A.　付録：行列計算

この付録では，資料中で前提とする行列計算についての数学的な性質を説明しよう．

A.1.　行列の基礎

行列の演算

・行列 **A** の逆行列は $\mathbf{A}^{\mathbf{-1}}$ は， $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{E}$ を満たす．ここで **E** は単位行列(elementary matrix)で，対角成分のみ１，他の成分はゼロである．

・ $(\mathbf{A}\mathbf{B})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$

・行列 A の転置行列を $\mathbf{A}^{T}$ と書く，T は転置(transpose)の略である．

・ $(\mathbf{A}\mathbf{B})^{T} = \mathbf{B}^{T}\mathbf{A}^{T}$

固有値・固有ベクトル

・行列 **A** の固有値問題は， $\mathbf{A}\bar{x} = \lambda\bar{x}$ と書かれる．ここで $\bar{x}$ は列ベクトルで固有ベクトルと呼ばれ， λ は固有値と呼ばれる．

・固有値ベクトルを並べて行列を作れば， $\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}$ と表される．ここで $\mathbf{\Lambda}$ は対角行列でその成分は固有値である．

・実行列 **A** の固有値が全て実数で互いに異なるのであれば，**A** は適当な実正則行列 **X** によって $\mathbf{X}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{\Lambda}$ と対角化でき，その対角成分は固有値で，**X** の各列は一次独立な固有ベクトルである．

正規行列の仲間達

・ $\mathbf{A}^{*}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{*}$ を満たす行列を，正規行列という．ここで*は，転置と複素共役をとる二つの操作を示す．

・以下で述べる，対称行列・直交行列・エルミート行列・ユニタリー行列は，全て正規行列である．

・ $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{T}$ を対称行列という．

・ $\mathbf{U}^{T}\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U}^{T} = \mathbf{E}$ を満たす行列 U を直交行列という．

・対称行列は，直行行列で対角化可能である．

・ $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{*}$ を満たす行列をエルミート行列という．エルミート行列は，対称行列を複素数に拡張したものである．

・エルミート行列の固有値は全て実数である．

・ $\mathbf{U}^{*}\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U}^{*} = \mathbf{E}$ を満たす行列 U をユニタリー行列という．ユニタリー行列は，直交行列を複素数に拡張したものである．

・エルミート行列はユニタリー行列で対角化される．

A.2.　行列における特異値分解

SVD 解析には行列の特異値分解(singular value decomposition)が利用される．行列の特異値分解は研究では広く使われるものの，和書では Press ら(1992) が連立一次方程式の解法で軽く触れ，柳井・竹内(1983)が詳細に（ただし容易にではない）論じている程度しか，寡聞にして（もしくは不勉強で）しらない．そこでまず，行列演算での特異値分解を紹介しよう．

特異値分解とは，任意の長方形の行列, $\mathbf{A}$ $(M \times N)$, を

$$\mathbf{A} = \mathbf{ULV}^T \tag{7.1}$$

の形に分解する手法である． $\mathbf{U}$ は$(M \times N)$の列正規直交行列（$\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{E}$，$\mathbf{UU}^T \neq \mathbf{E}$），$\mathbf{L}$ は$(N \times N)$の対角行列，$\mathbf{V}$ は$(N \times N)$の正規直交行列（$\mathbf{V}^T\mathbf{V} = \mathbf{VV}^T = \mathbf{E}$）である．また，$\mathbf{L}$ の対角成分は特異値(singular value)と呼ばれる．

なお，Matlab では $\mathbf{U}$ は$(M \times M)$の正規直交行列，$\mathbf{L}$ は$(M \times N)$で対角成分のみゼロではない行列，$\mathbf{V}$ は$(N \times N)$の正規直交行列と出力される．この表現は，上の数学的な慣習に比べてやや冗長である．

行列 A についてのフロベニウスの行列ノルム

$$\|\mathbf{A}\|_F \equiv \sqrt{\sum_{n=1}^{N}\sum_{p=1}^{P} a^2(n,p)} \tag{7.2}$$

は，特異値l_mを用いて，

$$\|\mathbf{A}\|_F^2 = \sum_{m=1}^{R} l_m^2 \tag{7.3}$$

と表される．すなわち，フロベニウスの行列ノルムの二乗は，特異値の二乗和である．

A.3.　特異値分解と固有値の関係

行列 $\mathbf{A}$

$$\begin{aligned} \mathbf{AA}^T &= \mathbf{ULV}^T\left(\mathbf{ULV}^T\right)^T = \mathbf{ULV}^T\mathbf{VL}^T\mathbf{U}^T = \mathbf{ULL}^T\mathbf{U}^T \\ \therefore \left(\mathbf{AA}^T\right)\mathbf{U} &= \mathbf{U}\left(\mathbf{LL}^T\right) \Rightarrow \left(\mathbf{AA}^T\right)\vec{u}_m = l_m^2\vec{u}_m \end{aligned} \tag{7.4}$$

したがって，行列$\mathbf{AA}^T$の固有値は行列 $\mathbf{A}$ の特異値の 2 乗であり，固有ベクトルは左特異ベクトルである．同様に，行列$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$の固有値は同じく特異値の 2 乗であり，固有ベクトルは右特異ベクトルであることが示される．

柳井 晴夫, 竹内 啓, 1983: 射影行列・一般逆行列・特異値分解, -UP 応用数学選書 10-, 東京大学出版会, pp. 214.

Press, W. H., B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, 1993: Numerical Recipes in C [日本語版], 技術評論社, pp. 685.