^2-\lambda+2)/(\lambda^3-1)$なら

$f(\mathbf{A})=(\mathbf{A}^2-\mathbf{A}+2\mathbf{I})(\mathbf{A}^3-\mathbf{I})^{-1}=(\mathbf{A}^3-\mathbf{I})^{-1}(\mathbf{A}^2-\mathbf{A}+2\mathbf{I})$　（$(\mathbf{A}^3-\mathbf{I})^{-1}$の存在を仮定）

$f(\lambda)=e^\lambda=1+\lambda+\lambda^2/2!+\lambda^3/3!+\cdots$なら$f(\mathbf{A})=e^{\mathbf{A}}=\mathbf{I}+\mathbf{A}+\mathbf{A}^2/2!+\mathbf{A}^3/3!+\cdots$

答えは有名なコーシーの積分公式$f(a)=\dfrac{1}{2\pi i}\oint\dfrac{f(\lambda)}{\lambda-a}d\lambda$において$\lambda$を$\mathbf{A}$で置き換えた式

(20)　$$f(\mathbf{A})=\frac{1}{2\pi i}\oint f(\lambda)(\lambda\mathbf{I}-\mathbf{A})^{-1}d\lambda$$

によって与えられる。ここに、$f(\lambda)$は考慮中の閉積分路を含む領域内で正則であり、$\mathbf{A}$のすべての固有値は閉積分路の内部に含まれるものとする。ここに、行列の積分とは成分ごとの積分と同じと定義する。証明はレッスン 10 に与えてある。

(ii) スペクトル写像定理 spectral mapping theorem　$\mathbf{A}\in\mathbf{C}^{n\times n}$の特性多項式を$\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})=(\lambda_1-\lambda)\cdots(\lambda_n-\lambda)$とすれば、$f(\mathbf{A})$の特性多項式は

$\det(f(\mathbf{A})-\lambda\mathbf{I})=(f(\lambda_1)-\lambda)\cdots(f(\lambda_n)-\lambda)$ によって与えられる。すなわち、$\mathbf{A}$ の固有値が $\lambda_1,\cdots,\lambda_n$ なら、$f(\mathbf{A})$ の固有値 $f(\lambda_1),\cdots f(\lambda_n)$ によって与えられる。ここに $f(\mathbf{A})$ の定義は直前のものとする。

例４　$\det(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I})=(\lambda_1-\lambda)\cdots(\lambda_n-\lambda)$ なら

$$\det(\mathbf{A}^2+\mathbf{I}-\lambda\mathbf{I})=(\lambda_1{}^2+1-\lambda)\cdots(\lambda_n{}^2+1-\lambda)$$

$$\det(\mathbf{A}^{-1}-\lambda\mathbf{I})=(\lambda_1{}^{-1}-\lambda)\cdots(\lambda_n{}^{-1}-\lambda)\quad(\lambda_i\neq 0,\ i=1,\cdots,n)$$

$$\det(e^{\mathbf{A}}-\lambda\mathbf{I})=(e^{\lambda_1}-\lambda)\cdots(e^{\lambda_n}-\lambda)\quad\blacksquare$$

ジョルダン分解の証明および上で定義した行列関数の証明はレッスン９‐10 に与えてある。

3.7　特異値分解

次の分解を特異値分解 singular value decomposition といい、実用性の高いものである：「$\mathbf{A}$ を与えられた $m\times n$ 複素行列（一般に $m\neq n$）、$\mathbf{U},\mathbf{V}$ は適当な m 次、n 次のユニタリ行列（$\mathbf{U}^*=\mathbf{U}^{-1},\mathbf{V}^*=\mathbf{V}^{-1}$）とすれば、$\mathbf{A}$ は次の形に分解できる：

(1)　$\mathbf{A}=\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^*$

ここに標準形 Σ は次の形の $m\times n$ 実行列を表す：

(2)　$\Sigma=\begin{bmatrix}\sigma_1 & & & \mathbf{0}\\ & \ddots & & \\ & & \sigma_r & \\ & & & \\ \mathbf{0} & & & \mathbf{0}\end{bmatrix}$、$\sigma_1\geq\cdots\geq\sigma_r>0$（左上 $r\times r$ 部は対角行列、その他は 0 成分）」

ここに、$\sigma_1,\cdots,\sigma_r,0,\cdots,0$（0 の個数は $\min\{m,n\}-r$）を $\mathbf{A}$ の特異値 singular value という。
$\mathbf{A}$ が実行列なら、$\mathbf{U},\mathbf{V}$ は実直交行列に取れる。」

特異値分解は同値分解の特別の場合であるから、r は $\mathbf{A}$ の階数に等しいことは明らかである。また、$\mathbf{A}\mathbf{A}^*=\mathbf{U}\Sigma^2\mathbf{U}^*$（$m\times m$ 行列）ゆえ、$\sigma_1{}^2,\cdots,\sigma_r{}^2,0,\cdots,0$（0 の個数は $m-r$）は $\mathbf{A}\mathbf{A}^*$ の固有値に等しく、$\mathbf{A}^*\mathbf{A}=\mathbf{V}\Sigma^2\mathbf{V}^*$（$n\times n$ 行列）ゆえ、$\sigma_1{}^2,\cdots,\sigma_r{}^2,0,\cdots,0$（0 の個数は $n-r$）は $\mathbf{A}^*\mathbf{A}$ の固有値に等しい。証明はレッスン 11 に与えてある。

この分解は、線形変換 $\mathbf{y}=\mathbf{A}\mathbf{x}\ (\mathbf{x}\in\mathbf{C}^{n\times 1},\mathbf{y}\in\mathbf{C}\in^{m\times 1})$ にユニタリ座標変換 $\mathbf{x}=\mathbf{V}\mathbf{x}',\mathbf{y}=\mathbf{U}\mathbf{y}'$ を施すと、$\mathbf{A}$ の振舞いが $\mathbf{y}'=\mathbf{U}^*\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{x}'=\Sigma\mathbf{x}'$（$\mathbf{U}^*\mathbf{A}\mathbf{V}=\Sigma$）に見えることをのべている。ユニタリ変換の重要性はベクトルの長さが不変に保たれる点にある。すなわち、ユニタリ性 $\mathbf{V}^*\mathbf{V}=\mathbf{I}_n,\ \mathbf{U}^*\mathbf{U}=\mathbf{I}_m$ により、$\mathbf{x}'^*\mathbf{x}'=(\mathbf{V}\mathbf{x})^*\mathbf{V}\mathbf{x}=\mathbf{x}^*\mathbf{V}^*\mathbf{V}\mathbf{x}=\mathbf{x}^*\mathbf{x}$、$\mathbf{y}'^*\mathbf{y}'=(\mathbf{U}\mathbf{y})^*\mathbf{U}\mathbf{y}=\mathbf{y}^*\mathbf{U}^*\mathbf{U}\mathbf{y}=\mathbf{y}^*\mathbf{y}$ が成り立つ。

特異値分解の応用例：

(i) 最小自乗問題$\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|^2=(\mathbf{Ax}-\mathbf{b})^T(\mathbf{Ax}-\mathbf{b})=$最小（$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n},\mathbf{b}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$は既知、$\mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$は未知、$m\gg n$）解法への応用。特異値分解$\mathbf{A}=\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T$を使うと、与えられた問題は

(3)　$\|\Sigma\mathbf{V}^T\mathbf{x}-\mathbf{U}^T\mathbf{b}\|^2$=最小

と同値であることがわかる。簡単のため$\mathbf{A}$の階数がnである場合を考えると、Σの形は

(4)　$\Sigma=\begin{bmatrix}\Sigma_1\\ \mathbf{0}\end{bmatrix},\ \Sigma_1=\begin{bmatrix}\sigma_1 & & \mathbf{0}\\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \sigma_n\end{bmatrix},\ \sigma_1\ge\cdots\ge\sigma_n>0$

となる。さらに$\mathbf{U}^T\mathbf{b}$を分割形

(5)　$\mathbf{U}^T\mathbf{b}=\begin{bmatrix}\mathbf{c}\\ \mathbf{d}\end{bmatrix},\ \mathbf{c}:n\times 1,\ \mathbf{d}:(m-n)\times 1$

に書くと、最小自乗問題の解と最小値は一意的に次式で与えられる：

(6)　解：　$\mathbf{x}=\Sigma_1^{-1}\mathbf{c}$、$\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|^2$の最小値$=\|\mathbf{d}\|^2$

(ii)　<u>条件数</u> condition number　$\mathbf{A}$をn次可逆行列、特異値を$\sigma_1\ge\cdots\ge\sigma_n(>0)$とする。2-演算子ノルム（後述）を採用すれば、$\|\mathbf{A}\|=\sigma_1,\ \|\mathbf{A}^{-1}\|=1/\sigma_n$が成立し、$\mathbf{A}$から非可逆行列までの最短距離は$\sigma_n$で与えられる。$\|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{A}^{-1}\|=\sigma_1/\sigma_n$を条件数といい、$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$型方程式の安定性解析における重要量を表す。詳しくはレッスン 11 参照。

特異値分解の（存在）証明はレッスン 11 に与えてある。

特異値分解の計算法については専門書に譲る。LAPACK に収められているのは QR 法によるものと qd 法によるものの２種である。また、次の論文は特異値分解計算法に関する最新の研究結果が報告されていて一読に値する：

相島健助、松尾宇泰、室田一雄、杉原正顕、特異値計算のための dqds 法と mdLVs 法の収束性について、日本応用数理学会論文誌 17、97 – 131 (2007)

3.8　CS 分解

この分解は 4 個のブロックに区分けされた直交行列の各ブロックを、(8 個ではなく）4 個の直交行列によって同時特異値分解するものである。実際、$\mathbf{Q}=\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12}\\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22}\end{bmatrix}=\left[\begin{array}{c|c}m\times k & m\times q\\ \hline p\times k & p\times q\end{array}\right]$を区分けされた実直交行列とすると（ここに$m+p=k+q$、$k,m,p,q$はまったく任意)、適当

な直交行列 $\mathbf{U}_1$（m 次)、$\mathbf{U}_2$（p 次)、$\mathbf{V}_1$（k 次)、$\mathbf{V}_2$（q 次）に対して次の分解が成立する：

$$
(1)\quad
\begin{array}{c}
\begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_2^T \end{bmatrix} \\
(m \quad p)
\end{array}
\begin{array}{c}
\begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12} \\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22} \end{bmatrix} \\
(k \quad q)
\end{array}
\begin{array}{c}
\begin{bmatrix} \mathbf{V}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2 \end{bmatrix} \\
(k \quad q)
\end{array}
=
\begin{array}{c}
\begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^T\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1 & \mathbf{U}_1^T\mathbf{Q}_{12}\mathbf{V}_2 \\ \mathbf{U}_2^T\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1 & \mathbf{U}_2^T\mathbf{Q}_{22}\mathbf{V}_2 \end{bmatrix} \\
(k \qquad\qquad q)
\end{array}
\begin{pmatrix} m \\ p \end{pmatrix}
$$

$$
=
\begin{array}{c}
\left[\begin{array}{ccc|ccc}
\mathrm{I} & & & 0_{\mathrm{S}}^T & & \\
 & \mathrm{C} & & & \mathrm{S} & \\
 & & 0_{\mathrm{c}} & & & \mathrm{I} \\
\hline
0_{\mathrm{S}} & & & \mathrm{I} & & \\
 & \mathrm{S} & & & \text{-C} & \\
 & & \mathrm{I} & & & 0_{\mathrm{C}}^T
\end{array}\right] \\
(\; r \quad s \quad k-r-s \quad p-k+r \quad s \quad m-r-s \;)
\end{array}
\begin{pmatrix} r \\ s \\ m-r-s \\ \hline p-k+r \\ s \\ k-r-s \end{pmatrix}
$$

ここに

$$
\mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_{r+1} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & c_{r+s} \end{bmatrix}, \mathbf{S} = \begin{bmatrix} s_{r+1} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & s_{r+s} \end{bmatrix}, 0 < c_i, s_i < 1,\ c_i^2 + s_i^2 = 1,\ i = r+1, \ldots, r+s
$$

であり、ブロック $\mathbf{I}, \mathbf{C}, \mathbf{S}, \mathbf{0}_{\mathrm{C}}, \mathbf{0}_{\mathrm{S}}$ の中には空ブロックとなるものもあり得る。これを CS 分解 CS decomposition といい、1981 年、次の論文上に発表された：

C. C. Paige and M. A. Saunders, Toward a generalized singular value decomposition, SIAM Numer. Anal. 18, 398 – 405 ,1981 参照)。

これより先、1977 年にこの分解の特別の場合が次の論文上に報告されている：

G. W. Stewart, On the perturbation of pseudo-inverses, projections and linear least square problems, SIAM Review 19, 634 – 661 (1977)

Paige-Saunders 型 CS 分解の特徴は、「標準形中のどれか一つのブロックの形がわかれば他のブロックの形も一意的に確定する」という点である。そして与えられた直交行列に全く任意の区分けを許している点が、この分解の含みと柔軟性の原点となっている。

CS 分解には面白い応用がある。その一例は $\mathbf{AB}^{-1}$（$\mathbf{A} : m \times n, \mathbf{B} : n \times n$）の特異値分解を $\mathbf{B}^{-1}$ を計算しないで行う例である (上記 Paige & saunders の論文参照)。すなわち、適当な m 次直交行列 $\mathbf{U}$ 、n 次直交行列 $\mathbf{V}$ 、n 次可逆行列 $\mathbf{X}$ をとれば

$\mathbf{U}^T\mathbf{AX}=\Sigma_{\mathbf{A}},\ \mathbf{V}^T\mathbf{BX}=\Sigma_{\mathbf{B}}$、ここに $\underset{(n)}{\Sigma_{\mathbf{A}}}=\underset{(s\ \ n-s)}{\begin{bmatrix}\mathbf{C} & \\ & \mathbf{0}\end{bmatrix}}\begin{pmatrix}s\\ m-s\end{pmatrix},\ \underset{(n)}{\Sigma_{\mathbf{B}}}=\underset{(s\ \ n-s)}{\begin{bmatrix}\mathbf{S} & \\ & \mathbf{I}_{n-s}\end{bmatrix}}\begin{pmatrix}s\\ n-s\end{pmatrix}$

これら $\mathbf{U},\mathbf{V},\mathbf{X},\ \Sigma_{\mathbf{A}},\Sigma_{\mathbf{B}}$ がどこから来るかについては下記。この 2 式から $\mathbf{X}$ を消去して得られる式 $\mathbf{U}^T(\mathbf{AB}^{-1})\mathbf{V}=\Sigma_{\mathbf{A}}\Sigma_{\mathbf{B}}{}^{-1}$ が $\mathbf{AB}^{-1}$ の特異値分解計算式を表す。$\mathbf{U},\mathbf{V},\mathbf{X},\ \Sigma_{\mathbf{A}},\Sigma_{\mathbf{B}}$ の由来を説明しよう。$\begin{bmatrix}\mathbf{A}\\ \mathbf{B}\end{bmatrix}$ を特異値分解し、$\mathbf{P}^T\begin{bmatrix}\mathbf{A}\\ \mathbf{B}\end{bmatrix}\mathbf{Q}=\begin{bmatrix}\mathbf{R}\\ \mathbf{0}\end{bmatrix}$ とする（$\mathbf{P},\mathbf{Q}$ は $m+n$ 次、n 次直交行列、$\mathbf{R}$ は n 次可逆対角行列）。つぎに左辺の直交行列 $\mathbf{P}$ を $\mathbf{P}\equiv\begin{bmatrix}\mathbf{P}_{11} & \mathbf{P}_{12}\\ \mathbf{P}_{21} & \mathbf{P}_{22}\end{bmatrix}$ と区分けし

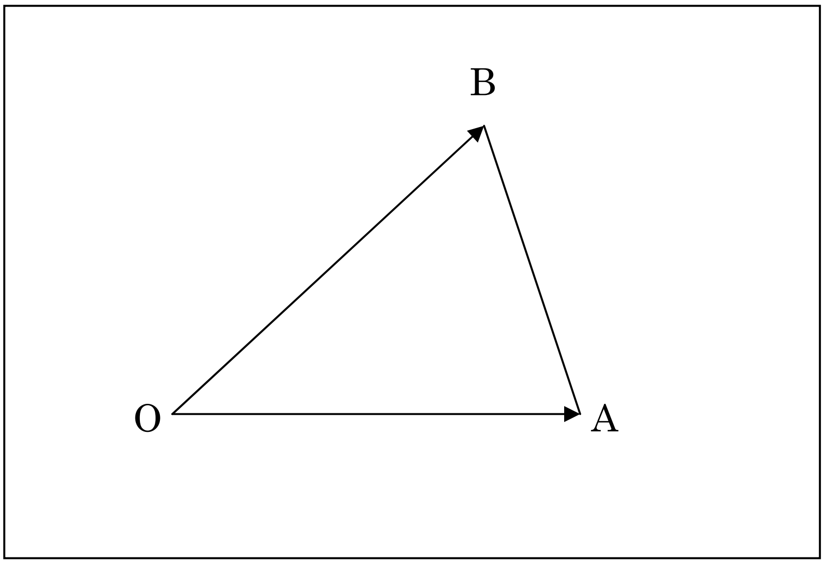
（$\mathbf{P}_{11}:m\times n,\mathbf{P}_{21}:n\times n$）、左列を CS 分解する：$\begin{bmatrix}\mathbf{U}^T & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{V}^T\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{P}_{11}\\ \mathbf{P}_{21}\end{bmatrix}\mathbf{W}=\begin{bmatrix}\Sigma_{\mathbf{A}}\\ \Sigma_{\mathbf{B}}\end{bmatrix}$。すなわち、$\Sigma_{\mathbf{A}},\Sigma_{\mathbf{B}}$ は $\mathbf{P}_{11},\mathbf{P}_{21}$ の特異値分解形であって、$\mathbf{A},\mathbf{B}$ の特異値分解形ではない。この点がおもしろい。また、

$\mathbf{X}=\mathbf{QR}^{-1}\mathbf{W}$ である。

CS 分解の応用は、以上のほか、部分空間単位で定式化された問題（例えば、与えられた二つの部分空間間の距離）を出すのにも使えることが知られている。詳しくはレッスン 12 において解説する。

3.9 内積

内積の考えは余弦定理の巧みな読み替えを一般化したもので、一種の角度と距離の代替品である。まずこれについて説明しよう。通常の 3 次元空間内の任意の平面上に任意の 3 点 O,A,B をとる（下図）：



すると次の余弦定理が成立する：

(1) $\overline{AB}^2 = \overline{OA}^2 + \overline{OB}^2 - 2 \cdot \overline{OA} \cdot \overline{OB} \cdot \cos\angle AOB$

いまOを原点とする直交座標系を導入し、点A, Bの座標をそれぞれ(a_1, a_2, a_3), (b_1, b_2, b_3)とすると、

(2) $\overline{AB}^2 = (a_1 - b_1)^2 + (a_2 - b_2)^2 + (a_3 - b_3)^2$,　$\overline{OA}^2 = {a_1}^2 + {a_2}^2 + {a_3}^2$, $\overline{OB}^2 = {b_1}^2 + {b_2}^2 + {b_3}^2$

であるから、これを(1)式に代入すれば次式が得られる：

(3) $a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 = \overline{OA} \cdot \overline{OB} \cos\theta$ $(\theta = \angle AOB)$

この数を矢線ベクトル$\overrightarrow{OA}$, $\overrightarrow{OB}$の内積 inner product といい$(\overrightarrow{OA}, \overrightarrow{OB})$で表す。すなわち、

(4) $(\overrightarrow{OA}, \overrightarrow{OB}) = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 = \overline{OA} \cdot \overline{OB} \cos\theta$ $(\theta = \angle AOB)$

$\overrightarrow{OA} = \mathbf{a}$, $\overrightarrow{OB} = \mathbf{b}$, $\|\mathbf{a}\| \equiv \sqrt{(\mathbf{a}, \mathbf{a})} = \sqrt{{a_1}^2 + {a_2}^2 + {a_3}^2}$ （＝$\mathbf{a}$の長さ）などと書けば

(5) $\mathbf{a}, \mathbf{b}$の内積＝$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 = \|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{b}\| \cdot \cos\theta$

とくに

(6) $\mathbf{a} = \mathbf{b}$なら　$(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = \|\mathbf{a}\|^2$ ＝$\mathbf{a}$の長さの自乗、

(7) $(\mathbf{a},\mathbf{b})/(\|\mathbf{a}\|\cdot\|\mathbf{b}\|)=\cos\theta$　（θ＝$\mathbf{a},\mathbf{b}$ 間の角、$\mathbf{a},\mathbf{b}\neq\mathbf{0}$）

(8)　$(\mathbf{a},\mathbf{b})=0\Leftrightarrow\mathbf{a}\perp\mathbf{b}$（直交）

式(6)-(8)は内積が距離と角度にどう関係するかを示している。

　内積を一般の実ベクトル空間に拡張する場合は内積の次の性質だけを使う：

(実 a) $(\mathbf{a},\mathbf{b})$ はスカラー（実数）である

(実 b) $(\mathbf{a},\beta\mathbf{b}+\gamma\mathbf{c})=\beta(\mathbf{a},\mathbf{b})+\gamma(\mathbf{a},\mathbf{c})$（$\alpha,\beta$ は任意の実数）

(実 c) $(\mathbf{a},\mathbf{b})=(\mathbf{b},\mathbf{a})$

(実 d)　$\|\mathbf{a}\|^2\equiv(\mathbf{a},\mathbf{a})\geq 0;\ (\mathbf{a},\mathbf{a})=0\Leftrightarrow\mathbf{a}=0$

ここに、$\|\mathbf{a}\|=\sqrt{(\mathbf{a},\mathbf{a})}$ を $\mathbf{a}$ の<u>ノルム norm</u> という。

　複素ベクトル空間上の内積に対しては上の定義を次のように修正する：

(複 a)　$(\mathbf{a},\mathbf{b})$ はスカラー（複素数）である

(実・複共通 b) $(\mathbf{a},\beta\mathbf{b}+\gamma\mathbf{c})=\beta(\mathbf{a},\mathbf{b})+\gamma(\mathbf{a},\mathbf{c})$（$\beta,\gamma$ は任意の複素数）

(複 c) $(\mathbf{a},\mathbf{b})=\overline{(\mathbf{b},\mathbf{a})}$（＝$(\mathbf{b},\mathbf{a})$ の共役複素数）

(実・複共通 d)　$\|\mathbf{a}\|^2\equiv(\mathbf{a},\mathbf{a})\geq 0;\ (\mathbf{a},\mathbf{a})=0\Leftrightarrow\mathbf{a}=0$

注意：上でのべた(実・複共通 b)の代わりに「$(\beta\mathbf{b}+\gamma\mathbf{c},\mathbf{a})=\beta(\mathbf{b},\mathbf{a})+\gamma(\mathbf{c},\mathbf{a})$」を採用する著者が多いが、数学的には同値である。このコンテンツでは、$\mathbf{C}^{m\times 1}$ 上の内積 $(\mathbf{a},\mathbf{b})=\mathbf{a}^*\mathbf{b}$ を考える場合の利便性を考慮し、ここではあえて上の(実・複共通 b)を採用する。

例１　$\mathbf{R}^{m\times 1}$ 上の内積の例：

(9) $\mathbf{a}=[a_1,\cdots,a_m]^T,\mathbf{b}=[b_1,\cdots,b_m]^T$ に対して　$(\mathbf{a},\mathbf{b})=a_1b_1+\cdots+a_mb_m=\mathbf{a}^T\mathbf{b}$

(10) $\mathbf{a}=[a_1,\cdots,a_m]^T,\mathbf{b}=[b_1,\cdots,b_m]^T$ に対して $(\mathbf{a},\mathbf{b})=\mathbf{a}^T\mathbf{P}\mathbf{b}$、ここに $\mathbf{P}$ は実<u>正定値行列 positive-definite matrix</u>、すなわち、任意の $\mathbf{a}=[a_1,\cdots,a_m]^T$ に対して $\mathbf{a}^T\mathbf{P}\mathbf{a}\geq 0$ かつ $\mathbf{a}^T\mathbf{P}\mathbf{a}=0\Leftrightarrow\mathbf{a}=\mathbf{0}$ を満たすような実対称行列をいう。$\mathbf{R}^{m\times 1}$ 上の内積はこの形のもので尽くされることがわかっている。■

例２　$\mathbf{C}^{m\times 1}$ 上の内積の例：

(11)　$\mathbf{a}=[a_1,\cdots,a_m]^T,\mathbf{b}=[b_1,\cdots,b_m]^T$ に対して　$(\mathbf{a},\mathbf{b})=\overline{a_1}b_1+\cdots+\overline{a_m}b_m=\mathbf{a}^*\mathbf{b}$

(12) $\mathbf{a}=[a_1,\cdots,a_m]^T,\mathbf{b}=[b_1,\cdots,b_m]^T$ に対して　$(\mathbf{a},\mathbf{b})=\mathbf{a}^*\mathbf{P}\mathbf{b}$、

ここに $\mathbf{P}$ は複素正定値行列 positive-definite matrix、すなわち、任意の $\mathbf{a}=[a_1,\cdots,a_m]^T$ に対して $\mathbf{a}^*\mathbf{P}\mathbf{a}\ge 0$ かつ $\mathbf{a}^*\mathbf{P}\mathbf{a}=0 \Leftrightarrow \mathbf{a}=\mathbf{0}$ を満たすようなエルミート行列（$\mathbf{P}^*=\mathbf{P}$）をいう。$\mathbf{C}^{m\times1}$ 上の内積はこの形のもので尽くされることが知られている。■

内積の定義されたベクトル空間を内積空間 inner product space という。実内積空間、複素内積空間共通に次式が成り立つ（証明はレッスン 13 で行う）：

(13) $|(\mathbf{a},\mathbf{b})|\le\|\mathbf{a}\|\cdot\|\mathbf{b}\|$ （コーシー・シュワルツの不等式）

(14) $\|\mathbf{a}+\mathbf{b}\|^2+\|\mathbf{a}-\mathbf{b}\|^2=2(\|\mathbf{a}\|^2+\|\mathbf{b}\|^2)$ （平行四辺形の法則）

(15) $|\,\|\mathbf{a}\|-\|\mathbf{b}\|\,|\le\|\mathbf{a}+\mathbf{b}\|\le\|\mathbf{a}\|+\|\mathbf{b}\|$ 　（三角不等式）

これらの事実により、ノルムは次の 3 性質を満たすことがわかる：

(16) $\|\mathbf{a}\|\ge 0;\ \|\mathbf{a}\|=0\Leftrightarrow \mathbf{a}=0$

(17) $\|\lambda\mathbf{a}\|=|\lambda|\|\mathbf{a}\|$ （λ は任意のスカラー）

(18) 三角不等式 $\|\mathbf{a}+\mathbf{b}\|\le\|\mathbf{a}\|+\|\mathbf{b}\|$

また、次式に見られるように、内積はノルムによって表現できることに注意する：

(19) 実内積空間の場合：　$\|\mathbf{a}+\mathbf{b}\|^2-\|\mathbf{a}-\mathbf{b}\|^2=4(\mathbf{a},\mathbf{b})$

(20) 複素内積空間の場合：$\|\mathbf{a}+\mathbf{b}\|^2-\|\mathbf{a}-\mathbf{b}\|^2+i\|i\mathbf{a}+\mathbf{b}\|^2-i\|i\mathbf{a}-\mathbf{b}\|^2=4(\mathbf{a},\mathbf{b})$

が成り立つ。

内積空間はなぜ有用か？簡単に言えば正規直交基底 orthonormal basis の存在性に尽きる。内積空間内のベクトル $\mathbf{a}_1,\cdots,\mathbf{a}_k$ が正規直交系 orthonormal system をなすとは

(21) $(\mathbf{a}_i,\mathbf{a}_j)=\delta_{ij}\ (i,j=1,\cdots,k)$ （クロネッカーのデルタ）

が成立することをいう。これが基底をなす場合に正規直交基底 orthonormal basis という。正規直交系に属する各ベクトルのノルムは 1 に等しいことに注意：$\|\mathbf{a}_i\|=1(i=1,\cdots,k)$。

とくに、$\mathbf{R}^{n\times1}$ 上の内積 $(\mathbf{a},\mathbf{b})=\mathbf{a}^T\mathbf{b}$ に対しては、$\mathbf{a}_1,\cdots,\mathbf{a}_n$ の正規直交性は、$\mathbf{A}=\left[\mathbf{a}_1\cdots\mathbf{a}_n\right]$ の直交性 $\mathbf{A}^T\mathbf{A}=\mathbf{I}$ と同値となる。

正規直交基底の有用性は次の事実から由来する：$\mathbf{a}_1,\cdots,\mathbf{a}_n$ を正規直交基底、$\mathbf{b}$ を任意のベ

クトルとすれば

(22)　$\mathbf{b}=(\mathbf{a}_1,\mathbf{b})\mathbf{a}_1+\cdots(\mathbf{a}_n,\mathbf{b})\mathbf{a}_n$

すなわち、任意のベクトルの正規直交基底による展開形はきわめて簡単な表現をとる。実際、$\mathbf{b}=x_1\mathbf{a}_1+\cdots+x_n\mathbf{a}_n$ と書き、$\mathbf{a}_i$ との内積をとれば、$(\mathbf{a}_i,\mathbf{b})=x_1(\mathbf{a}_i,\mathbf{a}_1)+\cdots+x_n(\mathbf{a}_i,\mathbf{a}_n)=x_i$ となる（$i=1,\cdots,n$）。

有限次元内積空間は必ず正規直交基底をもつ。これは QR 分解からの直接の結果である。

3.10 ノルムと収束

この節ではこれ以降のレッスンで時折必要となる、解析学からの基礎事項を要約しよう。

実数の代数的性質（四則演算則）は体という言葉で表現されることはすでにのべた。これとは別に、実数の間には大小関係 order が定義されている。実数はさらに、有理数体にはない、完備性 completeness をもつ。まずはその説明から始めよう。

実数の集合 $S\ (\neq\phi)$ が上に有界 bounded above であるとは、実数 u を十分大きくとれば各 $s\in S$ に対して $s\leq u$ が成り立つことをいい、u を S の一つの上界 upper bound という。S が下に有界 bounded below であるとは、実数 l を十分小さくとれば、各 $s\in S$ に対して $l\leq s$ が成り立つことをいい、l を S の一つの下界 lower bound という。上にも下にも有界な集合は単に有界 bounded であるという。

u_0 が S の上限 supremum or least upper bound であるとは S の最小上界であることをいう、すなわち、(1) u_0 は S の上界である、(2)任意の $\varepsilon>0$ に対して $u_0-\varepsilon$ は S の上界ではない（$u_0-\varepsilon<s$ を満たす実数 $s\in S$ が少なくとも一つとれる）、の 2 条件が満足されること、をいう。同様に、l_0 が S の下限 infimum or greatest lower bound であるとは S の最大下界であることをいう、すなわち、(1) l_0 は S の下界である、(2)任意の $\varepsilon>0$ に対して $l_0+\varepsilon$ は S の下界ではない（$s<l_0+\varepsilon$ を満たす実数 $s\in S$ が少なくとも一つとれる）、の 2 条件が満足されること、をいう。S の上限を $\sup S$ または $\mathrm{lub}\,S$ と書き、下限を $\inf S$ または $\mathrm{glb}\,S$ と書く。$\sup S\in S$ の場合は $\sup S$ を $\max S$、$\inf S\in S$ の場合は $\inf S$ を $\min S$ と書く。

例 1　$S=[0,1)$（$0\leq x<1$ を満たす実数 x 全体）なら、$\inf S=\min S=0,\ \sup S=1$。また、1は S に属さないから、$\max S$ は存在しない。■

実数の（無限）列 $\{a_n\}\equiv\{a_1,a_2,\cdots\}$ が a に収束するとは項 $a_1,a_2,\cdots$ が限りなく a に近づくことをいう：任意の $\varepsilon>0$ が与えられたとき、$n\geq n(\varepsilon)$ ならかならず $|a_n-a|\leq\varepsilon$ が成り立つような自然数 $n(\varepsilon)$ がとれること。このとき、a をその列の極限値という。記号では $\lim_{n\to\infty}a_n=a$ または $a_n\to a\ (n\to\infty)$ と書く（“$n\to\infty$”は省略することもある）。極限値は存在すれば一つしかない。以上の定義は $|a_n-a|\to 0$ と同値であることに注意。列 $\{a_n\}\equiv\{a_1,a_2,\cdots\}$ の部分列とは項をとびとびにとったもの、すなわち、$a_{n_1},a_{n_2},\cdots$ 型の無限列をいう（$n_1<n_2<\cdots\to\infty$）。

列$\{a_n\} \equiv \{a_1, a_2, \cdots\}$が<u>コーシー列</u>であるとは$|a_m - a_n| \to 0\ (m, n \to \infty)$が満たされることをいう。すなわち、任意の$\varepsilon > 0$が与えられたとき、$n(\varepsilon)$を十分大きくとれば、すべての$m, n \geq n(\varepsilon)$に対して$|a_m - a_n| \leq \varepsilon$が成立すること、をいう。

以上で実数の完備性を説明する準備が整った。

実数の完備性とは次の互いに同値な性質をいう（同値性の証明は省略）：

(a) コーシー列はかならず収束する

(b) 有界列（有界な無限列）はかならず収束する部分列をもつ

(c) 上に有界な集合はかならず上限をもち、下に有界な集合はかならず下限をもつ

例２　上に有界な単調増大列（$a_1 \leq a_2 \leq \cdots \leq$定数）はその上限に収束する。下に有界な単調減少列（定数$\leq \cdots \leq a_2 \leq a_1$）は下限に収束する（証明略）。■

コーシー列はその列に関するデータだけからそうかどうかを判断できる。これに対して収束の定義は特定の実数が極限値かどうかをテストする形であるから、収束するかどうかの判定手段としては無力である。この観点から「コーシー列はかならず収束する」が貴重な性質であることがわかる。

複素数全体も四則演算に関して体をなすが、複素数間の大小関係はない。しかし上の性質のうちの最初の二つが成立し互いに同値である。

すなわち、複素数の完備性は次の互いに同値な性質をいう：

(a) コーシー列はかならず収束する

(b) 有界列（有界な無限列）はかならず収束する部分列をもつ

この場合、実数列の収束の定義をそのままの形で複素数列の収束の定義として採用するものとし、絶対値は複素数の絶対値と解釈するものとする。

線形代数では有限次元ノルム空間の完備性も知っている必要があるので、これについてのべよう。その前にノルム空間の定義を行う。実または複素ベクトル空間X上に次の公理を満たす実関数$\|\cdot\|$が定義されているとき、これをX上の<u>ノルム norm</u>といい、Xを<u>ノルム空間 normed space</u>という（以下$\mathbf{a}, \mathbf{b} \in X$、$\alpha$はスカラー）：

(a) $\|\mathbf{a}\| \geq 0;\ \|\mathbf{a}\| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{a} = \mathbf{0}$

(b) $\|\alpha\mathbf{a}\| = |\alpha|\|\mathbf{a}\|$

(c) 三角不等式：$\|\mathbf{a}+\mathbf{b}\| \leq \|\mathbf{a}\| + \|\mathbf{b}\|$　（これから$\big|\|\mathbf{a}\| - \|\mathbf{b}\|\big| \leq \|\mathbf{a} \pm \mathbf{b}\|$もいえる。）

前節で見たように、内積から発生するノルム$\|\mathbf{a}\| = \sqrt{(\mathbf{a}, \mathbf{a})}$はその内積空間上のノルムを表

す。一般に与えられたベクトル空間上には無数のノルムが存在する。

例３　$\mathbf{R}^{n\times 1}$ 上のノルムの例：任意の実数 $p \geq 1$ に対して $\|\mathbf{x}\|_p \equiv (|x_1|^p + \cdots + |x_n|^p)^{1/p}$

（$\mathbf{x} = [x_1 \cdots x_n]^T$）は $\mathbf{R}^{n\times 1}$ 上のノルムを表す（証明略)。とくに $\|\mathbf{x}\|_p \to \max|x_i| \equiv \|\mathbf{x}\|_\infty$　■

以上の実数、複素数の完備性から有限次元ノルム空間に関する次の基礎的な事実が出る。（証明はレッスン 14 で行う）：

(1)　有限次元ノルム空間の完備性　２通りの同値ないい方がある：

(a) コーシー列はかならず収束する

(b) 有界列（有界な無限ベクトル列）はかならず収束する部分列をもつ

ただし、$\mathbf{a}_n \to \mathbf{a}$ とは $\|\mathbf{a}_n - \mathbf{a}\| \to 0$、$\{\mathbf{a}_n\}$ がコーシー列であるとは $\|\mathbf{a}_m - \mathbf{a}_n\| \to 0\ (m, n \to \infty)$

であることをいう。また $\{\mathbf{a}_n\}$ が有界であるとは $\|\mathbf{a}_n\| \leq \alpha\ (n = 1, 2, \cdots)$ を満たす正数 α が存在することをいう。

(2)　（ノルムの同値性）　同じノルム空間 $\mathbf{X}$ 上で定義された 2 種のノルム $\|\cdot\|_1, \|\cdot\|_2$ は次の意味で同値である：すべての $\mathbf{x} \in \mathbf{X}$ に対して不等式 $\alpha\|\mathbf{x}\|_1 \leq \|\mathbf{x}\|_2 \leq \beta\|\mathbf{x}\|_1$ を共通的に成立させる定数 $\alpha, \beta > 0$ が存在する。ゆえに、与えられたベクトル列が、一つのノルムに関して収束すれば他のどんなノルムに関しても収束する。すなわち、$\|\mathbf{a}_n - \mathbf{a}\| \to 0$ なら他のどんなノルム $\|\cdot\|'$ に関しても $\|\mathbf{a}_n - \mathbf{a}\|' \to 0$。

(3) n 次元ノルム空間内に任意基底 $\{\mathbf{b}_1, \cdots, \mathbf{b}_n\}$ を一つとり、与えられたベクトル列 $\{\mathbf{a}_k\}$ の各項を $\mathbf{a}_k = a_k^{(1)}\mathbf{b}_1 + \cdots + a_k^{(n)}\mathbf{b}_n$ と展開すれば、ノルムに関する収束 $\|\mathbf{a}_n - \mathbf{a}\| \to 0$ と座標（成分）ごとの収束 $|a_k^{(1)} - a^{(1)}| \to 0, \cdots, |a_k^{(n)} - a^{(n)}| \to 0\ (k \to \infty)$ とは同値となる。

3.11 演算子ノルム

実 $m\times n$ 行列の場合を例にとって説明しよう。実 $m\times n$ 行列全体 $\mathbf{R}^{m\times n}$ は次元 mn の実ベクトル空間を表す。そして任意の $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ に $\mathbf{y} = f_\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{A}\mathbf{x}$

$(\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{n\times 1}, \mathbf{A}\mathbf{x} \in \mathbf{R}^{m\times 1})$ で定義される $\mathbf{R}^{n\times 1}$ から $\mathbf{R}^{m\times 1}$ への線形変換が対応する。この意味で $\mathbf{A}$ を $\mathbf{R}^{m\times n}$ 上の<u>演算子</u>（<u>作用素</u>）operator という。演算子としての $\mathbf{A}$ の性質を調べるにはもともと

定義されている $\mathbf{x}$ のノルム（$\mathbf{R}^{n\times 1}$ 上のノルム）と $\mathbf{y}(=\mathbf{Ax})$ のノルム（$\mathbf{R}^{m\times 1}$ 上のノルム）を関連付けて定義するのが便利であろう。この目的に合う $\mathbf{A}$ のノルム（$\mathbf{R}^{m\times n}$ 上のノルム）が、次式で定義される<u>演算子ノルム</u> operator norm である：

(a) 演算子ノルム：$\|\mathbf{A}\| = \sup\{\|\mathbf{Ax}\| : \|\mathbf{x}\| = 1\}$

この値が常に有限の値（実数値）として一意的に確定し、しかも上限が実際に（最大値として）実現されること、すなわち、$\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{Ax}_0\|$ かつ $\|\mathbf{x}_0\| = 1$ を満たす $\mathbf{x}_0 \in \mathbf{R}^{n\times 1}$ が存在すること、を証明できる（レッスン 14 参照）。それゆえ、演算子ノルムは次式のように書いてもよい：

(b) 演算子ノルム：$\|\mathbf{A}\| = \max\{\|\mathbf{Ax}\| : \|\mathbf{x}\| = 1\}$

以上の定義によれば、「単位行列の演算子ノルムはかならず1に等しい」ことになる。とくに、列ベクトル $\mathbf{a} = \left[a_1 \cdots a_n\right]^T$ の演算子ノルムは $\|\mathbf{a}\|_{op} = \max\{\|\mathbf{a}\left[x\right]\|_{vec} : |x| = 1\} = \|\mathbf{a}\|_{vec}$ であると定義すれば、$\mathbf{a}$ のベクトルノルムと演算子ノルムは一致する。ここに $\|\mathbf{a}\|_{vec}$ は与えられたベクトルノルムとする。

演算子ノルムの定義から一般に次の不等式が成立することがわかる：

(c) $\|\mathbf{Ax}\| \le \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{x}\|$

さらに積の演算子ノルムに対して一般に

(d) $\|\mathbf{AB}\| \le \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{B}\| \quad (\mathbf{A} : m\times n,\ \mathbf{B} : n\times p,\ \mathbf{AB} : m\times p)$

が成り立つ。ここに $\|\mathbf{AB}\|, \|\mathbf{A}\|, \|\mathbf{B}\|$ は $\mathbf{R}^{m\times 1}, \mathbf{R}^{n\times 1}, \mathbf{R}^{p\times 1}$ 上の与えられたノルムに対応する演算子ノルムを表す。

よく使われる演算子ノルムの例をあげよう。まず、$\mathbf{x} = \left[x_1, \cdots, x_n\right]^T \in \mathbf{R}^{n\times 1}$ の $p-$<u>ノルム</u>(<u>l_p ノルム</u>）とは $\|\mathbf{x}\|_p \equiv (|x_1|^p + \cdots + |x_n|^p)^{1/p}$ のことをいう。ただし $p \ge 1$ とする。$p \to \infty$ のとき、

$\|\mathbf{x}\|_p \to \max\{|x_1|, \cdots, |x_n|\}$ なので（証明略）、$\|\mathbf{x}\|_\infty \equiv \max\{|x_1|, \cdots, |x_n|\}$ と定義し、これを $\infty-$<u>ノルム</u>という。$p-$<u>ノルム</u>も、$\infty-$<u>ノルムも</u>実際にノルムの公理を満たすことが証明される。このうち、とくに多用されるのは $1-$ノルム、$2-$ノルム、$\infty-$ノルムである。$1-$ノルム、$2-$ノ

ルムを改めて書くと、$\|\mathbf{x}\|_1 = |x_1| + \cdots + |x_n|$、　$\|\mathbf{x}\|_2 = (|x_1|^2 + \cdots + |x_n|^2)^{1/2}$。

さて、1－ノルム、2－ノルム、∞－ノルムを $\mathbf{R}^{n\times 1}, \mathbf{R}^{m\times 1}$ 上のノルムとしてとった場合、$\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ の演算子ノルムはそれぞれ次式によって与えられる：

$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{j=1,\cdots,n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$（“最大列和” ノルム）

$\|\mathbf{A}\|_2 =$ $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ の最大固有値の平方根（$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ の固有値はすべて正か0）＝$\mathbf{A}$ の最大特異値

$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$　（“最大行和ノルム”）

これらは実用的な公式である。

3.12　条件数

正方行列方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を数値的に解く場合にはかならず誤差が伴う。この場合、近似解を $\mathbf{x}_c$、$\mathbf{Ax}_c - \mathbf{b} = \mathbf{r}$ とすれば、$\mathbf{x}_c$ は $\mathbf{Ax}_c = \mathbf{b} + \mathbf{r}$ の厳密解になっている。これはデータ $\mathbf{A}, \mathbf{b}$ に多少変動を加えた方程式 $(\mathbf{A} + \Delta\mathbf{A})(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \Delta\mathbf{b}$ の解 $\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}$ と元の方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ の解 $\mathbf{x}$ を比較する問題の特別の場合と見なせる。この立場からの誤差解析を後退誤差解析 backward error analysis という。

これに関して次の事実が知られている（レッスン 11、14 参照）：

$\mathbf{A}, \Delta\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{n\times n}, \mathbf{b}, \Delta\mathbf{b} \in \mathbf{R}^{n\times 1}$、$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$、$(\mathbf{A} + \Delta\mathbf{A})(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \Delta\mathbf{b}$ とすれば、不等式

(1)　$$\frac{\|\Delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \le \frac{cond(\mathbf{A})}{1 - cond(\mathbf{A})(\|\Delta\mathbf{A}\| / \|\mathbf{A}\|)} \left(\frac{\|\Delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|} + \frac{\|\Delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|} \right) \qquad (cond(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|)$$

が成り立つ（$\Delta\mathbf{x}, \Delta\mathbf{A}$ の値次第で等号が成立しうる）。ただし、$\mathbf{A}^{-1}$ が存在し、行列ノルムは与えられたベクトルノルムに対応する演算子ノルムを表し、$\Delta\mathbf{A}$ は $\|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\Delta\mathbf{A}\| < 1$ が満足される程度に小さいものとする（これは $\mathbf{A} + \Delta\mathbf{A}$ の可逆性を保証する）。$cond(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|$ を条件数 condition number という。とくに、2-ノルムの場合 $cond(\mathbf{A}) = \sigma_{\max} / \sigma_{\min} =$（最大特異値）／（最小特異値）に等しい（レッスン 11、11.6 節「階数分析への応用」）。(1)はデータの相対誤差の和がほぼ条件数倍されて解に伝わりうることをいっている。

条件数は何を表すか？ $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{n\times n}$ を与えられた可逆行列とし、$\mathbf{B} \in \mathbf{R}^{n\times n}$ を任意の非可逆行列とすれば、かならず $\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\| \ge 1 / \|\mathbf{A}^{-1}\|$ が成り立ち、しかも等号を成り立たせるような非可逆行列 $\mathbf{B}_0$ が存在する：

(2)　$\|\mathbf{A}-\mathbf{B}_0\| = 1/\|\mathbf{A}^{-1}\|$

ここに$\|\cdot\|$は任意の演算子ノルムを表す（W. Kahan, Numerical Linear Algebra, Canadian Mathematical Bulletin 9, 757-801, 1966）。この事実はレッスン 14 において証明するが、関数解析の定理「ハーン・バナハの定理」を必要とする。上式の両辺を$\|\mathbf{A}\|$で割ると

(3)　$$\frac{\|\mathbf{A}-\mathbf{B}_0\|}{\|\mathbf{A}\|} = \frac{1}{\|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{A}^{-1}\|} = \frac{1}{cond(\mathbf{A})}$$

が得られる。これを見ると、条件数とは $\mathbf{A}$ から最短距離にある非可逆行列までの距離を$\|\mathbf{A}\|$で割った値の逆数に等しい。ゆえに、条件数が大なら、それだけその行列は非可逆行列に近くなることになる。$cond(\mathbf{A})$ こそ、$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ の“解きにくさ”の真の指標といえる。そして、$cond(\mathbf{A})$ が大きい場合、 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ は悪条件である ill-conditioned、そうでないとき良条件である well-conditioned という。

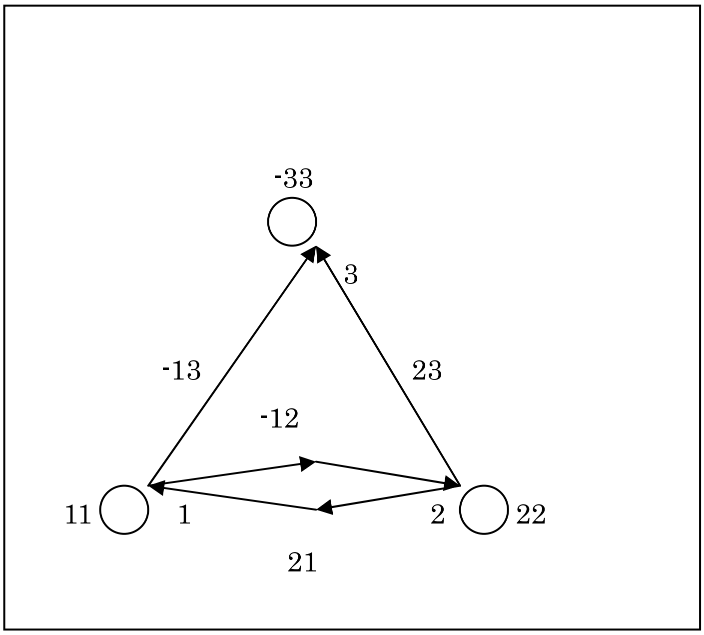
条件数はスカラー倍に対して不変である：$cond(\alpha\mathbf{A}) = cond(\mathbf{A})$ （$\alpha \neq 0$）。また $1 = \|\mathbf{I}\| = \|\mathbf{AA}^{-1}\| \le \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|$ だから条件数の最小値は1である。

3.13 行列とグラフ

$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ 型の正方行列方程式を解く場合、 $\mathbf{A}$ の可逆性が常に問題となるが、グラフ理論の力を借りると、可逆性が事前にきれいにわかる場合がある。これについて簡単に説明しよう（詳しい説明はレッスン 15 で行う）。

まず、行列のグラフを定義する。与えられた n 次正方行列 $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ に対して、平面上に n 個の点$1, 2, \cdots, n$（頂点 vertex という）を用意し、$a_{ij} \neq 0$ なら頂点 i から頂点 j に向かう有向辺 directed edge を引き（向きは矢印で示す）、値 a_{ij} を書き添える。 $a_{ij} = 0$ なら何もしない。これをすべての i, j に対して実行してできる有向グラフ directed graph を $\mathbf{A}$ のグラフといい、記号 $G(\mathbf{A})$ で表す。このようなグラフと行列が 1 対 1 対応することは明らかである。

例 1　$\mathbf{A} = [a_{ij}] = \begin{bmatrix} 11 & -12 & -13 \\ 21 & 22 & 23 \\ 0 & 0 & -33 \end{bmatrix}$ （ブロック上三角行列）のグラフは次図で与えられる：



$a_{31}=a_{32}=0$ であるから、頂点 3 から頂点 1 あるいは 2 へ向かう有向辺は存在しない。頂点からそれ自身へ向かう有向辺は円で示してある。

つぎに、$G(\mathbf{A})$ が強連結である strongly connected とはどの頂点 i から頂点 j への道 path も存在することをいう（$i \neq j$）。すなわち、有向辺 $i \to j$ が存在するか、

$i \to t_1, t_1 \to t_2, t_2 \to \cdots, \to t_{k,}\ t_k \to j$ のような有向辺の列が存在することをいう。

例 2　例 1 のグラフは強連結ではない（∵頂点 3 から頂点 1 または 2 への道がない）。

例 3　一般に、n 次ブロック上三角行列

$$\mathbf{A}=\left[a_{ij}\right]=\begin{bmatrix}\mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12}\\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_{22}\end{bmatrix}\ (\mathbf{A}_{11}:k\times k, \mathbf{A}_{22}:l\times l, k+l=n)$$

のグラフは強連結ではない。それは、$a_{ij}=0\,(i=k+1,\cdots,n,\ j=1,\cdots,k)$ なので、頂点集合 $\{k+1,\cdots,n\}$ に属する任意の頂点から、頂点集合 $\{1,\cdots,k\}$ に属するどの頂点に向かう有向辺も存在しないためである。

つぎに、n 次行列 $\mathbf{A}=\left[a_{ij}\right]$ が優対角である diagonally dominant とは、各行の非対角成分の絶対値の総和がその行の対角成分の絶対値を超えず、少なくとも一つの行については、厳密に小さいこと、すなわち、$\sum_{j=1,\cdots,n,\ j\neq i}\left|a_{ij}\right|\le\left|a_{ij}\right|\ (i=1,\cdots,n)$、が成立し、少なくとも一つの i の値に対して、上式中の“≤“記号を”＜“で置き換えられること、をいう。これは簡単に検証できる条件である。

例 4　行列 $\mathbf{A}=\begin{bmatrix}2&1&0\\1&2&1\\0&1&2\end{bmatrix}$ は優対角行列である。

次の事実が成立する：

「優対角かつグラフが強連結であるような行列は可逆である」

証明はレッスン 15 において行い、併せて応用例として、均質な正方形の板の 4 辺における温度を与えて内部の温度を求める定常熱伝導問題を考え、5 点差分法による離散化から発生する正方行列方程式の係数行列の可逆性を証明する。

3.14 注意事項

線形代数の定理は 2 通り以上の同値ないい方ができる場合が多い。すなわち、同じ事実をベクトルの言葉、行列の言葉、変換の言葉で表現できることが多い。従って同一事実の証明法も 2 通り以上あるのがふつうである。このことを知っていると知識の整理に役立つ。例で示す。

例 1　$\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\cdots,\mathbf{a}_n,\mathbf{b}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$ とすれば、以下の(1)(2)(3)はたがいに同値である：

(1) ベクトルの言葉による表現　$\mathbf{b}$ は $\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\cdots,\mathbf{a}_n$ の一次結合である：
$x_1\mathbf{a}_1+x_2\mathbf{a}_2+\cdots+x_n\mathbf{a}_n=\mathbf{b}$ を満たすスカラー（この場合は実数） $x_1,\cdots,x_n$ が存在する。

(2) 方程式の言葉による表現　$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ は可解である（$\mathbf{A}=[\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\cdots\mathbf{a}_n]\in\mathbf{R}^{m\times n}$）。

(3) 変換の言葉による表現　$\mathbf{b}$ は $\mathbf{A}=[\mathbf{a}_1,\mathbf{a}_2,\cdots\mathbf{a}_n]$ の値域（$\mathbf{Ax}$ 型ベクトル全体）に含まれる。

例 2　以下の(1)(2)は同値である：

(1)　ベクトルの言葉による表現　実内積空間内において、S を任意の部分空間、$S^{\perp}$ をその直交補空間（S 内のすべてのベクトルに直交するようなベクトルの全体、部分空間となる）、$S^{\perp\perp}$ を $S^{\perp}$ の直交補空間とすれば、$S^{\perp\perp}=S$ （回帰性）。

(2)　方程式の言葉による表現　行列方程式 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ （$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n},\mathbf{b}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$）が可解であるための必要十分条件は $\mathbf{y}^T\mathbf{A}=\mathbf{0}$ を満たすすべての $\mathbf{y}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$ に対して $\mathbf{y}^T\mathbf{b}=0$ が成り立つことである。（必要性は明らか。これが十分条件でもある点が値打ち。）

略証　(1)⇒(2)：$S=$「$\mathbf{A}$ の値域」とすればよい。(2) ⇒(1)：部分空間はかならず適当な行列の値域として表現できることから従う。

最後にひとこと：

全レッスン終了後初めて線形代数の全容がわかるという、通常の学び方の不便さを避け、なるべく早い段階で全体像をラーナーにお知らせする、という意図からこの概要は書かれている。分解定理はその主軸であり華である。行列式、内積、ノルム、グラフは必要な脇役である。勉強の指針として活用頂ければ幸いである。

