グラフ上のランダムウォークと
Google のページランク

内藤 久資
名古屋大学多元数理科学研究科
naito@math.nagoya-u.ac.jp
http://www.math.nagoya-u.ac.jp/~naito/

２０１１年度数学アゴラ
夏季集中コース
２０１１年８月
(2011/08/12 改訂版)

目 次

1 Introduction

1.1 ページランクとは

「Google 検索」に「検索キーワード」を入力すると，キーワードを含むウェブページが瞬時にリストアップされる．これを実現している技術は, 以下の 4 個の基本的な部分に分けられる.

1. インターネット上に存在するウェブページのデータを収集する技術,
2. 収集したウェブページのデータから「キーワード」を抜き出し，データベースに保存する技術,
3. 入力されたキーワードに一致するウェブページの情報をデータベースから検索する技術,
4. 入力されたキーワードに一致したウェブページを「重要なものを上位にして」表示する技術.

近年では, 種々の目的を持ったユーザがそれぞれの目的に合致した情報を得るために, ウェブから情報を得ようとする場合が多く, その手段として, Google をはじめとする「検索サイト」を利用することが多い．従って, 検索サイトでの検索結果で上位に表示されることは, 様々なタイプのビジネスにおいて, 有利な結果をもたらすと考えられている．一方, 一時期は多くの検索エンジンが乱立し, それぞれの検索エンジンにおいて独自の方法で表示順序を決定していたが, 多くの検索エンジンは淘汰され, 今日では, Google の独壇場となっている．その理由としては,

1. 蓄積されたウェブページの量が極めて多い,
2. 検索結果として表示される順序の決定方法が「公正」である

と考えられている.

今回の講義で紹介するのは, Googole の検索結果の表示順序の決定方法であり，莫大なウェブページのデータに対して，「重要度」をきめるための数学である．このページデータの重要度をきめる方法は, 1999 年に S.Brin と L.Page らによって発表された「**ページランク**」という考え方である．(cf. [1])

1.2 目標と予備知識

この講義の目標は,

- Google のページランクがどのような考え方の下できめられているか？
- その考え方を実現する数学は何か？

- 実際に, その数学を使って, どのようにページランクを計算するのか？

を考えることであり, 予備知識としては, 高校 2 年程度の数学を仮定する. 特に, ベクトル・数列・確率の概念と記法を仮定する. また, 行列の概念とその計算方法・数列の収束について知っていることが望ましい.

★ 記号と基本的な用語

▼ 記号

- $\mathbb{N}$: 自然数全体の集合 $= \{1, \ldots, n, \ldots\}$.
- $\mathbb{N}_{\geq 0}$: 0 と自然数全体の集合 $= \{1, \ldots, n, \ldots\} = \mathbb{N} \cup \{0\}$.
- $\mathbb{R}$: 実数全体の集合.
- $\mathbb{C}$: 複素数全体の集合.
- $\mathbb{R}^n$: n 次元数ベクトル空間 (Definition 3.2.2).
- $\boldsymbol{x}$ などの小文字の太文字： ベクトル (Definition 3.2.1).
- $\boldsymbol{A}$ などの大文字の太文字： 行列 (Definition 3.3.1).

▼ 用語

- 「Definition」=「定義」: 言葉や記号などの約束ごと
- 「Theorem」=「定理」, 「Corollary」=「系」, 「Proposition」=「命題」: 数学としての主張. 「定理」は重要な主張, 「系」は定理から簡単に得ることができる重要な主張, 「命題」は定理と言うほどでもないもの. この他に「Lemma」=「補題」と表すものもある. 区別を厳密に行っているわけではない.
- 「Remark」=「注意」

▼ ギリシャ文字の読み方

α	アルファ (alpha)	θ	テータ (theta)	ρ	ロー (rho)
β	ベータ (beta)	κ	カッパ (kappa)	σ	シグマ (sigma)
γ	ガンマ (gamma)	λ	ラムダ (lambda)	τ	タウ (tau)
δ	ガンマ (delta)	μ	ミュー (mu)	ϕ	ファイ (phi)
ϵ	イプシロン (epsilon)	ν	ニュー (nu)	χ	カイ (chi)
ζ	ゼータ (zeta)	ξ	グジー (xi)	ψ	プサイ (psi)
η	エータ (eta)	π	パイ (pi)	ω	オメガ (omega)

ここにあげたのは数学で頻繁に使われるものだけで, 他の読み方もある.

2　問題のモデル化

Google ページランクのように, 一見して数学とは結び付かないと思われる問題を数学的にアプローチするためには, 考える問題の中から重要な部分を抽出して, 数学の言葉に書き直すことが必要である. その操作を「モデル化」とよび, 科学技術の中核をなす考え方である. この章では, インターネット上のウェブデータを情報をモデル化する方法を考えよう.

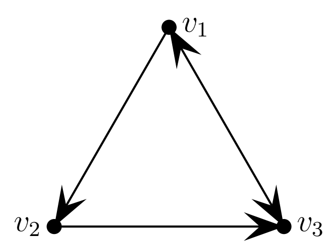
2.1　ページランクの定義

ウェブのデータは「HyperText Mark up Language」とよばれる仕様によって記述されている. （これを略して「HTML」と言う.）各ページをウェブブラウザで表示ししたとき, クリックすることにより他のページへ移動する部分は「パーパーリンク」と呼ばれている（簡単に「リンク」とも呼ぶ）. 多くのウェブページがリンクによって結び付けられたのが, インターネット上のウェブデータ全体であると考える. そこで, インターネット上のウェブデータ全体を以下のようにモデル化することができる.

1. 各ウェブページを, それぞれ 1 つの「点」と考える.
2. ある点 A で表されたウェブページから, 他の点 B で表されたウェブページへのリンクが存在する場合, A から B への矢印を与える.
3. 2 の操作をすべてのリンクに対して行う.

以下, 簡単のためにウェブページを単に「ページ」と書く.

Example 2.1.1. インターネットの世界に 3 つのページ v_1, v_2, v_3 のみが存在し, v_1 からは v_2, v_3 へ, v_2 からは v_3 へ, v_3 からは v_1 へリンクが張られているとき, このリンクをあらわす図は以下のようになる.



Definition 2.1.2 (グラフ)**.** **頂点**の集合 V と, 2 つの頂点を結ぶ**辺**の集合 E の組 $G = (V, E)$ を**グラフ**と呼ぶ. 特に, 各辺 $e \in E$ に対して, 向きを与えたグラフを**有向グラフ**と呼ぶ. 有向グラフの各辺 $e \in E$ に対して, その始点を $o(e) \in V$, 終点を

$t(e) \in V$ と書く. また, 始点と終点を逆にした辺を $\overline{e}$ と書くこともある. さらに, $v \in V$ に対して,

$$\begin{aligned} V_v &= \{u \in V : o(e) = v, t(e) = u \text{ となる } e \in E \text{ が存在する }\} \\ &= \{v \text{ を始点とする辺の終点の集合}\} \\ &= \{\text{ ページ } v \text{ からのリンク先のページの集合}\} \\ B_v &= \{u \in V : t(e) = v, o(e) = u \text{ となる } e \in E \text{ が存在する }\} \\ &= \{v \text{ を終点とする辺の始点の集合}\} \\ &= \{\text{ ページ } v \text{ へリンクしているページの集合}\} \\ |v| &= \sharp V_v = \text{ページ } v \text{ から出ていくリンクの数} \end{aligned}$$

と定義する.

この定義により,

インターネット上のウェブデータ全体のリンク構造を有向グラフと考える

としてよいことがわかる.

次に,「重要なページ」とは何かを, 次の 2 つの考え方で定義する.

- 多くのページからリンクされているページは重要なページである.
- 重要なページからリンクされているページは重要なページである.

この考え方を数式で書くと, 次のように言い換えることができる.

Definition 2.1.3 (ページランク). 考えているウェブデータの有向グラフを $G = (V, E)$ とおき, $V = \{v_i\}$ とおく. (各 v_i は, 一つのウェブページを表している.) このとき, ウェブページ v_i の**ページランク** $r(v_i)$ を

$$r(v_i) = \sum_{v_j \in B_{v_i}} \frac{r(v_j)}{|v_j|} \tag{2.1}$$

と定義する. (以後, $r(v_i)$ を簡単に r_i と書くこともある.)

Remark 2.1.4. このページランクの定義は,「左辺の値を右辺の式で定義する」という形にはなっていない. より正しくは,「すべてのページに対するページランクの値の組 $\{r(v_i)\}$ を, 式 (2.1) が成り立つように定義する」という意味である. また,「ランク」という言葉にも関わらず,「値が大きいほどランクが上になる」値として定義されている.

実際, 式 (2.1) は, 上の 2 つの考え方を適切に表現する式である. なぜなら,

- (2.1) の左辺の項の数が多ければ, 右辺の値は大きくなる. これは, 「多くのページからリンクされているページのページランクの値は大きくなる」ことを意味している.

- (2.1) の左辺に, 大きなページランクの値を持つページがあれば, 右辺の値は大きくなる. これは, 「ページランクが上位のページからリンクされているページのページランクの値は大きくなる」ことを意味している.

Remark 2.1.5. このページランクの考え方は, Brin と Page によってはじめて考えられたものではなく, 「計量書誌学」とよばれる, 学術論文の重要性を考察する研究分野で古くから考察されてきたものである.

Example 2.1.6. ウェブデータ全体が Example 2.1.1 として与えられた場合, 各ページには 3 つのリンクが存在しているので, ページランク $\{r(v_1), r(v_2), r(v_3)\}$ は,

$$\begin{cases} r_1 = r_3, \\ r_2 = \dfrac{1}{2} r_1, \\ r_3 = \dfrac{1}{2} r_1 + r_2 \end{cases} \tag{2.2}$$

によって定められる. 式 (2.2) を書き直すと,

$$\begin{cases} \qquad\quad r_1 - r_3 = 0, \\ \quad -\dfrac{1}{2} r_1 + r_2 = 0, \\ -\dfrac{1}{2} r_1 - r_2 + r_3 = 0 \end{cases} \tag{2.3}$$

となり, 未知数 $\{r_1, r_2, r_3\}$ に対する連立一次方程式であることがわかる. 連立一次方程式 (2.2) の解は,

$$r_1 = k, \quad r_2 = k/2, \quad r_3 = k$$

をみたす任意の $k \in \mathbb{R}$ である. 従って, v_1, v_3 のページランクは同一の値であり, v_2 のページランクはそれの 1/2 倍であることがわかる.

この例からもわかる通り, ページランクを与える式 (2.1) は, ページランクの値を未知数とする連立一次方程式となる. (ただし, 一般には, その方程式の本数は莫大な数になる.)

2.2 確率に基づくページランクの定義

さて, ページの重要度 (ページランク) の定義として, これまでとは異なる次の考え方に基づくものとしてみよう.

- ウェブデータ全体の中を, ユーザがリンクをクリックしながら移動していくとき, より多くのユーザが訪れるページほど重要なページである.

ウェブデータ全体のリンク構造が有向グラフをなしているという事実と, この「重要度」の考え方を使って, ページランクをモデル化してみよう.

Definition 2.2.1 (もうひとつのページランクの定義). ある時刻 $t = n$ において, ウェブデータ全体の系の滞在ユーザのうち, ページ v_i に滞在しているユーザの割合を $p_i(n)$ とおく. また, ページ v_i に滞在しているユーザは, 次の時刻 $t = n + 1$ には, v_i にあるリンクをクリックすることで, 他のページに移動する. その際, ページ内のどのリンクをクリックするかは等確率であると仮定する.

長時間にわたって, このプロセスを繰り返したときの各ページのユーザの滞在確率

$$p(v_i) = p_i = \lim_{n\to\infty} p_i(n)$$

を, ページ v_i の**ページランク**と定義する. すなわち, $\{p_i(n)\}$ から $\{p_i(n+1)\}$ をきめる式は

$$p_i(n+1) = \sum_{v_j \in B_{v_i}} \frac{1}{|v_j|} p_j(n) \tag{2.4}$$

で与えられる.

Remark 2.2.2. この定義の中で, 次のページに移動する際に, 「過去にどのページにいたか？」は考慮しない. また, ウェブブラウザの「戻る」ボタンによって, 以前に滞在したページに戻るという状況も考慮しない.

Example 2.2.3. ウェブデータ全体が Example 2.1.1 として与えられた場合, 時刻 $t = n$ で, ページ v_i に滞在しているユーザの割合 $p_i(n)$ から, 時刻 $t = n + 1$ で, ページ v_i に滞在しているユーザの割合 $p_i(n+1)$ を計算する式は,

$$\begin{cases} p_1(n+1) = p_3(n), \\ p_2(n+1) = \dfrac{1}{2} p_1(n), \\ p_3(n+1) = \dfrac{1}{2} p_1(n) + p_2(n) \end{cases} \tag{2.5}$$

となる. 時刻 $t = 0$ において, $p_1(0) = 1$, $p_2(0) = p_3(0) = 0$ と仮定すると,

t	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	$\cdots$	
p_1	1	0	1/2	1/2	1/4	1/2	3/8	3/8	7/16	3/8	$\to$	2/5
p_2	0	1/2	0	1/4	1/2	1/8	1/4	3/16	3/16	7/32	$\to$	1/5
p_3	0	1/2	1/2	1/4	1/2	3/8	3/8	7/16	3/8	13/32	$\to$	2/5

となり, 長時間経過したときの滞在確率 $(p_1, p_2, p_3) = (2/5, 1/5, 2/5)$ は Example 2.1.6 の連立一次方程式の解を与えている.

実際, 次の定理が成り立つ.

Theorem 2.2.4. 数列 $\{p_i(n)\}$ を漸化式 (2.4) で定義する．このとき, すべての i について $p_i(n)$ の $n \to \infty$ としたときの極限 p_i が存在すると仮定すれば, 極限 $\{p_i\}$ は,

$$p_i = \sum_{v_j \in B_{v_i}} \frac{1}{|v_j|} p_j \tag{2.6}$$

をみたす.

Proof. すべての i について, 極限 $p_i = \lim_{n\to\infty} p_i(n)$ が存在すると仮定しているので, 式 (2.4) の両辺の極限を取ればよい. □

Remark 2.2.5. 式 (2.5) と式 (2.1) は同一の式である．すなわち, 前節のページランクの定義 (Definition 2.1.3) と, 確率的な考え方によるページランクの定義 (Definition 2.2.1) は, すべての i に対して極限 p_i が存在するという仮定の下では, 同一のページランクの定義を与えている.

2.3 ここまでのまとめ

ここまでの考察により, ウェブデータ全体の中で, 各ページの重要度を調べるためのモデルをウェブデータ全体のリンク構造を有向グラフであらわした上で,

- 各ページのリンク情報をもとに, 連立一次方程式を与え, その解をページランクとするモデル.
- あるページに滞在するユーザは, そのページ内のリンクを等確率で選択して他のページに移動すると考え, 長時間経過したときに, ユーザの滞在確率が高い順に重要度を与えるモデル.

という 2 つのモデルを考えることができた．また, この 2 つのモデルは, ある条件の下に同一の値を与えることもわかった. そこで, 次の問題を自然に考えることができる.

1. これらのモデルを考えるために適切な数学の道具は何か？
2. 第一のモデルについて：
   - この連立一次方程式は, 必ず解を持つのか？
   - 解を持つとしたら, その解はただ一つに限るのか？
3. 第二のモデルについて：
   - 長時間経過したときに, 滞在確率は, 必ずある一定の値に収束するのか？

- それは, 初期条件（$t = 0$ での滞在確率）の与え方に依存するのか？
- 「長時間」とはどのくらいの時間（計算ステップ数）を意味するのか？

4. これらの計算プロセスは, どのくらいの時間がかかるのか？

   特に, 数万〜数十億ページを含むデータに対して計算可能なのか？

以下では, このモデルを適切にあらわす数学を準備して, これらの問題を順に考察していく.

3　準備：線形代数

ここでは, ページランクのモデルを数学的に適切に表すための準備の一つとして, 線形代数（ベクトル・行列・一次変換）を解説する. ここでの 1 つ目の目標は, 連立一次方程式を線形代数の言葉で書き下し, その解が存在するための条件を考察することであり, もう 1 つの目標は, ページランクのモデルの問題を考察するために, 行列の固有値とは何かを知ることである.

3.1　連立一次方程式から線形代数へ

はじめに, 連立一次方程式

$$\begin{cases} ax + by = x_1, \\ cx + dy = y_1, \end{cases} \tag{3.1}$$

を考えよう. 連立一次方程式 (3.1) の解は, xy-平面上の直線 $ax+by=x_1$, $cx+dy=y_1$ の共有点に他ならない. 従って, (3.1) の解は, 以下の 3 つに場合分けして書き下すことができる.

1. 直線 $ax+by=x_1$, $cx+dy=y_1$ が相異る 2 直線であり, 平行でない場合.

   この場合には, 2 直線の共有点は xy-平面上の 1 点となり, (3.1) の解は

   $$x = \frac{by_1 - dx_1}{ad - bc}, \quad y = \frac{ay_1 - cx_1}{ad - bc}$$

   と書ける.

2. 直線 $ax+by=x_1$, $cx+dy=y_1$ が同一の直線となる場合.

   この場合には, その同一の直線 $ax+by=x_1$ 上のすべての点が (3.1) の解となる.

3. 直線 $ax+by=x_1$, $cx+dy=y_1$ が平行な相異る 2 直線である場合.

   この場合には, この 2 直線の共有点は存在しないので, (3.1) の解は存在しない.

直線 $ax+by=x_1$, $cx+dy=y_1$ が平行であることの必要十分条件は, $ad-bc=0$ が成り立つことである. これは, この 2 直線の傾きが一致すること, すなわち, $a:b=c:d$ が成り立つことから得られる. また, 直線 $ax+by=x_1$, $cx+dy=y_1$ が同一の直線を表すことの必要十分条件は, $a:b:x_1=c:d:y_1$ が成り立つことである. これらをまとめると, 次の命題を得ることができた.

Proposition 3.1.1. 連立一次方程式 (3.1) について,

1. $ad - bc \neq 0$ ならば, (3.1) はただひとつの解を持ち, その解は
$$x = \frac{by_1 - dx_1}{ad - bc}, \quad y = \frac{ay_1 - cx_1}{ad - bc}$$
である.

2. $ad - bc = 0$ かつ $by_1 - dx_1 = 0$ （このとき, $ay_1 - cx_1 = 0$ も成り立つ）ならば, $ax + by = x_1$ をみたすすべての (x, y) が (3.1) の解となる.

3. $ad - bc = 0$ であって, $by_1 - dx_1 \neq 0$ （このとき, $ay_1 - cx_1 \neq 0$ も成り立つ）ならば, (3.1) の解は存在しない.

Remark 3.1.2. Proposition 3.1.1 において, 「連立一次方程式 (3.1) の解がただひとつに決まるか？」の判定条件として, 「$ad - bc$ の値が 0 か否か？」を得たことが重要な点である.

以下では, 連立一次方程式 (3.1) を, これとは異なった見方でみてみよう.
いま, 実数 a, b, c, d が与えられたとき,
$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} ax + by \\ cx + dy \end{pmatrix}$$
という「写像」を考える. この「写像」という考え方で連立一次方程式 (3.1) をとらえると, xy-平面上の点 (x, y) を $(ax + by, cx + dy)$ へ「移動」したとき, $(ax + by, cx + dy) = (x_1, y_1)$ となる点 (x, y) が見つかれば, それが (3.1) の解であることを意味している.

また, 前節の Example 2.1.6 でページランクを計算するためにに出てきた連立一次方程式 (2.3)
$$\begin{cases} r_1 - r_3 = 0, \\ -\dfrac{1}{2}r_1 + r_2 = 0, \\ -\dfrac{1}{2}r_1 - r_2 + r_3 = 0 \end{cases} \tag{2.3}$$
は, 写像
$$\begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} r_1 - r_3 \\ -\dfrac{1}{2}r_1 + r_2 \\ -\dfrac{1}{2}r_1 - r_2 + r_3 \end{pmatrix}$$
を考えたとき, $(0, 0, 0)$ へうつる点 (r_1, r_2, r_3) を求めるという問題に帰着される.

この考え方を見通しよく考えるための基礎になるのが線形代数である.

3.2　数ベクトル空間

「連立一次方程式の解が存在するか否か？」,「もし存在すれば, それはただひとつに決まるか？」という問題を線形代数を使って見通しよく考えることを目標にするのだが, その基礎となるのが「ベクトル空間」という考え方である.

高校数学で「ベクトル」は「矢印で表された対象」のように扱われているが, ここでは, 平面や空間, もしくはより高い次元の空間の点を「ベクトル」と考える. 強いていえば,「原点 O からの矢印」と考えればよい.

Definition 3.2.1 (ベクトル). N 個の実数 $\{x_i\}_{i=1}^N$ を縦に並べたもの

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}$$

を (N 成分の) **列ベクトル**または**縦ベクトル**と呼び, 各 x_i を $\boldsymbol{x}$ の第 i **成分**と呼ぶ. なお, 列ベクトルのことを簡単に**ベクトル**と呼ぶこともある. さらに, $\boldsymbol{x} = (x_i)$ と簡単に書いてしまうこともある.

Definition 3.2.2 (数ベクトル空間). N 成分の列ベクトル全体の集合

$$\mathbb{R}^N = \left\{ \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} : x_i \in \mathbb{R} \right\}$$

を N 次元**数ベクトル空間**と呼ぶ.

Definition 3.2.3 (ベクトルの相当). 同じ数ベクトル空間 $\mathbb{R}^N$ に含まれる 2 つのベクトル $\boldsymbol{x} = (x_i)$ と $\boldsymbol{y} = (y_i)$ が等しいとは, すべての成分が（その順序も含めて）等しいことと定義する. すなわち,

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N \quad \Longleftrightarrow \quad x_i = y_i \quad i = 1, \dots, N$$

が成り立つことである.

Definition 3.2.4 (零ベクトル). $\mathbb{R}^N$ の元で, すべての成分が 0 であるベクトルを**零ベクトル**と呼び, $\mathbf{0}$ と書く.

以下, 特に断らない限り,「ベクトル $\boldsymbol{x}$」などと書いたら, $\boldsymbol{x} \neq \mathbf{0}$ を仮定する.

Example 3.2.5. 2 次元数ベクトル空間 $\mathbb{R}^2$ の元と, xy-平面上の点とは 1 対 1 対応がある. すなわち, xy-平面上の座標 (x, y) を持つ点と, ベクトル $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ は 1 対 1 に対応する. 同様に, 3 次元数ベクトル空間 $\mathbb{R}^3$ の元と xyz-空間内の点は 1 対 1 に対応する. 従って, n 次元数ベクトル空間 $\mathbb{R}^N$ は, 座標平面・座標空間を一般化した概念である.

Definition 3.2.6 (ベクトルの和とスカラー倍)**.** $\mathbb{R}^N$ の 2 つのベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$ に対して, その和 $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}$ を

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{x}+\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} x_1+y_1 \\ \vdots \\ x_N+y_N \end{pmatrix}$$

で定義する. また, $a \in \mathbb{R}$, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N$ に対して, $\boldsymbol{x}$ の a 倍（**スカラー倍**）を

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad a\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} ax_1 \\ \vdots \\ ax_N \end{pmatrix}$$

で定義する.

Remark 3.2.7. 簡単に言ってしまうと, ベクトル空間とは, 和とスカラー倍が定義できて, 零ベクトルと呼ばれる特別な元が存在する集合のことである. 数ベクトル空間と座標平面・座標空間を同一視することによって, 座標平面・座標空間に演算が定義できるようになった.

★ 部分空間と次元

次に, 数ベクトル空間の「部分空間」とその「次元」を定義しよう.

Definition 3.2.8 (部分空間)**.** $\mathbb{R}^N$ の部分集合 W が**部分空間**であるとは, W が以下の 3 つの条件をみたすことである.

1. 零ベクトルは W に含まれる. すなわち, $\mathbf{0} \in W$ である.
2. W の任意の 2 つの元 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in W$ に対して $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{w} \in W$ をみたす.
3. W の任意の元 $\boldsymbol{x} \in W$ と任意の $a \in \mathbb{R}$ に対して $a\boldsymbol{x} \in W$ をみたす.

Example 3.2.9. $\mathbb{R}^2$ の $\mathbf{0}$ ではないベクトル $\boldsymbol{x}$ をひとつとる. このとき,

$$W = \{a\boldsymbol{x} : a \in \mathbb{R}\}$$

は $\mathbb{R}^2$ の部分空間となる. この W は xy-平面上で, 原点を通り, 方向ベクトルが $\boldsymbol{x}$ となる直線と一致する. 例えば, $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ の時, $W = \left\{ \begin{pmatrix} a \\ 2a \end{pmatrix} \right\}$ であるので, 直線 $y = 2x$ 上の点全体と一致する.

$\mathbb{R}^3$ の $\mathbf{0}$ でないベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ をとる. このとき,

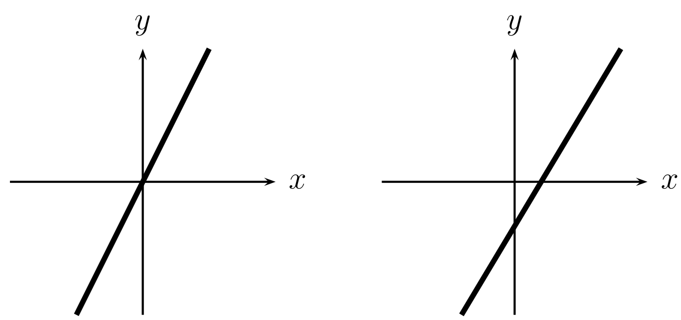
$$W = \{a\boldsymbol{x} + b\boldsymbol{y} : a, b \in \mathbb{R}\}$$

は $\mathbb{R}^3$ の部分空間となる．特に, $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ が平行でない ($\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{y}$ のスカラー倍でない）場合には, W は xyz-座標空間内で, 原点を通り, $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ を含む平面と一致する．例えば, $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ の時, $W = \left\{ \begin{pmatrix} a \\ a+b \\ b \end{pmatrix} \right\}$ となる．この集合は, 平面 $x - y + z = 0$ 上の点全体と一致する．

Remark 3.2.10. 数ベクトル空間には, 零ベクトル $\mathbf{0}$ だけからなる自明な部分空間が存在する．Example 3.2.9 から推測できるように, $\mathbb{R}^2$ の部分空間は（それが, 自明な部分空間でない限り）, 原点を通る直線と考えて良い．

また, $\mathbb{R}^3$ の部分空間は, 原点を通る平面または原点を通る直線と考えて良い．

逆に, 部分空間は $\mathbf{0}$ が含まれることが必要なので, 原点を通らない直線や平面は部分空間ではない．



これは部分空間　　　これは部分空間じゃない

★ ★ ★

次に, 数ベクトル空間やその部分空間の「次元」を考える準備をしよう．我々は「直線は 1 次元, 平面は 2 次元, 空間は 3 次元」と考えているのだが, その「次元」という言葉は正確に定義したものではない．ここで定義する「次元」は「ベクトル空間の次元」であり, 「自由度」と言い換えてもよい言葉である．次元を定義するには, 「一次独立」という概念を定義する必要がある．

Definition 3.2.11 (一次独立性). $\mathbb{R}^N$ の中の k 本のベクトルの組 $\{\boldsymbol{x}_1, \ldots \boldsymbol{x}_k\}$ が**一次独立**であるとは,

$$a_1\boldsymbol{x}_1 + \cdots + a_k\boldsymbol{x}_k = \mathbf{0} \quad \Longrightarrow \quad a_1 = \cdots = a_k = 0$$

が成り立つことである．ベクトルの組 $\{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_k\}$ は, 一次独立でないとき**一次従属**であると呼ばれる．

Example 3.2.12. $\mathbb{R}^N$ の 2 本のベクトル $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ が平行であると仮定する．すなわち, ある $k \in \mathbb{R}$ が存在して, $\boldsymbol{x} = k\boldsymbol{y}$ が成り立っていると仮定する．このとき, $\boldsymbol{x} - k\boldsymbol{y} = \mathbf{0}$ であるので, $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\}$ は一次独立でない．すなわち, $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\}$ は一次従属である．逆に, $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\}$ は一次従属と仮定すると, ある a または b のいずれか一方は

0 でない $a, b \in \mathbb{R}$ が存在して, $a\boldsymbol{x} + b\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$ と書ける. よって, $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ は平行であることがわかる.

したがって, 2 つのベクトル $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\}$ が平行であることと一次従属であることが同値となる.

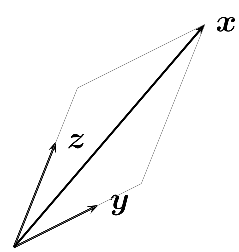
Example 3.2.13. $\mathbb{R}^N$ の 3 つのベクトルの組 $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}\}$ が一次従属であると仮定する. すなわち,

$$a\boldsymbol{x} + b\boldsymbol{y} + c\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}$$

であって, a, b, c のうち少なくとも一つは 0 でないと仮定する. このとき, 一つのみが 0 でないと仮定してみる. 例えば, $a \neq 0$, $b = c = 0$ と仮定すると, $vx = \boldsymbol{0}$ となるので, a, b, c のうち少なくとも 2 つは 0 でないと仮定して良い. 例えば $a \neq 0$ と仮定すると,

$$\boldsymbol{x} = -\frac{b}{a}\boldsymbol{y} - \frac{c}{a}\boldsymbol{z}$$

と書ける. すなわち, ベクトル $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{y}$ と $\boldsymbol{z}$ を含む平面上の点をあらわす.



これを一般化して考えれば, $\{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_k\}$ が一次従属であるとは, そのうちの一つのベクトルが他のベクトルを使って書けてしまうことを意味している.

Example 3.2.14.

1. $\mathbb{R}^2$ のベクトルを $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ とると, $\{\boldsymbol{x}\}$ は一次独立である.

2. $\mathbb{R}^2$ のベクトル $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ を $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ とると, $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\}$ は一次独立である.

3. $\mathbb{R}^2$ のベクトル $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ を $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} -2 \\ -4 \end{pmatrix}$ とると, $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\}$ は, $\boldsymbol{y} + 2\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ が成り立っているから, 一次独立ではない.

4. $\mathbb{R}^3$ のベクトル $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ を $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ ととると, $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\}$ は一次独立である.

5. $\mathbb{R}^3$ のベクトル $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{z}$ を $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$ ととると, $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}\}$ は一次独立である.

6. $\mathbb{R}^3$ のベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}$ を $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{z} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$ ととると, $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}\}$ は, $2\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} - \boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}$ となるので, 一次独立ではない.

Definition 3.2.15 (**次元**)**.** 数ベクトル空間またはその部分空間 V の**次元**が k であるとは, V の中から一次独立な k 個のベクトルの組を選びだすことができ, 任意の $k+1$ 個のベクトルは一次従属であることを言う. このとき $\dim V = k$ と書く.

Example 3.2.16. $\mathbb{R}^N$ の次元は N である. なぜなら, $\boldsymbol{e}_j$ を, 第 j 成分のみが 1 であり, 他の成分は 0 であるベクトルとする. すなわち,

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \cdots, \quad \boldsymbol{e}_N = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

とする. このとき, $\{\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_N\}$ は明らかに一次独立である. しかし, $\mathbb{R}^N$ から $N+1$ 本の一次独立なベクトルを選びだすことはできない.

Example 3.2.17. 任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N$ に対して,

$$W = \{k\boldsymbol{x} : k \in \mathbb{R}\}$$

で定めた部分空間の次元は 1 である.

一次独立な $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$ $(N \geq 2)$ に対して,

$$W = \{k\boldsymbol{x} + \ell\boldsymbol{y} : k, \ell \in \mathbb{R}\}$$

で定めた部分空間の次元は 2 である.

Definition 3.2.18. 一般に, $\mathbb{R}^N$ の中で k 個の一次独立なベクトル $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_k$ $(k \leq N)$ をとり,

$$W = \{a_1\boldsymbol{x}_1 + \cdots + a_k\boldsymbol{x}_k : a_1, \ldots, a_k \in \mathbb{R}\}$$

と定めると, $\dim W = k$ であるような部分空間 W を定めることができる. これを $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_k$ で**張られる部分空間**と呼び,

$$W = \operatorname{span}\{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_k\}$$

と書く.

Definition 3.2.19 (基底). ベクトル空間またはその部分空間 V の次元が k であるとき, 一次独立な V のベクトル k 個からなる組を**基底**と呼ぶ. 数ベクトル空間 $\mathbb{R}^N$ において, Example 3.2.16 で定めた $\{\boldsymbol{e}_1, \ldots \boldsymbol{e}_N\}$ は基底となるが, これを特に $\mathbb{R}^N$ の**標準基底**と呼ぶ.

Remark 3.2.20. ベクトル空間 V の次元が k であるとは, V の中のベクトルは k 本からなる一次独立なベクトル（基底）の**一次結合**（それらのベクトルのスカラー倍の和）で表すことができることを意味する. つまり, V の一つの基底を $\{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_k\}$ と書くと, V の任意のベクトルは

$$\boldsymbol{x} = a_1\boldsymbol{x}_1 + \cdots + a_k\boldsymbol{x}_k$$

とかける. これは, V の元（ベクトル）は, N 個の「パラメータ」 $a_1, \ldots, a_N$ で書けるということであり, この意味で「次元」は「自由度」と考えても良い.

Example 3.2.21. $\mathbb{R}^2$ の基底としては, 標準基底 $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2\}$ が取れるのだが, そのほかにも無数の基底の取り方がある. 例えば, $\boldsymbol{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ の組は一次独立であるので, $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2\}$ は $\mathbb{R}^2$ の基底となる. そのほかにも, $\boldsymbol{y}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{y}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ の組は一次独立であるので, $\{\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2\}$ は $\mathbb{R}^2$ の基底となる.

Remark 3.2.22. Example 3.2.21 の第 1 の例の $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2\}$ は「直交している」ベクトルの組であるが, 第 2 の例の $\{\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2\}$ は「直交していない」ベクトルの組になっている. つまり, あるベクトルの組が基底であるか否かは, 互いに直交しているか否かとは関係のない概念であり, その組が一次独立な組か否かのみで判断する.

Remark 3.2.23. ここまでの議論で,「ベクトルが直交する」とか,「ベクトルのなす角度」という概念は登場していないことに注意してほしい. この後に,「ベクトルの長さ」という概念は登場するのだが,「ベクトルのなす角度」は, この話には登場しない.

Example 3.2.24. $\mathbb{R}^2$ のベクトルを異なる基底で書き下してみよう. 例えば, $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ は, 標準基底 $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2\}$ を使うと,

$$\boldsymbol{x} = 2\boldsymbol{e}_1 + 3\boldsymbol{e}_2$$

とあらわすことができる. 一方, Example 3.2.21 の $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2\}$ や $\{\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2\}$ を使えば,

$$\boldsymbol{x} = \frac{5}{2}\boldsymbol{x}_1 - \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_2 = -\boldsymbol{y}_1 + 3\boldsymbol{y}_2$$

とあらわされる.

★ ベクトルの長さ

後で使うことになるので, ベクトルの長さの測り方を考えておこう. 通常, 我々は, xy-平面の原点 $O:(0,0)$ を始点として, (x,y) へのベクトルの長さを

$$\sqrt{x^2+y^2}$$

と考えている. しかし, より一般的な「長さ」の概念と, 他のベクトルの長さの測り方を考えておいた方が都合がよい場合がある.

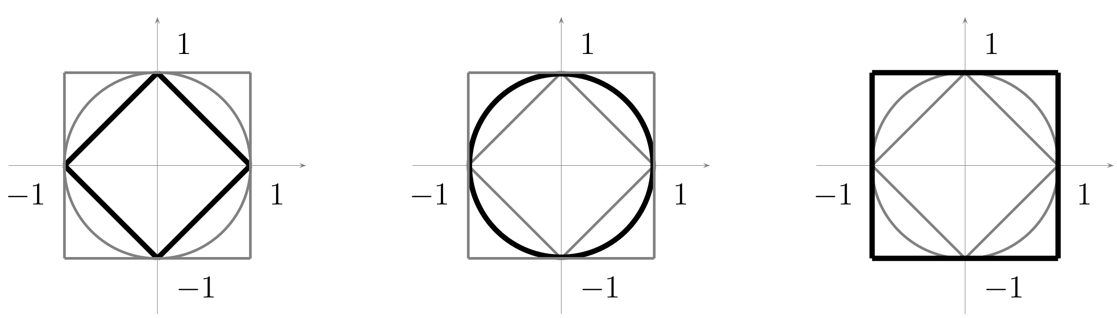
Definition 3.2.25 (**ベクトルのノルム**)**.** $\mathbb{R}^N$ のベクトル $\boldsymbol{x}$ のノルム $\|\boldsymbol{x}\|$ とは, 以下の条件をみたすものである.

1. $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^N$ に対して, $\|\boldsymbol{x}\|$ は非負実数をきめる.
2. $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^N$, $k\in\mathbb{R}$ に対して, $\|k\boldsymbol{x}\|=|k|\,\|\boldsymbol{x}\|$ が成り立つ.
3. $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^N$ に対して, $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|\leq\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|$ が成り立つ.
4. $\|\boldsymbol{x}\|=0\Longleftrightarrow\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ が成り立つ.

Example 3.2.26. $\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_N\end{pmatrix}$ に対して,

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{x}\|_1&=|x_1|+\cdots+|x_N|,\\ \|\boldsymbol{x}\|_2&=\sqrt{|x_1|^2+\cdots+|x_N|^2},\\ \|\boldsymbol{x}\|_\infty&=\max_{i=1,\ldots,N}|x_i|\end{aligned}$$

とおくと, これら 3 つはいずれもノルムとなる. これらのノルムでの「半径 1 の円」とは, 以下の図であらわされるものである.



$\|\boldsymbol{x}\|_1=1$ $\|\boldsymbol{x}\|_2=1$ $\|\boldsymbol{x}\|_\infty=1$

Proposition 3.2.27. 任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N$ に対して, 次が成り立つ.

$$\begin{aligned} &\|\boldsymbol{x}\|_1 \leq \|\boldsymbol{x}\|_2 \leq \|\boldsymbol{x}\|_\infty, \\ &\frac{1}{\sqrt{N}}\|\boldsymbol{x}\|_\infty \leq \|\boldsymbol{x}\|_2 \leq \sqrt{N}\|\boldsymbol{x}\|_1. \end{aligned}$$

特に, ベクトルの列 $\boldsymbol{x}_n$ が $\mathbf{0}$ に収束することの判定は, どのノルムで判定してもよい. すなわち,

$$\|\boldsymbol{x}_n\|_1 \to 0 \Longleftrightarrow \|\boldsymbol{x}_n\|_2 \to 0 \Longleftrightarrow \|\boldsymbol{x}_n\|_\infty \to 0$$

が成り立つ.

3.3 行列と連立一次方程式

Definition 3.3.1. N^2 個の実数 $a_{ij} \in \mathbb{R}$ を正方形に並べたもの

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{n2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix}$$

を $N \times N$ **行列**（または, N 次**正方行列**）と呼び, a_{ij} を $\boldsymbol{A}$ の (i, j) **成分**と呼ぶ. ベクトルの時と同様に, 簡単に $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ と書くこともある.

また, $N \times N$ 行列を列ベクトル（縦ベクトル）が N 個並んだものと考え, 前から k 列目の列ベクトルの部分を第 k 列と呼び, 行ベクトル（横ベクトル）が N 個並んだものと考え, 前から ℓ 行目の行ベクトルの部分を第 ℓ 行と呼ぶ.

Remark 3.3.2. $N \times N$ 行列は, N 個の $\mathbb{R}^N$ の列ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_N$ を並べたものとして,

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 \ldots \boldsymbol{a}_N \end{pmatrix}$$

と表すこともある. 同様に, N 個の（N 成分の）行ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_N$ を並べたものとして,

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_N \end{pmatrix}$$

と表すこともある.

Definition 3.3.3 (**特別な行列**)**.** $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ の a_{ii} となる部分を**対角成分**と呼ぶ. 対角成分がすべて 1 であり, その他の成分がすべて 0 である行列を

(N 次) 単位行列といい, $\boldsymbol{E}_N$ または $\boldsymbol{E}$ と書く. また, すべての成分が 0 である行列を零行列とよび, $\boldsymbol{O}$ と書く. すなわち,

$$\boldsymbol{E} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{O} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

である.

Definition 3.3.4 (行列の和・スカラー倍). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$, $\boldsymbol{B} = (b_{ij})$ に対して, その和 $\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}$ を

$$\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B} = (a_{ij} + b_{ij})$$

で定義する. また, $k \in \mathbb{R}$, $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ に対して, スカラー倍 $k\boldsymbol{A}$ を

$$k\boldsymbol{A} = (ka_{ij})$$

で定義する.

すなわち, 和とスカラー倍は, 成分ごとの和とスカラー倍である.

Definition 3.3.5 (ベクトルと行列の積). N 次元数ベクトル空間 $\mathbb{R}^N$ のベクトル（縦ベクトル） $\boldsymbol{x} = (x_i)$ と $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ の積 $\boldsymbol{Ax}$ を

$$\boldsymbol{Ax} = \left(\sum_{k=1}^{N} a_{ik} x_k \right)$$

で定義する. この結果は $\mathbb{R}^N$ の縦ベクトルである.

Definition 3.3.6 (行列の積). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$, $\boldsymbol{B} = (b_{ij})$ の積 $\boldsymbol{AB}$ を

$$\boldsymbol{AB} = \left(\sum_{k=1}^{N} a_{ik} b_{kj} \right)$$

で定義する. この結果は $N \times N$ 行列である.

Definition 3.3.7 (転置行列). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ に対して, その転置行列 $\boldsymbol{A}^T$ を

$$\boldsymbol{A}^T = (a_{ji})$$

で定義する. すなわち, $\boldsymbol{A}^T$ は $\boldsymbol{A}$ の行と列を入れ替えた行列となる.

Example 3.3.8. $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ のとき, $\boldsymbol{A}^T = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}$ である.

Remark 3.3.9. 同様に, $\mathbb{R}^N$ の縦ベクトル $\boldsymbol{x} = (x_i)$ に対して, $\boldsymbol{x}^T$ と書いたものは, 成分を横に並べたベクトルと考える. すると, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N$ に対して, ベクトルと行列の積 $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}$ を定義することができ, その結果は N 成分の横ベクトルとなる.

Example 3.3.10.

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} x & y \\ w & z \end{pmatrix}$$

とおいたとき,

$$\boldsymbol{AB} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x & y \\ w & z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax+bw & ay+bz \\ cx+dw & cy+dz \end{pmatrix},$$
$$\boldsymbol{BA} = \begin{pmatrix} x & y \\ w & z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax+cy & bx+dy \\ aw+cz & bw+dz \end{pmatrix}$$

となる. このことからわかるように, 一般には

$$\boldsymbol{AB} \neq \boldsymbol{BA}$$

となる.

Example 3.3.11. 例えば,

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$$

のとき,

$$\boldsymbol{AB} = \begin{pmatrix} 10 & 13 \\ 22 & 29 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{BA} = \begin{pmatrix} 11 & 16 \\ 19 & 28 \end{pmatrix}$$

となる.

Remark 3.3.12. $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$, $\boldsymbol{B} = (b_{ij})$ の積 $\boldsymbol{AB}$ の計算は $\boldsymbol{B}$ を $\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{b}_1 & \cdots & \boldsymbol{b}_N \end{pmatrix}$ と縦ベクトルが並んだものと考えたとき

$$\boldsymbol{AB} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{Ab}_1 & \cdots & \boldsymbol{Ab}_N \end{pmatrix}$$

として N 個の「行列×ベクトル」の計算をしていることに他ならない.

Example 3.3.13 (連立一次方程式)**.**

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

とおいたとき,

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax+by \\ cx+dy \end{pmatrix}$$

となる. このことから, $\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$ とおくと, 連立一次方程式

$$\begin{cases} ax+by = x_1, \\ cx+dy = y_1, \end{cases} \tag{3.1}$$

を

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

と書くことができる.

このように, 数ベクトル空間と行列を使うと, 連立一次方程式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ という簡単な形に書くことができた.

3.4 線形写像

Section 3.1 では, 連立一次方程式を解くためには, 「写像」を考えるほうがよいと述べた. また, Section 3.3 では, 行列を考えて, 連立一次方程式を簡単な形に書き下した. ここでは, 「線形写像」という写像を考えることで, 連立一次方程式を考察しよう.

Definition 3.4.1 (**線形写像**)**.** $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ が定める**線形写像**または**一次変換**とは,

$$\mathbb{R}^N \ni \boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N$$

のことである. この写像を $f_{\boldsymbol{A}}$ と書くことがある.

Proposition 3.4.2. 線形写像は次の性質を持つ.

1. $\boldsymbol{A}\mathbf{0} = \mathbf{0}$. すなわち, $\mathbf{0}$ は $\mathbf{0}$ にうつる.

2. 任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$, $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ に対して,

$$\boldsymbol{A}(\lambda\boldsymbol{x} + \mu\boldsymbol{y}) = \lambda\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \mu\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}$$

   が成り立つ. すなわち, 「ベクトルの一次結合のうつった先は, うつった先の一次結合」となる.

なお**一次結合**とは, 「一次独立なベクトルの組の定数倍の和」ということである.

Proof. 行列とベクトルの積の定義から, $\boldsymbol{A0} = \boldsymbol{0}$ は明らか. 後半の主張は, $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$, $\boldsymbol{x} = (x_i)$, $\boldsymbol{y} = (y_i)$ とおくと,

$$\lambda\boldsymbol{x} + \mu\boldsymbol{y} = (\lambda x_i + \mu y_i)$$

であるので,

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{A}(\lambda\boldsymbol{x} + \mu\boldsymbol{y}))_i &= \sum_{k=1}^{N} a_{ik}(\lambda x_k + \mu y_k) = \sum_{k=1}^{N} a_{ik}\lambda x_k + \sum_{k=1}^{N} a_{ik}\mu y_k \\ &= \lambda\sum_{k=1}^{N} a_{ik}x_k + \mu\sum_{k=1}^{N} a_{ik}y_k = \lambda(\boldsymbol{Ax})_i + \mu(\boldsymbol{Ay})_i\end{aligned}$$

となることからわかる. □

Example 3.4.3.

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$

のとき,

$$\boldsymbol{Ae}_1 = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{Ae}_2 = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix}$$

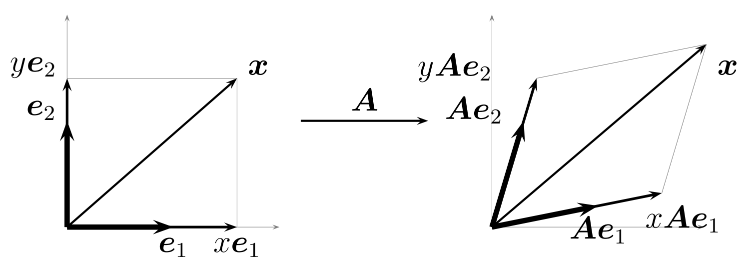
となる. よって,

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

とおくと,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{Ax} &= \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}(x\boldsymbol{e}_1 + y\boldsymbol{e}_2) = x\boldsymbol{Ae}_1 + y\boldsymbol{Ae}_2 \\ &= x\begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} + y\begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax + by \\ cx + dy \end{pmatrix}\end{aligned}$$

となる.



Example 3.4.4. より具体的に計算してみよう.

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$

のとき,

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

となるので,

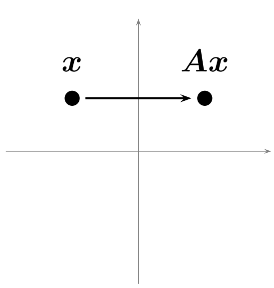
$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix} &= \boldsymbol{A}(2\boldsymbol{e}_1 + 3\boldsymbol{e}_2) = 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1 + 3\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2 \\ &= 2\begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} + 3\begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 18 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

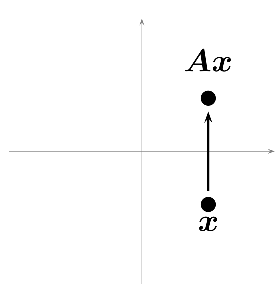
となる.

Remark 3.4.5. これらの例からわかる通り, 基底 $\{\boldsymbol{x}_i\}$ を取ったとき, 行列 $\boldsymbol{A}$ から定まる線形写像の行き先は, 基底の行き先 $\{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i\}$ で完全に記述できる.

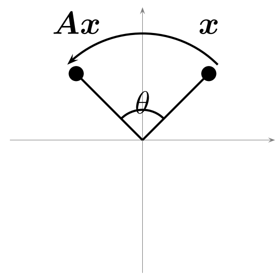
Remark 3.4.6. 単位行列 $\boldsymbol{E}$ に対しては $\boldsymbol{E}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$ が成り立つので, 単位行列が定める線形写像 $f_{\boldsymbol{E}}$ は $\mathbb{R}^N$ 上の恒等写像である. また, 零行列 $\boldsymbol{O}$ に対しては $\boldsymbol{O}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ が成り立つので, 零行列が定める線形写像 $f_{\boldsymbol{O}}$ は $\mathbb{R}^N$ のベクトルをすべて $\boldsymbol{0}$ にうつす写像（零写像）である.

Example 3.4.7. 行列 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ が定める線形写像は, $x \mapsto -x$, $y \mapsto y$ であるので, y 軸に関する折り返しである. また, $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ が定める線形写像は x 軸に関する折り返しである. 一般に, 原点を通る直線に関する折り返しは線形写像になる.





Example 3.4.8. 原点を中心とする角度 θ の回転は, 行列 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$ できまる線形写像である.



★ ★ ★

Definition 3.4.9 (逆行列). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ に対して,

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{E}$$

をみたす $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ が存在すれば, $\boldsymbol{A}^{-1}$ を $\boldsymbol{A}$ の**逆行列**と呼ぶ. $\boldsymbol{A}$ に逆行列が存在するとき, $\boldsymbol{A}$ は**正則**または**可逆**または**非特異**と呼ばれる.

Example 3.4.10. 実際に, 2×2 行列に対して, 逆行列を計算してみよう. $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ とおき, 逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ が存在すると仮定して, $\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix}$ とおく. このとき,

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax+bz & ay+bw \\ cx+dz & cy+dw \end{pmatrix}$$

であり, これが $\boldsymbol{E}$ に等しいので,

$$\begin{pmatrix} ax+bz & ay+bw \\ cx+dz & cy+dw \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

を (x, y, z, w) について解けばよい. すると, $ad - bc \neq 0$ ならば,

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix} = \frac{1}{ad-bc}\begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$$

となり, $ad - bc = 0$ の時には逆行列が存在しないことがわかる. なお, ここで求めた $\boldsymbol{A}^{-1}$ は $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{E}$ も満たすことが, 簡単な計算からわかる.

Example 3.4.11. $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$ の逆行列は $\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$ である. 一方, $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$ には $1 \times 4 - 2 \times 2 = 0$ であるので, 逆行列が存在しない.

Proposition 3.4.12. $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ が逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ を持つと仮定する. $\boldsymbol{A}$ が定める線形写像を $f_{\boldsymbol{A}}$, $\boldsymbol{A}^{-1}$ が定める線形写像を $f_{\boldsymbol{A}^{-1}}$ とおくと, 任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N$ に対して,

$$f_{\boldsymbol{A}}(f_{\boldsymbol{A}^{-1}}(\boldsymbol{x})) = f_{\boldsymbol{A}^{-1}}(f_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x})) = \boldsymbol{x}$$

が成り立つ. すなわち, $f_{\boldsymbol{A}}$ は逆写像 $f_{\boldsymbol{A}}^{-1}$ をもち, $f_{\boldsymbol{A}}^{-1} = f_{\boldsymbol{A}^{-1}}$ となる.

Proof. 逆行列の定義から

$$f_{\boldsymbol{A}}(f_{\boldsymbol{A}^{-1}}(\boldsymbol{x})) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{E}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$$

が成り立つ. □

Example 3.4.13 (連立一次方程式を解く). 連立一次方程式

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

が与えられたとき, もし $\boldsymbol{A}$ が逆行列を持つならば, 連立一次方程式の両辺に左から $\boldsymbol{A}^{-1}$ をかけると

$$\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b},$$
$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$$

となり, 解 $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ と書けることがわかる. 特に解はただひとつに限ることがわかる.

これを定理の形で述べれば以下の定理を得たことになる.

Theorem 3.4.14. $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ が逆行列を持てば, 連立一次方程式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ にはただひとつの解

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$$

が存在する.

Example 3.4.15. 連立一次方程式

$$\begin{cases} \ \ x + 2y = 3, \\ 3x + 4y = 4 \end{cases}$$

は,

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

と書くことができる. この行列には逆行列が存在するので,

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

となる.

Remark 3.4.16. ページランクを計算する際の連立一次方程式 (2.1) （または, (2.2), (2.3)）は,

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} \quad \text{または} \quad \boldsymbol{B}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$$

の形をしている. 前者の形の連立一次方程式は, 両辺に逆行列を左からかけても解を得ることはできない. 後者の場合には, 両辺に逆行列を左からかけると, $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ となってしまい, ページランキングベクトルを得ることができない.

したがって, ページランキングに関係する連立一次方程式を考察するためには, 線形写像に関するより詳しい情報を必要とする.

3.5 行列式

次に, 行列が逆行列を持つための条件を考えよう.

Theorem 3.5.1. 2×2 行列 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ については, 以下の 4 条件は同値である.

1. $\boldsymbol{A}$ が正則である. （$\boldsymbol{A}$ には逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ が存在する.）
2. $ad - bc \neq 0$ である.
3. $\boldsymbol{A}$ を 2 つの列ベクトル $\boldsymbol{a}_1 = \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{a}_2 = \begin{pmatrix} b \\ d \end{pmatrix}$ を使って $\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{a}_1 \boldsymbol{a}_2)$ と書いたとき, $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2\}$ が一次独立である.
4. $\boldsymbol{A}$ を 2 つの行ベクトル $\boldsymbol{a}_1 = \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{a}_2 = \begin{pmatrix} c & d \end{pmatrix}$ を使って $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 \end{pmatrix}$ と書いたとき, $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2\}$ が一次独立である.

Definition 3.5.2 (行列式). 2×2 行列 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ に対して, その**行列式** $\det \boldsymbol{A}$ を

$$\det \boldsymbol{A} = ad - bc$$

で定義する.

Remark 3.5.3. より一般に $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ に対しても $\det \boldsymbol{A}$ を定義できるが, 非常に複雑な式となる. 例えば, 3×3 行列の場合には,

$$\det \boldsymbol{A} = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32}$$

となり, 4×4 行列の場合には, a_{ij} に関する 4 次式の 24 項の和, $N \times N$ 行列の場合には, a_{ij} に関する N 次式の $N!$ 項の和となる.

Theorem 3.5.4. $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ に対して, 以下の 4 条件は同値である.

1. $\boldsymbol{A}$ が正則である. （$\boldsymbol{A}$ には逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ が存在する.）

2. $\det \boldsymbol{A} \neq 0$ である.

3. $\boldsymbol{A}$ を N 本の列ベクトル $\boldsymbol{a}_i = \begin{pmatrix} a_{1i} \\ \vdots \\ a_{Ni} \end{pmatrix}$ を使って $\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{a}_1 \ldots \boldsymbol{a}_N)$ と書いたとき, $\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_N\}$ が一次独立である.

4. $\boldsymbol{A}$ を N 本の行ベクトル $\boldsymbol{a}_j = \begin{pmatrix} a_{j1} & \cdots & a_{jN} \end{pmatrix}$ を使って $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_N \end{pmatrix}$ と書いたとき, $\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_N\}$ が一次独立である.

Remark 3.5.5. 逆に言えば, $\boldsymbol{A}$ を N 本の列ベクトル（または行ベクトル）で書いたとき, その列ベクトル（または行ベクトル）の組が一次独立でない時には, $\boldsymbol{A}$ は正則とはならない（逆行列は存在しない）.

Theorem 3.5.6. 行列式は以下の性質をみたす.

1. $\det \boldsymbol{E} = 1$

2. $(\det \boldsymbol{A})(\det \boldsymbol{B}) = (\det \boldsymbol{AB})$

3. $\boldsymbol{A}$ の第 i 列と第 j 列を入れ替えた行列を $\boldsymbol{A}_{(i,j)}$ と書くと, $\det \boldsymbol{A} = (-1)^{|i-j|} \det \boldsymbol{A}_{(i,j)}$ が成り立つ.

4. $\boldsymbol{A}$ の第 i 行と第 j 行を入れ替えた行列を $\boldsymbol{A}_{[i,j]}$ と書くと, $\det \boldsymbol{A} = (-1)^{|i-j|} \det \boldsymbol{A}_{[i,j]}$ が成り立つ.

5. $\boldsymbol{A}$ の行列式の値と $\boldsymbol{A}^T$ の行列式の値は等しい. すなわち $\det \boldsymbol{A} = \det \boldsymbol{A}^T$ が成り立つ.

Definition 3.5.7 (行列のランク). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ を N 本の列ベクトル $\{\boldsymbol{a}_k\}_{k=1}^N$ を使って $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_N \end{pmatrix}$ と書いたとき, $\{\boldsymbol{a}_k\}_{k=1}^N$ の中の一次独立なベクトルの本数の最大の値を $\boldsymbol{A}$ の**ランク**と呼び, $\operatorname{rank} \boldsymbol{A}$ であらわす.

ランクを使うと, 行列が正則であることの別の判定条件を得ることができる.

Theorem 3.5.8. $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ に対して, 以下の条件は同値である.

1. $\boldsymbol{A}$ が正則である. （$\boldsymbol{A}$ には逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ が存在する.）

2. $\operatorname{rank} \boldsymbol{A} = N$ である.

★ ★ ★

前節の例 (Example 3.4.3) で説明したように, $\mathbb{R}^N$ 上の線形写像は, 標準基底ベクトル $\boldsymbol{e}_j$ のうつる先 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_j$ で完全に決まる. また, 同じ例で説明した通り, $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_N\end{pmatrix}$ と書くと, $\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_j = \boldsymbol{a}_j$ が成り立つ. 従って, $\mathbb{R}^N$ を $\boldsymbol{A}$ でうつした像 $f_{\boldsymbol{A}}(\mathbb{R}^N)$ （これは, 明らかに $\mathbb{R}^N$ の線形部分空間になる）の次元は $\boldsymbol{A}$ のランクに等しいことがわかる.

ここで, $\operatorname{rank}\boldsymbol{A} < N$ である場合には, $f_{\boldsymbol{A}}(\mathbb{R}^N) \subset \mathbb{R}^N$ は真に部分集合となり, $\boldsymbol{b} \notin f_{\boldsymbol{A}}(\mathbb{R}^N)$ となるようなベクトルをとると, 連立一次方程式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解が存在しなくなることが想像できる.

逆に, $\operatorname{rank}\boldsymbol{A} < N$ であっても, $\boldsymbol{b} \in f_{\boldsymbol{A}}(\mathbb{R}^N)$ であるような $\boldsymbol{b}$ に対しては, 連立一次方程式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解が存在することが想像できる. しかし, この場合には, 解がただひとつに限るかは, この段階では定かではない.

これらのことを説明するために, 言葉を定義しておく.

Definition 3.5.9 (核・像). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ が定める線形写像 $f_{\boldsymbol{A}}$ に対して, $f_{\boldsymbol{A}}(\mathbb{R}^N)$ を $f_{\boldsymbol{A}}$ の像と呼び, $\operatorname{Im} f_{\boldsymbol{A}}$ または $\operatorname{Im}\boldsymbol{A}$ であらわす. また, 集合

$$\{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N : f_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}\} \quad \text{（これは } \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N : \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}\} \text{ と書いてもよい）}$$

を $f_{\boldsymbol{A}}$ の核と呼び, $\ker f_{\boldsymbol{A}}$ または $\ker\boldsymbol{A}$ であらわす.

Remark 3.5.10. $\ker\boldsymbol{A}$ は $\mathbb{R}^N$ の線形部分空間となるので, $\ker\boldsymbol{A}$ の「次元」を定めることができる.

Theorem 3.5.11. *$N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ に対して, 次が成り立つ.*

1. $\dim\operatorname{Im}\boldsymbol{A} = \operatorname{rank}\boldsymbol{A}$,
2. $N - \dim\ker\boldsymbol{A} = \dim\operatorname{Im}\boldsymbol{A}$. （「次元定理」と呼ばれる.）
3. $\det\boldsymbol{A} \neq 0$ ならば $\dim\operatorname{Im}\boldsymbol{A} = N$, $\dim\ker\boldsymbol{A} = 0$.

次元定理の証明の概略. $\operatorname{rank}\boldsymbol{A} = r$ とおいたとき, ある正則行列 $\boldsymbol{T}$ が存在して,

$$\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{E} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}$$

となることを証明する. ここで, 左上の単位行列は $r \times r$ 単位行列である. 右辺の行列のランクは r であり, 核の次元は $N - r$ であることは明らかである. 一方, 正則行列によって部分空間の次元は変わらないので, $\dim\operatorname{Im}\boldsymbol{A} = r$, $\dim\ker\boldsymbol{A} = N - r$ であることがわかる. □

Proposition 3.5.12. $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2 \in \mathbb{R}^N$ に対して,

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_2$$

ならば,

$$\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2 \in \ker \boldsymbol{A}$$

となる.

Proof. 仮定 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_2$ から $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2) = \boldsymbol{0}$ が成り立つ. よって, $\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2 \in \ker \boldsymbol{A}$ となる. □

Theorem 3.5.13 (連立一次方程式の可解性). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ によって決まる連立一次方程式

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

の可解性は以下のように分類される.

1. $\boldsymbol{A}$ が正則ならば, 任意の $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^N$ に対して, ただひとつの解 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ が存在する.

2. $\boldsymbol{A}$ が正則でないとき.

   (a) $\boldsymbol{b} \notin \mathrm{Im}\, \boldsymbol{A}$ ならば, 解は存在しない.

   (b) $\boldsymbol{b} \in \mathrm{Im}\, \boldsymbol{A}$ ならば, 解が存在する. 一つの解を $\boldsymbol{x}_0$ とおいたとき, 任意の $\boldsymbol{y} \in \ker \boldsymbol{A}$ に対して,

   $$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{y}$$

   も解となり, 任意の 2 解の差は $\ker \boldsymbol{A}$ に入る.

Corollary 3.5.14 (2×2 行列の場合). 連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$$

の可解性は以下のように分類される.

1. $\det \boldsymbol{A} = ad - bc \neq 0$ ならば, 任意の $\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$ に対して, ただひとつの解

   $$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

   が存在する.

2. $ad - bc = 0$ であるとき,

(a) $\begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$ が平行でないならば, すなわち, $ay_1 - cx_1 \neq 0$ ならば, 解は存在しない.

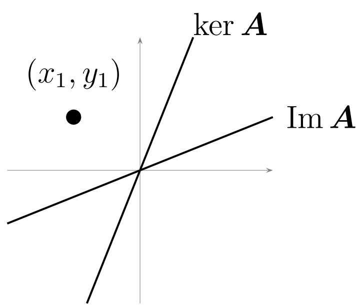
(b) $ay_1 - cx_1 = 0$ の時に, 解 $\boldsymbol{x}_0$ が一つでも見つかれば, その他の解 $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 + k \begin{pmatrix} b \\ -a \end{pmatrix}$ となる.

Proof. Theorem 3.5.13 の結果を使えばよい. 証明すべきことは, $\det \boldsymbol{A} = 0$ の時,

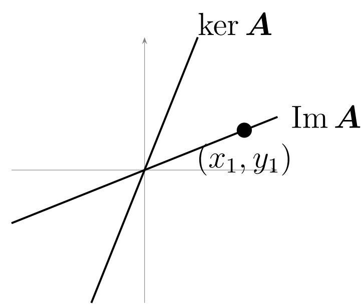
$$\operatorname{Im} \boldsymbol{A} = \operatorname{span} \left\{ \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} \right\}, \quad \ker \boldsymbol{A} = \operatorname{span} \left\{ \begin{pmatrix} b \\ -a \end{pmatrix} \right\}$$

となることである.

いま, $\det \boldsymbol{A} = 0$ であり, $\boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{0}$ であることから, $\operatorname{rank} \boldsymbol{A} = 1$ であり, $\boldsymbol{A}$ の第 1 列のベクトルと第 2 列のベクトルは平行である. よって, $\operatorname{Im} \boldsymbol{A}$ は第 1 列のベクトル $\begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix}$ で張られる部分空間となる. 一方, 次元定理から $\dim \ker \boldsymbol{A} = 1$ であるので, $\boldsymbol{A}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}$ となるベクトル $\boldsymbol{a}$ を一つ見つければよいが, $\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} b \\ -a \end{pmatrix}$ は, ($ad - bc = 0$ を使うと) $\boldsymbol{A}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}$ をみたすことがわかる. よって, $\ker \boldsymbol{A}$ は $\boldsymbol{a}$ で張られる部分空間となる. □



このような時には解は存在しない

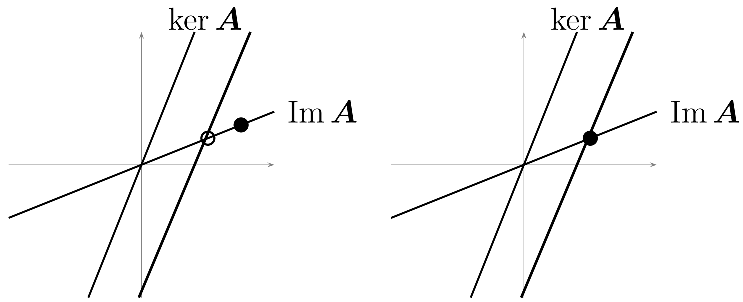


このような時には解は存在する

この右図の状況の時, $ad - bc = 0$ を使えば,

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} = (a + d) \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix}$$

であることから, $\operatorname{Im} \boldsymbol{A}$ をあらわす直線上の点は $a + d$ 倍される. したがって, 下左図の黒が (x_1, y_1) であるとき, それを $a + d$ 倍した点（白）を通り, $\ker \boldsymbol{A}$ に平行な直線上の点すべてが解となる.



$a+d \neq 1$ の時 (cf. Example 3.5.15)　　$a+d=1$ の時 (cf. Example 3.5.16)

Example 3.5.15. 連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

の解がどうなるかを調べてみよう．この連立一次方程式の行列の行列式は 0 であって,

$$\ker \boldsymbol{A} = \operatorname{span}\left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \right\}, \quad \operatorname{Im} \boldsymbol{A} = \operatorname{span}\left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right\}$$

となっている．したがって, $\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \in \operatorname{Im} \boldsymbol{A}$ の時, すなわち $a=-b$ の時にのみ解を持ち, 解 $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} a \\ -a \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$ とあらわすことができる. $\ker \boldsymbol{A}$ を表している直線 $2x+y=0$ に平行で, $(a,-a)$ を通る直線を表している．特に $a=0$ の時,

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

の $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ でない解が存在する．

Example 3.5.16. 今度は, 連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

とおくと, やはり, この連立一次方程式の行列の行列式は 0 であり,

$$\ker \boldsymbol{A} = \operatorname{span}\left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} \right\}, \quad \operatorname{Im} \boldsymbol{A} = \operatorname{span}\left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

となっている．したがって, $\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \in \operatorname{Im} \boldsymbol{A}$ の時, すなわち $a = b$ の時にのみ解を持ち, 解 $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{x} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} a \\ a \end{pmatrix} + t\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$ とあらわすことができる．$\ker \boldsymbol{A}$ を表している直線 $2x + y = 0$ に平行で, $(a/3, a/3)$ を通る直線を表している．ここで, 前の Example との違いは, 通過する $\operatorname{Im} \boldsymbol{A}$ 上の点が, 前の Example では $\boldsymbol{b}$ そのものであったが, 今回は $(1/3)\boldsymbol{b}$ となっていることであるが, これは, この線形写像が $\operatorname{Im} \boldsymbol{A}$ 方向のベクトルを 3 倍（$a + d$ 倍）する写像となっていることに起因している．（cf. Section 3.6.)

ここまでで, 最初に述べた連立一次方程式が解けるか否かに関しては, 明確な解答を得ることができた. しかし, 依然としてページランキングに関する連立一次方程式 (2.1) を解ける状況にはない. それを解くには, 次の「固有値と固有ベクトル」に関する議論が必要となる.

★ 行列式の値の意味

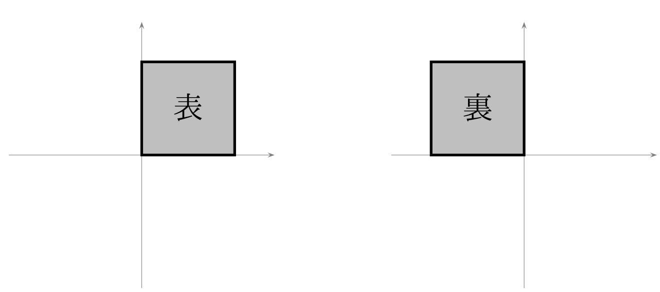
「固有値と固有ベクトル」に進む前に, 行列式の値が何を意味するのかを調べておこう.

Theorem 3.5.17 (行列式の値の意味). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ の定める線形写像 $f_{\boldsymbol{A}}$ によって $\mathbb{R}^N$ 内の図形 S の「体積」 $V(S)$ と S を $f_{\boldsymbol{A}}$ によってうつした図形 $S' = f_{\boldsymbol{A}}(S)$ の体積 $V(S')$ の間には

$$V(S') = (\det \boldsymbol{A})V(S)$$

の関係が成り立つ.

ここで, $\det \boldsymbol{A} < 0$ となる場合の「体積」(「面積」）の意味を考えてみよう. $\det \boldsymbol{A} < 0$ となる典型的な行列は Example 3.4.7 の y 軸に関する折り返し $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ である.



この図のように, 行列式の値が負になるとは, 「図形が裏返しになっている」ことを表す.

3.6 固有値と固有ベクトル

ページランキングに関する連立一次方程式 (2.1) は,

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$$

という形をしている. ここでは, この形の連立一次方程式について考察しよう.

Definition 3.6.1 (固有値と固有ベクトル). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ に対して, ある $\lambda \in \mathbb{R}$ と $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^N$ ($\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$) が存在して

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x} \tag{3.2}$$

が成り立つとき, λ を $\boldsymbol{A}$ の**固有値**, $\boldsymbol{x}$ を, 固有値 λ に対する**固有ベクトル**と呼ぶ.

Remark 3.6.2. もし, $\boldsymbol{x}$ が固有値 λ に対する固有ベクトルであれば, 任意の $k \in \mathbb{R}$ に対して,

$$\boldsymbol{A}(k\boldsymbol{x}) = k\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = k(\lambda\boldsymbol{x}) = \lambda(k\boldsymbol{x})$$

であることから, $k\boldsymbol{x}$ も固有ベクトルとなる. したがって, ある固有値に対する固有ベクトルには, 向きや定数倍の自由度があり, 個々の固有ベクトルを取り出すのではなく, 「固有方向」だけを問題にすることが多い.

Remark 3.6.3. 方程式 (3.2) $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$ を成り立たせるような λ を, わざわざ「$\boldsymbol{A}$ の固有値」と言っているのだから, 勝手な λ を取ってきたとき, $\boldsymbol{0}$ でない $\boldsymbol{x}$ が存在するわけでなない. つまり, $\boldsymbol{A}$ をきめると, 「特別な値 λ」がみつかり, その λ に限って (3.2) が成り立つような $\boldsymbol{x}$ が見つかると言っていることに注意してほしい.

ここでは, $\boldsymbol{A}$ の固有値をどのように求めるかを考えてみよう. いま $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{E}\boldsymbol{x}$ なので, (3.2) の λ を t と書き換えて,

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = t\boldsymbol{E}\boldsymbol{x}$$

と書くことができる. これを移項してまとめれば,

$$(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \tag{3.3}$$

となる. もし, $\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E}$ が正則であれば, (3.3) の両辺に左から $(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E})^{-1}$ をかけることにより,

$$\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E})^{-1}\boldsymbol{0} = \boldsymbol{0}$$

が成り立つ. ここで, 固有ベクトルは $\boldsymbol{0}$ ではないと仮定したので, これは矛盾である. つまり, $\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E}$ は逆行列を持たないことがわかる. したがって,

$$\det(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E}) = 0 \tag{3.4}$$

が成り立つ. ここで, Remark 3.5.3 で述べたように, $N \times N$ 行列に対する行列式は N 次式となるので, (3.4) は t に関する N 次多項式となることがわかる. すなわち, λ が $\boldsymbol{A}$ の固有値であることの必要十分条件は, t に関する N 次方程式 (3.4) の解となることである. ここまでの議論を議論をまとめれば, 次のようになる.

Theorem 3.6.4. λ が $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ の固有値であることの必要十分条件は, λ が t に関する N 次方程式

$$\det(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E}) = 0$$

の解であることである.

Theorem 3.6.5 (代数学の基本定理). 複素数を係数とする N 次方程式

$$t^N + a_{N-1}t^{N-1} + \cdots + a_1 t + a_0 = 0$$

は, 複素数の範囲で重複をこめて N 個の解を持つ

Remark 3.6.6. 代数学の基本定理とあわせて考えれば, 実数係数 $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ の固有値は, 複素数の範囲に, 重複をこめて N 個存在する.

Example 3.6.7.

1. $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ の時,

$$\det(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E}) = \det \begin{pmatrix} 1-t & 2 \\ 2 & 1-t \end{pmatrix} = t^2 - 2t - 3 = (t+1)(t-3)$$

であるので, $\boldsymbol{A}$ の固有値は $-1, 3$ である.

2. $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ の時,

$$\det(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E}) = \det \begin{pmatrix} 1-t & -2 \\ 2 & 1-t \end{pmatrix} = t^2 - 2t + 5$$

であるので, $\boldsymbol{A}$ の固有値は $1+2i, 1-2i$ である. このように, $\boldsymbol{A}$ が実数係数の行列であっても, 固有値には複素数が出てくることがある.

3. 一般の 2×2 行列 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ に対しては,

$$\det(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E}) = \det \begin{pmatrix} a-t & b \\ c & d-t \end{pmatrix} = t^2 - (a+d)t + (ad-bc)$$

となるので, 2 つの固有値を λ_1, λ_2 と書けば, 解の係数の関係から,

$$\lambda_1\lambda_2 = ad - bc = \det \boldsymbol{A}, \quad \lambda_1 + \lambda_2 = a + c = \operatorname{trace} \boldsymbol{A}$$

が成り立つ. より一般の $N \times N$ 行列に対して, $\det \boldsymbol{A}$ はすべての固有値の積に等しく, $\operatorname{trace} \boldsymbol{A}$ はすべての固有値の和に等しい.

4. $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}$ の時,

$$\det(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E}) = -t^3 + 9t^2 - 24t + 16 = -(t-1)(t-4)^2$$

であるので, $\boldsymbol{A}$ の固有値は 4, 4, 1 である. このように, 同じ固有値が複数出てくることがある.

Definition 3.6.8. $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ に対して, N 次多項式 $\det(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E})$ を $\boldsymbol{A}$ の**固有多項式**と呼ぶ. また, $\boldsymbol{A}$ の固有値 λ の**重複度**が k であるとは, λ が固有多項式の k 重根（$k = 1$ の時には, 単根）となっていることをいう. すなわち, $\lambda_1, \ldots, \lambda_j$ を $\boldsymbol{A}$ の相異なる固有値としたとき,

$$\det(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E}) = (t - \lambda_1)^{k_1} \cdots (t - \lambda_j)^{k_j}$$

と因数分解できたとしたときの $t - \lambda_i$ の巾が λ_i の重複度となる.

次に, 固有値がわかったとして, 固有ベクトルをどのように求めるかを考えよう. 固有ベクトルを求めるには, 得られた固有値 λ を使って,

$$(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{E})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

をみたす $\boldsymbol{x}$ を求めればよい. すなわち, $\ker(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{E})$ に入るベクトルを, $\dim\ker(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{E})$ 本求めればよい. なお, 一般には次が成り立つ.

Proposition 3.6.9. λ が $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ の固有値であり, その重複度を k としたとき,

$$\dim\ker(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{E}) \leq k$$

が成り立つ.

Example 3.6.10.

1. $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ の時, 固有値は $\{-1, 3\}$ である.

$$\boldsymbol{A} + \boldsymbol{E} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$$

であるので, $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ とおけば,

$$2x + 2y = 0$$

が成り立つ. すなわち, $\lambda = -1$ に対する固有ベクトルとして, $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ を得ることができる. 同様にして, $\lambda = 3$ に対する固有ベクトルは $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ であることがわかる.

2. $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ の時, 固有値は $\{1+2i, 1-2i\}$ である.

$$\boldsymbol{A} - (1+2i)\boldsymbol{E} = \begin{pmatrix} -2i & -2 \\ 2 & -2i \end{pmatrix}$$

であるので, $\lambda = 1+2i$ に対する固有ベクトルとして, $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}$ を得ることができる. 同様に, $\lambda = 1-2i$ に対する固有ベクトルとして, $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix}$ を得ることができる. このように, $\boldsymbol{A}$ が固有値が複素数である場合には, 固有ベクトルも複素数を係数とするベクトルが出てくる.

3. 一般の 2×2 行列の場合は, 簡単に固有ベクトルを求めることができる. いま, $\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix}$ の時, $\ker \boldsymbol{X} = \operatorname{span}\left\{ \begin{pmatrix} z \\ -x \end{pmatrix} \right\}$ である. よって, $\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{E}$ の第 1 列のベクトルの成分を入れ替えて, 片方だけ符号を反転させたものが固有ベクトルとなる.

4. $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}$ の時, 固有値は $\{1, 4\}$ であり, $\lambda = 1$ に対する固有ベクトルは, $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\lambda = 4$ に対する固有ベクトルは, $\boldsymbol{x}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{x}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ の 2 本となる. このように, 固有値の重複度が k $(k \geq 2)$ の時には, 一次独立な k 本の固有ベクトルが出てくる場合がある.

5. しかし, 固有値の重複度が k であっても, その固有値に対する一次独立な固有ベクトルが k 本存在しないことがある.

   例えば, $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$ とおくと, 固有値は $\{2, 3\}$ であり, $\lambda = 3$ は重複度

2 の固有値である. しかし, $\lambda = 3$ に対する固有ベクトルは, $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ の 1 本のみである.

Proposition 3.6.11 (固有ベクトルの求め方). $\boldsymbol{A}$ の固有値 λ に対する固有ベクトルを求めるには, $\ker(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{E})$ に含まれる $\mathbf{0}$ でないベクトルを求めればよい. 固有値 λ の重複度が k の時, その固有値に対する一次独立な固有ベクトルの数は 1 以上 k 以下である.

Theorem 3.6.12 (固有値の性質). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ の固有値に関しては, 次の性質が成り立つ.

1. $\boldsymbol{A}$ の固有値と転置行列 $\boldsymbol{A}^T$ の固有値は一致する.

2. 任意の正則行列 $\boldsymbol{T}$ に対して, $\boldsymbol{A}$ の固有値と $\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}$ の固有値は一致する.

Proof. $\boldsymbol{A}$ の固有値は, 固有多項式 $\det(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E})$ の根であることが定義であった.

1. 一般に $N \times N$ 行列の行列式とその転置行列の行列式は一致するので,

$$\det(\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E}) = \det((\boldsymbol{A} - t\boldsymbol{E})^T) = \det(\boldsymbol{A}^T - t\boldsymbol{E})$$

   が成り立つ. よって, $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{A}^T$ の固有値は一致する.

2. $\boldsymbol{T}$ が正則であることから $\det \boldsymbol{T} \neq 0$ である. また, $\det(\boldsymbol{T})\det(\boldsymbol{T}^{-1}) = \det(\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{-1}) = \det \boldsymbol{E} = 1$ であることから, $\det \boldsymbol{T} = 1/\det \boldsymbol{T}^{-1}$ が成り立つ. よって,

$$\det(\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}) = (\det \boldsymbol{T}^{-1})(\det \boldsymbol{A})(\det \boldsymbol{T}) = (\det \boldsymbol{T}^{-1})(\det \boldsymbol{T})(\det \boldsymbol{A}) = (\det \boldsymbol{A})$$

   となるので, $\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}$ の固有多項式と $\boldsymbol{A}$ の固有多項式は一致し, それぞれの固有値は一致する.

□

Remark 3.6.13. 数値計算の世界では, ここで定義した固有ベクトルを**左固有ベクトル**と呼び,

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A} = \lambda\boldsymbol{x}^T$$

をみたす $\boldsymbol{x}^T$ を**右固有ベクトル**と呼ぶことがある. しかし,

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A} = \lambda\boldsymbol{x}^T \Longleftrightarrow \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$$

であるので, 右固有ベクトルとは, $\boldsymbol{A}^T$ の固有ベクトルに他ならない. 特に右固有ベクトルを考えたときの固有値と, 左固有ベクトルを考えたときの固有値は一致する. (でも... 通常, 数学ではこのような用語を使うことはない.)

ここまでの議論から, ページランキングに関する連立一次方程式

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{x} \tag{2.1}$$

の解を求める問題（ページランキングを求める問題）は, 次の問題に帰着できたことがわかる.

Problem 3.6.14. ウェブデータ全体のリンク構造をあらわすグラフから作った行列 $\boldsymbol{A}$ に関して,

1. $\boldsymbol{A}$ は固有値 1 を持つか？
2. もし, $\boldsymbol{A}$ が固有値 1 を持った場合の固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ をどうやって求めるか？
3. その固有ベクトルの成分は正の値を持つようにできるか？

これまでに計算した例をみればわかる通り, 行列 $\boldsymbol{A}$ は, 一般には固有値 1 を持つわけではない. 従って, 「グラフから作った行列」という特殊な状況を反映させる必要がある. また, 固有値がわかれば, 固有ベクトルは「原理的には計算可能」であるが, ウェブページのリンクを表すグラフから作った行列は, 非常に巨大なサイズを持つと想像できるので, 固有ベクトルを単純に計算可能かどうかは定かではない. さらに, ページランキングは, 何らかの「確率」を表すものであったので, ページランキングと思われる固有ベクトルの成分がすべて正であることは最低必要である. しかしながら, 一般にはそのようなことが成り立つとは到底考えられない. これも, 「グラフから作った行列」という特殊な状況を反映させる必要があると思われる.

次の章では, 「ウェブデータ全体のリンクあらわすグラフから使った行列」を再度きちんと定義して, その特殊な状況に関しての考察を行う.

3.7 固有値と固有ベクトルの意味

大学の線形代数の授業の一つの大きな到達点が「固有値と固有ベクトル」に関する議論である. そこで, 先に進む前に, 本論からは外れるのだが, 「なぜ, 固有値・固有ベクトルを求めるのか？」を考えておこう.

高校の行列の問題の中に, 以下のようなタイプのものが見つかる.

Example 3.7.1. $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ -2 & 0 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$ としたとき, $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{AT}$ を求め, それを利用して $\boldsymbol{A}^n$ を求めよ.

この問題は, $\boldsymbol{B}$ を計算すると, $\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ となるので, $\boldsymbol{B}^n = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2^n \end{pmatrix}$ となることと,

$$\boldsymbol{A}^n = (\boldsymbol{TBT}^{-1})^n = \boldsymbol{TBT}^{-1}\boldsymbol{TB}\cdots\boldsymbol{BT}^{-1} = \boldsymbol{TB}^n\boldsymbol{T}^{-1}$$

が成り立つことを使って, $\boldsymbol{A}^n$ を計算させる問題である.
　試しに, $\boldsymbol{A}$ の固有値と固有ベクトルを計算してみると,

$$\lambda_1 = 1 \quad \boldsymbol{x}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix},$$
$$\lambda_2 = 2 \quad \boldsymbol{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

となり, $\boldsymbol{B}$ の対角成分には固有値が並び, $\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$ と固有ベクトルが並んでいることがわかる.

　実際, 固有値・固有ベクトルが「うれしい状況」をみたすときには, 次の定理が成り立つ.

Theorem 3.7.2 (行列の対角化). 複素係数 $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ の各固有値に対する固有ベクトルで, 一次独立なものが重複度と同じだけ存在するとき, 正則行列 $\boldsymbol{T}$ として, すべての固有ベクトルを並べたものとおくと,

$$\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_N \end{pmatrix}$$

が成り立つ.

　この定理の仮定が少々分かりにくいのだが, もっとも簡単な場合を考えると次のように書くことができる.

Corollary 3.7.3. 実数係数 $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ のすべての固有値が実数であり, それらの固有値が相異なると仮定する. また, 固有値 λ_i に対する固有ベクトルを $\boldsymbol{x}_i$ とおく. このとき,

$$\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 \cdots \boldsymbol{x}_N \end{pmatrix}$$

とおくと,

$$\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_N \end{pmatrix}$$

が成り立つ.

　このような操作は「行列の対角化」と呼ばれるのだが, いつでも対角化が可能なわけではない. 例えば, $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -2 & -1 \end{pmatrix}$ は対角化できない.

行列の N 乗を求めることは, それ自身重要なことであるが, 「行列の対角化」は, より深い意味を持っている.

簡単のため 2×2 で考え, 対角行列 $\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix}$ があらわす線形写像（一次変換) を考えてみる（ただし $\lambda_1\neq\lambda_2$ と仮定する）と, 標準基底 $\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$ を考えたとき, $\boldsymbol{e}_1$ 方向（x 方向）を λ_1 倍し, $\boldsymbol{e}_2$ 方向（y 方向）を λ_2 倍する変換に他ならない. したがって,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_1&=\lambda_1\boldsymbol{e}_1,\\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{e}_2&=\lambda_2\boldsymbol{e}_2,\end{aligned}$$

が成り立つ.

一方, 2×2 行列 $\boldsymbol{A}$ が固有値 λ_1, λ_2 をもち, λ_1 に関する固有ベクトルを $\boldsymbol{a}_1$, λ_2 に関する固有ベクトルを $\boldsymbol{a}_2$ とおくと,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\boldsymbol{a}_1&=\lambda_1\boldsymbol{a}_1,\\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{a}_2&=\lambda_2\boldsymbol{a}_2,\end{aligned}\tag{3.5}$$

が成り立つ. そこで, $\boldsymbol{T}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a} & \boldsymbol{b}\end{pmatrix}$ とおけば (3.5) は

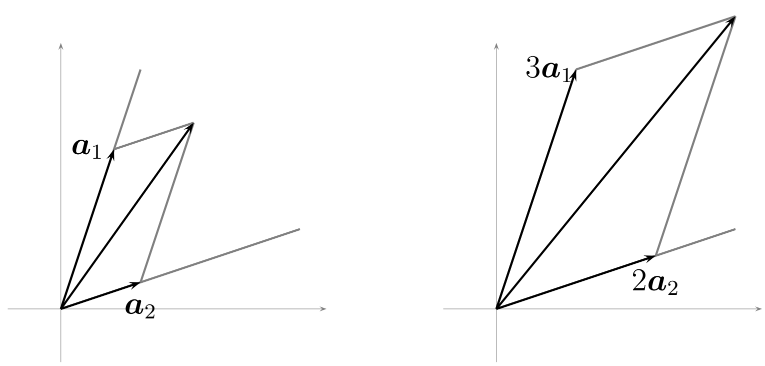
$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}=\boldsymbol{T}\boldsymbol{L}$$

と書くことができる. この式は, 対角化の式

$$\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}=\boldsymbol{L}$$

に他ならない.

一方, (3.5) は, 「固有値 λ_i の固有ベクトル方向は λ_i 倍する」ことを意味しているので, $\mathbb{R}^2$ の基底として, 固有ベクトルからなる基底 $\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2\}$ を取れば, $\boldsymbol{A}$ がきめる線形写像は「基底の方向には固有値倍する線形写像」であることがわかる.



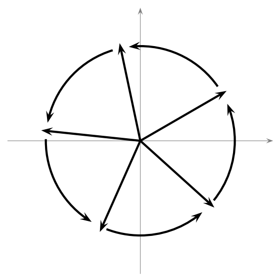
★ ★ ★

固有値が相異なる実数の時には, ここで見たような描像で問題ないのだが, 次のような例はどうなるだろうか？

Example 3.7.4. Example 3.4.8 でみた「原点を中心とする角度 θ の回転」をあらわす線形写像 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}$ の固有値を計算すると, その固有多項式は

$$(t-\cos\theta)^2+\sin^2\theta=t^2-2t\cos\theta+1$$

となり, 固有値は $\cos\theta\pm i\sin\theta=e^{\pm i\theta}$ となる. つまり, 2×2 行列で固有値 $e^{\pm i\theta}$ となる場合は, 原点を中心とする角度 θ の回転となることがわかる. これを言い換えれば, 「固有値として $e^{\pm i\theta}$ が出てくるときには, 原点を中心として『クルクル』と回転している」線形写像となる.



3.8 固有値を計算する方法

$N\times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ を「ぱっと」みただけで（暗算でも何でも計算せずに）固有値を知ることは難しい. そのようなことが可能なのは, 以下の 2 つの場合だけである.

1. $\boldsymbol{A}$ が対角行列の時. このときは, 対角成分が固有値となる.

2. $\boldsymbol{A}$ が

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} * & * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & \ddots & \cdots & \cdots & * \\ \vdots & & * & \cdots & * \\ 0 & \cdots & & \ddots & * \\ 0 & \cdots & \cdots & & * \end{pmatrix}$$

   の形（上三角行列）または下三角行列の時. このときも, 対角成分が固有値となる.

これ以外の場合には, 固有多項式 $\det(\boldsymbol{A}-t\boldsymbol{E})$ の根を計算することが必要となるが, 一般に 5 次以上の多項式に関しては「解の公式」が存在しないため, 行列のサイズが大きいときに一般的に固有値を計算することは非常に難しい.

そのためコンピュータを使って「近似的に固有値を計算する」ことが広く行われているが, その中でもっとも簡単な方法を紹介する.

Theorem 3.8.1 (**絶対値最大固有値を計算するベキ乗法**)**.** $\boldsymbol{A}$ の固有値 $\{\lambda_i\}_{i=1}^N$ が

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_N|$$

をみたしていると仮定する. このとき,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{y}_{k+1} &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k, \\ \boldsymbol{x}_{k+1} &= \frac{1}{\|\boldsymbol{y}_{k+1}\|}\boldsymbol{y}_{k+1} \end{aligned}$$

によって, 繰り返し $\boldsymbol{x}_k$ を計算すると, ほとんどすべての初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ に対して, $\boldsymbol{x}_N$ は絶対値最大固有値 λ_1 に対する固有ベクトルに収束する.

この定理は, 「絶対値最大固有値がただひとつに限る」という条件の下でしか使うことができない. この方法によって λ_1 に対する固有ベクトルが出てくるのは, 前ページの図で考えれば（まあ）明らかである. つまり, $\boldsymbol{y}_{n+1}$ の長さを 1 にしていることにより, 「もっとも拡大率の大きな方向」のみが残ってくることになる.

Remark 3.8.2. この定理 (Theorem 3.8.1) で「ほとんどすべての初期ベクトル」という意味は, 「初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ が絶対値最大固有値に対する固有ベクトルの成分を持つ」という意味である.

一方, 行列の要素から固有値が存在する範囲をある程度絞り込むことができる.

Theorem 3.8.3 (**ガーシュゴリンの定理**)**.** $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ に対して,

$$B_i = \{z \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{j=1, j\neq i}^{N} |a_{ij}|\}$$

とおく. （複素数平面で, 中心を a_{ii}, 半径を $\displaystyle\sum_{j=1,j\neq i}^{N} |a_{ij}|$ とする円の周囲と内部である.）このとき, $\boldsymbol{A}$ のすべての固有値 λ は, N 個の円盤 B_i のいずれかに含まれる.

Proof. $\boldsymbol{A}$ の固有値 $\lambda \in \mathbb{C}$ に対する固有ベクトルを $\boldsymbol{x} = (x_j) \in \mathbb{C}^N$ とおく. さらに, $\boldsymbol{x}$ の成分の中で絶対値がもっとも大きい成分を x_i とおく. このとき, i 列に注目すると,

$$\sum_{j=1}^{N} a_{ij}x_j = \lambda x_i$$

が成り立つので,

$$\lambda - a_{ii} = \sum_{j=1, i\neq j}^{N} a_{ij}\frac{x_j}{x_i}$$

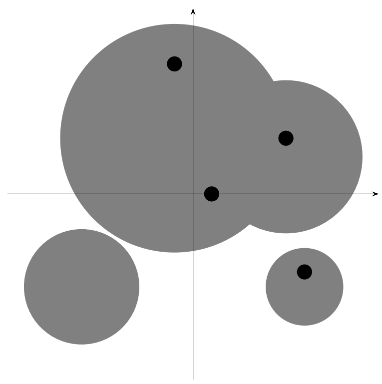
が成り立つ. この両辺の（複素数としての）絶対値を取れば,

$$|\lambda - a_{ii}| = \left| \sum_{j=1, i\neq j}^{N} a_{ij} \frac{x_j}{x_i} \right| \leq \sum_{j=1, i\neq j}^{N} |a_{ij}| \left| \frac{x_j}{x_i} \right|$$

が成り立つ. いま, x_i は $\{x_j\}_{j=1}^{N}$ の中で絶対値最大のものを選んだので, $|x_j/x_i| \leq 1$ が成り立つ. よって

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{j=1, i\neq j}^{N} |a_{ij}| \left| \frac{x_j}{x_i} \right| \leq \sum_{j=1, i\neq j}^{N} |a_{ij}|$$

が成り立つ. □



いくつかの円盤のいずれかに固有値が入る.
一つも固有値が入らない円盤があるかもしれない.

この定理を, すべての要素が非負の行列に適用すると, 次の定理を得る.

Theorem 3.8.4. $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ のすべての要素が非負 $(a_{ij} \geq 0)$ であるとき, $\boldsymbol{A}$ の固有値 $\lambda \in \mathbb{C}$ は

$$|\lambda| \leq \max_{i=1,\ldots,N} \sum_{j=1}^{N} a_{ij}$$

をみたす.

Proof. $\boldsymbol{A}$ の固有値 λ をひとつとると, ガーシュゴリンの定理より, ある i が存在して,

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{j=1, i\neq j}^{N} |a_{ij}|$$

が成り立つ. 一方, 三角不等式から

$$|\lambda| - |a_{ii}| \leq |\lambda - a_{ii}|,$$
$$|a_{ii}| - |\lambda| \leq |\lambda - a_{ii}|,$$

が成り立つ. よって,

$$-\sum_{j=1,i\neq j}^{N}|a_{ij}| \leq |\lambda| - |a_{ii}| \leq \sum_{j=1,i\neq j}^{N}|a_{ij}|$$

がなりたつ. これを書き換えると

$$-\sum_{j=1}^{N}|a_{ij}| \leq |\lambda| \leq \sum_{j=1}^{N}|a_{ij}|$$

となるが, $a_{ij} \geq 0$, $|\lambda| \geq 0$ であることから

$$|\lambda| \leq \sum_{j=1}^{N} a_{ij}$$

となる. 最初に「ガーシュゴリンの定理が成り立つような i」を取ってきたので,

$$|\lambda| \leq \max_{i=1,\ldots,N}\sum_{j=1}^{N} a_{ij}$$

が成り立つことになる. □

4　グラフ上のランダムウォーク

ここでは, インターネットのウェブページ全体のなすリンク構造を数学的に表現するために, 有向グラフを定義し, その上でのランダムウォークと呼ばれる確率的な概念を説明する.

4.1　グラフと行列

グラフとは, 「頂点」(または「ノード」) と呼ばれる点と, 2 つの頂点を結ぶ「辺」の組で表される数学的な概念である. ここでの目的は, グラフを数学的にきちんと定義し, 数学的に取り扱うことが簡単にするための方法を説明する.

Definition 4.1.1 (**グラフ**)**.** 2 つの有限集合 V, E が与えられ, 集合 E の各元 $e \in E$ に対して, 2 つの V の元 $o(e), t(e) \in V$ が決まる時, $G = (V, E)$ は**グラフ**であるという. このとき, V の元を**頂点**と呼び, E の元を**辺**と呼ぶ. また, $o(e)$ を辺 e の**始点**, $t(e)$ を**終点**と呼ぶ. さらに, $v \in V$ に対して,

$$
\begin{aligned}
V_v &= \{u \in V : o(e) = v, t(e) = u \text{ となる } e \in E \text{ が存在する }\} \\
&= \{v \text{ を始点とする辺の終点の集合}\} \\
&= \{\text{ ページ } v \text{ からのリンク先のページの集合}\} \\
B_v &= \{u \in V : t(e) = v, o(e) = u \text{ となる } e \in E \text{ が存在する }\} \\
&= \{v \text{ を終点とする辺の始点の集合}\} \\
&= \{\text{ ページ } v \text{ へリンクしているページの集合}\} \\
|v| &= \sharp V_v = \text{ページ } v \text{ から出ていくリンクの数}
\end{aligned}
$$

と定義する.

Remark 4.1.2. この定義では, V, E は有限集合と仮定したので, グラフの頂点数と辺の数は有限個となる. このようなグラフを**有限グラフ**呼ぶ.

Remark 4.1.3. グラフの各辺には始点・終点が決まっていることから, 辺には「向き」がついていると考えることができる. グラフ $G = (V, E)$ の辺 $e \in E$ に対して, $o(\overline{e}) = t(e)$, $o(\overline{e}) = t(e)$ とした辺を, **向きを逆にした辺**と呼ぶ.

任意の $e \in E$ に対して $\overline{e} \in E$ が成り立つグラフを**無向グラフ**と呼ぶ. これと対比するために, 上の定義のグラフを**有向グラフ**と呼ぶこともある.

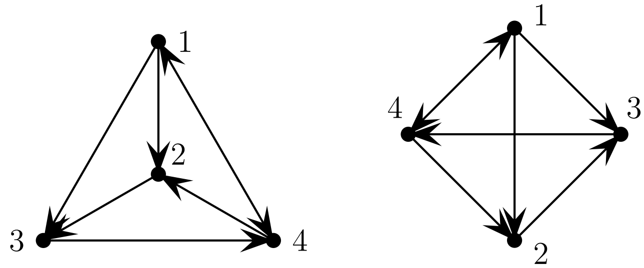
このように, グラフは抽象的に定義された概念であるが, グラフを考える際には,「図で描いて考える」ことと, 「数学的に扱いやすい道具であらわす」ということを行う. 「図で描いて考える」という意味では, グラフとは,

1. 必要な数の頂点を描いて,

2. 与えられた辺の情報をもとに, 頂点の間を矢印で結ぶ.

という操作をすればよい. このときに, 「矢印で結ぶ」という操作を, 単に「線で結ぶ」と置き換えて出てくるのが無向グラフである. したがって, 無向グラフとは, 有向グラフの辺の向きを忘れたものと考えればよい.

なお, 今回の話では, 始点と終点が同じ頂点であるような「自己ループ」は考えるが, 同じ始点と終点を持つ辺（このような辺を「多重辺」と呼ぶ）はただひとつに限ることを仮定する.



この 2 つのグラフは同一のグラフである

しかし, このままでは, グラフは極めて抽象的に定義されたものか, 図に表したものに過ぎないので, 数学として取り扱うことが非常に難しい. そこで, 次のようにグラフを行列で扱うことを考える.

Definition 4.1.4 (**グラフの隣接行列**)**.** グラフ $G = (V, E)$ に対して, 以下の方法で作った $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}_G$ をグラフ G の**隣接行列**と呼ぶ. ただし, N は集合 V の要素の数とする.

1. 頂点の集合 V の元に, 番号 $1, \dots, N$ をつける. （つける順序は勝手につけて良い.）

2. $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}_G$ を, 各辺 $e \in E$ に対して, $o(e) = i$, $t(e) = j$ であれば $a_{ji} = 1$ とおき, そのような辺がないときには, $a_{ji} = 0$ とおく.

Example 4.1.5. 上の図のグラフ G の場合, 頂点数は 4 であり, 上の図のように頂点に番号がついている場合,

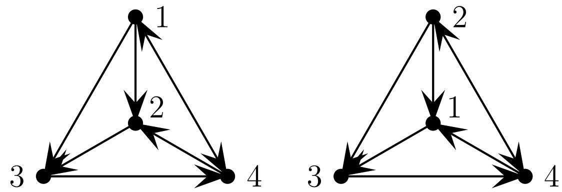
$$1 \to 2, \quad 1 \to 3, \quad 1 \to 4, \quad 2 \to 3, \quad 3 \to 4, \quad 4 \to 1, \quad 4 \to 2$$

の 7 本の辺がある. （図では 6 本のように見えるが, 1 と 4 の間には両方向の矢印がついている.）よって, 隣接行列 $\boldsymbol{A}_G$ は

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

となる.

Example 4.1.6. もし, 頂点の番号をつけ変えたらどうなるかを試してみよう. 左のグラフ G_1 は, 上と同じグラフであり, 右のグラフ G_2 は, 頂点番号 1 と 2 をつけかえたものである.



それぞれの隣接行列は,

$$\boldsymbol{A}_{G_1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}_{G_2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

となり, 同じ行列にはならない. しかし,

$$\boldsymbol{D}_{1,2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

とおいて, $\boldsymbol{D}_{1,2}\boldsymbol{A}_{G_2}\boldsymbol{D}_{1,2}$ を計算すると,

$$\boldsymbol{D}_{1,2}\boldsymbol{A}_{G_2}\boldsymbol{D}_{1,2} = \boldsymbol{A}_{G_1}$$

が成り立つ. また, 簡単な計算から $\boldsymbol{D}_{1,2}\boldsymbol{D}_{1,2} = \boldsymbol{E}$ が成り立つので,

$$\boldsymbol{D}_{1,2}^{-1}\boldsymbol{A}_{G_2}\boldsymbol{D}_{1,2} = \boldsymbol{A}_{G_1}$$

という関係が成り立っていることがわかる.

なお, $\boldsymbol{D}_{1,2}$ を左から行列 $\boldsymbol{A}$ にかけると, $\boldsymbol{A}$ の 1 行目と 2 行目を入れ替えることになり, 右から行列 $\boldsymbol{A}$ にかけると, $\boldsymbol{A}$ の 1 列目と 2 列目を入れ替えることになる.

このように, グラフの隣接行列は, 抽象的に定義されたグラフを数学的に取り扱うことを簡単にするための書き換えであり, 隣接行列の中には, グラフの抽象的なデータがすべて含まれている. したがって, 要素が 0 または 1 からなる $N \times N$ 行列を一つ与えれば, それをグラフと思うことができる. (出来上がりの形はともかくとして, グラフの図を描くことができる.)

4.2 グラフの連結性

次に, グラフに対して「連結」という概念を考えよう.
はじめに, グラフの辺をつなげた「路」および「有向路」という概念を定義する.

Definition 4.2.1. グラフ $G=(V,E)$ の辺の集合 E に対して,

$$\overline{E}=\{\overline{e}:e\in E\}=[G\text{ のすべての辺を逆向きにした辺の全体の集合}]$$

とおく. このとき, G の 2 頂点 $x,\, y\in V$ をつなぐ**路**とは, $E\cup\overline{E}$ 元の順序つきの集合 $\{e_1,\dots,e_k\}$ で,

$$x=o(e_1),\quad t(e_1)=o(e_2),\quad \cdots\quad t(e_{k-1})=o(e_k),\quad t(e_k)=y$$

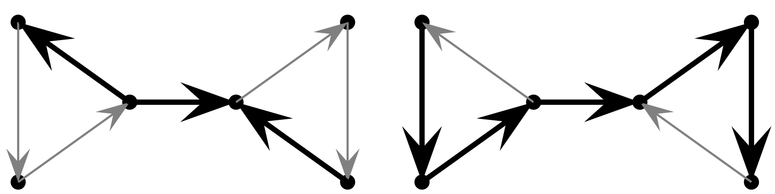
となるものである.
また, G の 2 頂点 $x,\, y$ をつなぐ**有向路**とは, E 元の順序つきの集合 $\{e_1,\dots,e_k\}$ で,

$$x=o(e_1),\quad t(e_1)=o(e_2),\quad \cdots\quad t(e_{k-1})=o(e_k),\quad t(e_k)=y$$

となるものである.

要するに, 「路」とは, $x,\, y$ を向きを無視した辺でつないだものであり, 「有向路」とは $x,\, y$ を向きがついた辺でつないだものである.

Example 4.2.2.



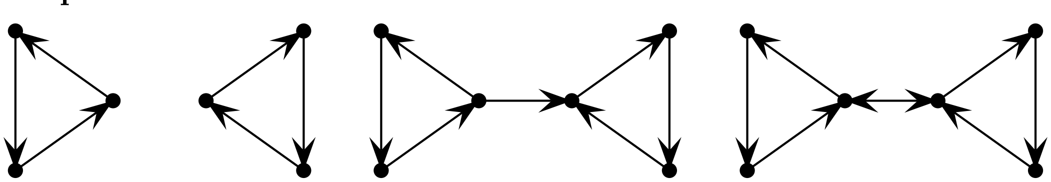
路だが有向路ではない　　　有向路

Definition 4.2.3 (**グラフの連結性**)**.** グラフ $G=(V,E)$ の任意の頂点 $x,\, y\in V$ を結ぶ路が存在するとき, G は**連結**であるという. グラフ $G=(V,E)$ の任意の頂点 $x,\, y\in V$ を結ぶ有向路が存在するとき, G は**強連結**であるという.

Proposition 4.2.4. グラフ $G=(V,E)$ が強連結ならば連結である.

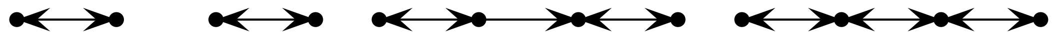
Proof. 図を考えれば明らかなのだが, $x,\, y\in V$ を結ぶ有向路があれば, それは路になることからわかる. □

Example 4.2.5.



連結でない　　　連結だが強連結でない　　　強連結

Example 4.2.6. 以下の 3 つのグラフ G_1, G_2, G_3 の連結性を, 隣接行列を使って調べてみよう.



G_1 $\qquad$ G_2 $\qquad$ G_3

まず, 無向グラフとしての隣接行列は, （頂点番号を左から $1, \ldots, 4$ とすると）

$$\boldsymbol{A}_{G_1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}_{G_2} = \boldsymbol{A}_{G_3} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

となる. 試しに, これらの隣接行列の 2 乗・3 乗などを計算してみると,

$$\boldsymbol{A}_{G_1}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}_{G_2}^2 = \boldsymbol{A}_{G_3}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{A}_{G_1}^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}_{G_2}^3 = \boldsymbol{A}_{G_3}^3 = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix},$$

となる. 特に,

$$\boldsymbol{A}_{G_1} + \boldsymbol{A}_{G_1}^2 + \boldsymbol{A}_{G_1}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{A}_{G_2} + \boldsymbol{A}_{G_2}^2 + \boldsymbol{A}_{G_2}^3 = \boldsymbol{A}_{G_3} + \boldsymbol{A}_{G_3}^2 + \boldsymbol{A}_{G_3}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 1 & 1 \\ 3 & 2 & 4 & 1 \\ 1 & 4 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

次に, G_2, G_3 に対して, 有向グラフとしての隣接行列とその 2 乗・3 乗を計算してみる. G_3 は, すべての辺が両方に向いているので, 有向グラフとして考えても, 無

向グラフとして考えても同じである. よって, G_2 に関してのみ計算すればよく,

$$\boldsymbol{A}_{G_2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}_{G_2}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}_{G_2}^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{A}_{G_2} + \boldsymbol{A}_{G_2}^2 + \boldsymbol{A}_{G_2}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

となる.

この例から, 次の定理が成り立つことが予想できる.

Theorem 4.2.7 (グラフの連結性の判定条件). グラフ $G = (V, E)$ に対応する無向グラフ G_n の隣接行列 $\boldsymbol{A}_{G_n}$ に対して,

$$\boldsymbol{A}_{G_n} + \boldsymbol{A}_{G_n}^2 + \cdots + \boldsymbol{A}_{G_n}^{N-1}$$

のすべての成分が正であることと, G が連結であることは同値である. ただし, N は G の頂点数である. また, G の隣接行列 $\boldsymbol{A}$ に対して,

$$\boldsymbol{A}_G + \boldsymbol{A}_G^2 + \cdots + \boldsymbol{A}_G^{N-1}$$

のすべての成分が正であることと, G が強連結であることは同値である.

この例に出てきた $\boldsymbol{A}_{G_1}+\boldsymbol{A}_{G_1}^2+\boldsymbol{A}_{G_1}^3$, $\boldsymbol{A}_{G_1}$, 有向グラフとしての $\boldsymbol{A}_{G_2}+\boldsymbol{A}_{G_2}^2+\boldsymbol{A}_{G_2}^3$, $\boldsymbol{A}_{G_2}$ などをよくみてみると, それらの行列は $\begin{pmatrix} A & O \\ B & C \end{pmatrix}$ という形に区分できていることがわかる.

Definition 4.2.8. $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{X}$ が, $\begin{pmatrix} A & O \\ B & C \end{pmatrix}$ の形に区分できるとき, $\boldsymbol{X}$ は可約であるとよばれる. $\boldsymbol{X}$ は可約でないとき既約と呼ばれる.

Example 4.2.9.

$$\boldsymbol{A}_{G_1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A}_{G_2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

は, ともに可約である.

よって Theorem 4.2.7 によりもわかりやすい (?) 連結性の判定条件を見つけることができる.

Theorem 4.2.10 (**グラフの連結性の判定条件**). *グラフ G が連結であるための必要十分条件は, G の頂点の番号をどのようにつけたとしても, G に対応する無向グラフ G_n の隣接行列 $\boldsymbol{A}_{G_n}$ が既約になることである.*

グラフ G が強連結であるための必要十分条件は, G の頂点の番号をどのようにつけたとしても, G の隣接行列 $\boldsymbol{A}_G$ が既約になることである.

証明の方針. Theorem 4.2.10 の主張は, その対偶を示すことで得ることができる. つまり, G の頂点のある番号付けがあって, 隣接行列 $\boldsymbol{A}_G$ が可約になるとき, G は（強）連結でないこと（とその逆）を示すのが易しい. □

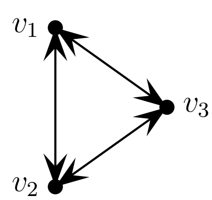
Remark 4.2.11. Theorem 4.2.7 による連結性の判定は, 隣接行列の k 乗を順に計算していく必要があるため, 計算が大変であるし, Theorem 4.2.10 による連結性の判定は, 「どんな番号付けに対しても隣接行列が既約」を示すのは, 結構大変である. これらの定理は「数学的な主張」であって, 「アルゴリズム的」(「計算機科学的」と言ってもよい）には, 「深さ優先探索」という手法を使って連結性を比較的高速に判定できる.

4.3 ランダムウォーク

ここでは, グラフの上をランダム（でたらめ）に動く点の動きを考えよう. はじめに, 簡単な例を使って「ランダムに動く」という意味を考える.

以下では, 考えるグラフは全て強連結と仮定する.

Example 4.3.1. 下の図で表されるグラフを考える.



時刻 $t = n$ で粒子がいる頂点 v_i にいるとき, $t = n + 1$ にはその頂点を始点とする辺を使って, 他の頂点に移動すると考える. その際, どの頂点に移動するかは, 頂点 v_i を始点とする辺を等確率で選択すると仮定する.

例えば, 時刻 0 で粒子が頂点 v_1 にあったと仮定する. 頂点 v_1 を始点とする辺は $v_1 \to v_2$, $v_1 \to v_3$ の 2 つであるので, それぞれを選択する確率は 1/2 である. つまり, 時刻 1 では, 粒子が頂点 v_2 にいる確率が 1/2, 頂点 v_3 にいる確率が 1/2 となる.

このとき,

1. 長時間経過したとき, それぞれの頂点に粒子がいる確率を求める. このグラフの場合には, 明らかに 1/3 づつになると想像できる.

2. その確率は, 時刻 0 での粒子がいる頂点の位置に依存するかを調べる.

という問題が考えられる[1].

ここでは, このような粒子の動きを考える「ランダムウォーク」について考察しよう.

再び Example 4.3.1 のグラフで考える. 時刻 $t=n$ で粒子が頂点 v_i にいる確率を $p(n,i)$ とおくと,

$$\begin{pmatrix} p(n+1,1) \\ p(n+1,2) \\ p(n+1,3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(n,1) \\ p(n,2) \\ p(n,3) \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

と書くことができる. ここで, ベクトル $\boldsymbol{\pi}(n)$ と行列 $\boldsymbol{P}_G$ を

$$\boldsymbol{P}_G = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\pi}(n) = \begin{pmatrix} p(n,1) \\ p(n,2) \\ p(n,3) \end{pmatrix}$$

と書けば, (4.1) は

$$\boldsymbol{\pi}(n+1) = \boldsymbol{P}_G \boldsymbol{\pi}(n) \tag{4.2}$$

と書くことができ, ベクトル $\boldsymbol{\pi}(n)$ は, 時刻 $t=n$ で粒子が各頂点にいる確率をあらわしていると考えることができる.

このような状況をきちんと述べるためにいくつかの言葉を用意しよう[2]

Definition 4.3.2 (確率分布)**.** $\mathbb{R}^N$ のベクトル $\boldsymbol{\pi} = (p_i)$ が

$$p_1 + \cdots + p_N = 1, \quad 0 \le p_i \le 1$$

をみたすとき, $\boldsymbol{\pi}$ を**確率ベクトル**または**確率分布**と呼ぶ.

Definition 4.3.3 (確率過程)**.** 定められたルールにしたがって, 確率分布が時間ごとに変化していく時, そのルールを**確率過程**と呼ぶ.

Definition 4.3.4 (確率行列)**.** $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{P}$ が**確率行列**であるとは, $\boldsymbol{P}$ を N 本の列ベクトルを使って $\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_N \end{pmatrix}$ と書いたとき, すべての列ベクトル $\boldsymbol{p}_i$ が確率ベクトルであることをいう. すなわち, $\boldsymbol{P}$ の成分はすべて 0 以上 1 以下であり, 縦に足した値が 1 になることに他ならない.

[1] まあ, このグラフの場合には, 容易に想像がつくように, 時刻 0 での粒子の位置に依存せず, 長時間経過したとき, それぞれの頂点にいる確率は 1/3 づつになると想像できるのだが....

[2] 本当にきちんと定義するには, 確率論の用語を数多く用意する必要があるので, ここでは, それらを多少ゴマかした言葉で逃げることにする. したがって, 以下の定義は, 厳密には正しい定義ではなく, ランダムウォークを簡単に説明するためだけのものである.

このとき, 次が成り立つ.

Proposition 4.3.5. 確率分布 $\boldsymbol{\pi}$ を確率行列 $\boldsymbol{P}$ に対して $\boldsymbol{P}\boldsymbol{\pi}$ は確率分布となる.

Example 4.3.6. Example 4.3.1 のグラフ上を粒子が移動していく時に, 時刻 $t = n$ で粒子が各頂点にいる確率をあらわすベクトル $\boldsymbol{\pi}(n)$ は, 初期状態 $\boldsymbol{\pi}(0)$ が確率分布であるならば, すべての n について $\boldsymbol{\pi}(n)$ も確率分布となる. また, この確率分布は, (4.1) または (4.2) というルールにしたがって変化していて, (4.2) によって与えられた確率過程である.

ここで考えた確率過程の中で特別なものがランダムウォークである.

Definition 4.3.7 (**グラフ上の単純ランダムウォーク**)**.** グラフ $G = (V, E)$ に対して, 行列 $\boldsymbol{P}_G$ を次のように定める. 頂点 v_i を始点とする辺の数が $|B_{v_i}|$ 本であり, 頂点 v_i から v_j へ向かう辺が存在するとき, $\boldsymbol{P}_G$ の (j, i) 成分を $1/|B_{v_i}|$ とし, そのような辺が無い場合には, (j, i) 成分を 0 と定める. この行列を $\boldsymbol{P}_G$ を使って,

$$p(n+1, j) = \frac{1}{|v_j|} \sum_{v_i \in B(v_j)} p(n, i) \tag{4.3}$$

または（同じ式を行列の形で書いただけ）

$$\boldsymbol{\pi}(n+1) = \boldsymbol{P}_G \boldsymbol{\pi}(n) \tag{4.4}$$

と定められた確率過程を, グラフ G 上の**単純ランダムウォーク**と呼ぶ. また, ここで定義した行列 $\boldsymbol{P}_G$ を, グラフ G の**推移確率行列**と呼ぶ.

Remark 4.3.8. ランダムウォークの定義で, 注意してほしいのは以下の点である.

1. 時刻 n の取りうる値は $\mathbb{N}_{\geq 0} = \{0, 1, \ldots, k, \ldots\}$ という非負整数値である. つまり, 「最初から数えて第 k ステップ」のことを「時刻 k」と呼んでいる.

2. 明らかに $\boldsymbol{P}_G$ は確率行列であり, $\boldsymbol{\pi}(0)$ が確率分布であれば, Proposition 4.3.5 から, すべての n に対して $\boldsymbol{\pi}(n)$ も確率分布となる.

Example 4.3.9. Example 4.3.1 のグラフの場合の確率推移行列は

$$\boldsymbol{P}_G = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$$

となる. また, 時刻 0 で v_1 にいると仮定して, 時刻 $t = n$ での各頂点にいる確率を求めるということは,

$$\boldsymbol{\pi}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ときめて, $\boldsymbol{\pi}(n+1) = \boldsymbol{P}_G\boldsymbol{\pi}(n)$ によってきまる $\boldsymbol{\pi}(n)$ を求めるということに他ならない.

また, Example 4.3.1 のグラフから $v_1 \to v_2$ の辺を取り除いたグラフの確率推移行列は,

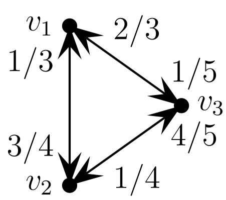
$$\boldsymbol{P}_G = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1/2 \\ 1 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$$

となる.

この例とグラフの隣接行列・推移確率行列の定義から, 次は明らかであろう

Proposition 4.3.10. グラフ G の隣接行列 $\boldsymbol{A}_G$ と, 推移確率行列 $\boldsymbol{P}_G$ との 0 でない値をもつ要素の位置は一致する.

Example 4.3.11. 単純ランダムウォークは, ある頂点から他の頂点へ移動する確率が等確率であると仮定している. 一般には, どの辺を選択して移動するかの確率は等確率でなくても良い. 例えば,



$$P(v_1 \to v_2) = \frac{1}{3} \quad P(v_1 \to v_3) = \frac{2}{3}$$
$$P(v_2 \to v_3) = \frac{1}{4} \quad P(v_2 \to v_1) = \frac{3}{4}$$
$$P(v_3 \to v_1) = \frac{1}{5} \quad P(v_3 \to v_2) = \frac{4}{5}$$

と定めてもかまわない. このときの推移確率行列は

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

となる. この $\boldsymbol{P}$ を用いて $\boldsymbol{\pi}(t+1) = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\pi}(t)$ と定めた確率過程はグラフ G 上の単純ランダムウォークの拡張版と見なすことができる.

逆に, 勝手に確率行列を与えたらどうなるかを考えてみよう.

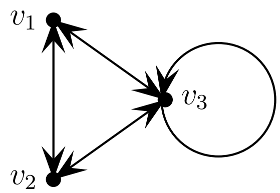
Example 4.3.12. 確率行列 $\boldsymbol{P}$ を

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

とおく. このとき, $\boldsymbol{P}$ の 0 でない要素をすべて 1 に置き換えた行列を $\boldsymbol{A}$ とおくと,

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

となる. このとき, $\boldsymbol{A}$ は正方行列であって, すべての要素が 0 または 1 であるので, $\boldsymbol{A}$ を隣接行列とするようなグラフ $G = (V, E)$ を考えることができる.



ちょっと分かりにくいが, 隣接行列の $(3, 3)$ 成分が 1 であるので, $v_3 \to v_3$ となる自己ループを持つグラフである. したがって $\boldsymbol{P}$ は, このグラフ上のランダムウォークをきめていると考えることができる.

Definition 4.3.13 (**グラフ上のランダムウォーク**)**.** $N \times N$ 確率行列 $\boldsymbol{P}$ を与えたとき,

$$\boldsymbol{\pi}(n+1) = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\pi}(n)$$

で決まる確率過程を**ランダムウォーク**と呼ぶ. このランダムウォークは $\boldsymbol{P}$ の 0 でない要素をすべて 1 に置き換えて作られる行列 $\boldsymbol{A}$ を隣接行列にもつグラフ G を考えることにより, グラフ上のランダムウォークとも呼ばれる. このとき, $\boldsymbol{P}$ を G 上の**推移確率行列**と呼ぶ.

Remark 4.3.14. この定義から, 「グラフ G を元にして, 推移確率行列 $\boldsymbol{P}$ を定義して, ランダムウォークを定義すること」と, 「確率行列 $\boldsymbol{P}$ を元にして, グラフ G をつくって, ランダムウォークを定義すること」は同じことと考えることができる. このとき, グラフ G が「強連結」であることは, 推移確率行列 $\boldsymbol{P}$ が「既約」であることと言い換えればよい.

Definition 4.3.15.

1. ランダムウォークの場合, ある時刻の分布 $\boldsymbol{\pi}(n)$ は, 直前の時刻の分布 $\boldsymbol{\pi}(n-1)$ にしか依存せず, それ以前の分布情報には依存していない. このような確率過程を**マルコフ過程**と呼ぶ.

2. 確率行列 $\boldsymbol{P}$ によって定められるランダムウォーク

$$\boldsymbol{\pi}(n+1) = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\pi}(n)$$

の $t=0$ での確率分布 $\boldsymbol{\pi}(0)$ を**初期分布**と呼ぶ. ランダムウォークは, 初期分布を与えるごとに, 時刻 $t=n$ での確率分布は

$$\boldsymbol{\pi}(n) = \boldsymbol{P}^n \boldsymbol{\pi}(0)$$

で完全に決定できる.

3. 確率行列 $\boldsymbol{P}$ によって定められるランダムウォークで,

$$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\pi}$$

をみたす確率分布を**不変分布**と呼び, $\boldsymbol{\pi}_\infty$ と書くことにする.

Remark 4.3.16. この定義から明らかなように, 確率推移行列 $\boldsymbol{P}$ によって定められるランダムウォークの不変分布は, $\boldsymbol{P}$ の固有値 1 に対する固有ベクトルであって, 確率ベクトルとなるものである. よって, ランダムウォークが不変分布を持つことを証明するためには, 確率推移行列 $\boldsymbol{P}$ が固有値 1 を持ち, その固有ベクトルとして確率ベクトルとなるものが取れることを示す必要がある.

★ ページランクとの関係

Section 2.2 の Definition 2.2.1 で考えたページランクは, ウェブデータ全体のリンク構造から決まるグラフ G 上の単純ランダムウォークを考えていることに他ならない. Section 2.2 の式 (2.4) は,

$$\boldsymbol{\pi}(n+1) = \boldsymbol{P}_G \boldsymbol{\pi}(n)$$

そのものであり, ページランクとは, そのランダムウォークに対する不変分布に他ならない.

したがって, ページランクを求める問題は, 次の問題に帰着できたことがわかる.（cf. Problem 3.6.14.）

Problem 4.3.17. ウェブデータ全体のリンク構造をあらわすグラフから決まるランダムウォークは不変分布を持つか？もし, 不変分布を持ったとき, 任意の初期分布に $\boldsymbol{\pi}(0)$ に対して,

$$\boldsymbol{\pi}_\infty = \lim_{t\to\infty} \boldsymbol{\pi}(t)$$

が成り立つか？

また, この問題の後半（極限と不変分布の一致）は, 次のように言い換えてもよい.

Problem 4.3.18. ウェブデータ全体のリンク構造をあらわすグラフから決まるランダムウォークの推移確率行列 $\boldsymbol{P}$ は, 任意の初期分布に $\boldsymbol{\pi}(0)$ に対して,

$$\boldsymbol{\pi}_\infty = \lim_{n\to\infty} \boldsymbol{P}^n \boldsymbol{\pi}(0)$$

をみたすか？（cf. Theorem 3.8.1.）

4.4 ペロン・フロベニウスの定理

前節の Problem 4.3.17 は, ある特殊なタイプの行列が固有値 1 を持つか否かを調べるという問題であった. それに対する解答として, ペロン・フロベニウスの定理を紹介する.

Definition 4.4.1 (非負行列・正行列). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ のすべての要素が $a_{ij} > 0$ であるとき, $\boldsymbol{A}$ は**正行列**と呼ばれる.

また, すべての要素が $a_{ij} \geq 0$ であるとき, $\boldsymbol{A}$ は**非負行列**と呼ばれる.

ペロン・フロベニウスの定理は, 非負行列の固有値・固有ベクトルに関する定理である. 証明はここで扱うレベルを越える事実を用いる必要がある.

Theorem 4.4.2 (ペロン・フロベニウスの定理, [2, 7.3 節]). $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ を既約な非負行列とする. このとき, $\boldsymbol{A}$ は次のような固有値 $\lambda(\boldsymbol{A})$ を持つ.

1. $\lambda(\boldsymbol{A})$ は実数であり, $\lambda(\boldsymbol{A}) > 0$ が成り立つ.
2. $\boldsymbol{A}$ の他の固有値 μ は, $|\mu| \leq \lambda(\boldsymbol{A})$ をみたす.
3. $\lambda(\boldsymbol{A})$ の重複度は 1 である.
4. $\lambda(\boldsymbol{A})$ に対する固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ として, すべての要素が正のものが取れる.
5. $\lambda(\boldsymbol{A})$ 以外の固有値に対する固有ベクトルは, すべての要素が正になることはない.

このペロン・フロベニウスの定理を, 確率行列 $\boldsymbol{P}$ に適用すると, 次の定理が成り立つ.

Theorem 4.4.3. 既約な $N \times N$ 確率行列 $\boldsymbol{P}$ について, 次が成り立つ.

1. $\boldsymbol{P}$ は固有値 1 をもち, その重複度は 1 である.
2. $\boldsymbol{P}$ の 1 以外の固有値 μ に対して, $|\mu| \leq 1$ が成り立つ.
3. $\boldsymbol{P}$ の固有値 1 に対する固有ベクトルとして確率分布を取ることができる.

Proof. ペロン・フロベニウスの定理から, $\boldsymbol{P}$ の $\lambda(\boldsymbol{P})$ は絶対値最大固有値であって, 実数であり $\lambda(\boldsymbol{P}) > 0$ をみたす. さらに, $\lambda(\boldsymbol{P})$ に対する固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ として, すべての要素が正であるものが取れて, そのような固有ベクトルをもつ固有値は $\lambda(\boldsymbol{P})$ に限る.

以下では, $\boldsymbol{P} = (p_{ij})$ とおく. このとき, $\boldsymbol{P}^T = (p_{ji})$ と書けることに注意しよう.

ここで, $\boldsymbol{P}^T$ を考えよう. また, $\mathbb{R}^n$ のベクトル $\boldsymbol{e}$ を, すべての要素が 1 であるベクトルとする. すると,

$$\boldsymbol{P}^T \boldsymbol{e} = \boldsymbol{e}$$

が成り立つ．なぜなら, $\boldsymbol{P}$ は確率行列であったので, $\boldsymbol{P}$ のどの列を取っても, その要素の和は 1 となる．よって, $\boldsymbol{P}^T$ のどの行を取っても, その要素の和は 1 となる．すなわち, 任意の i に対して $\displaystyle\sum_{j=1}^{N} p_{ji} = 1$ が成り立つ．一方, $\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{e}$ の第 j 列を考えると, その値は $\displaystyle\sum_{j=1}^{n} p_{ji}e_i = \sum_{j=1}^{n} p_{ji} = 1$ となるので, $\boldsymbol{P}^T\boldsymbol{e} = \boldsymbol{e}$ が成り立つ．すなわち, 1 は $\boldsymbol{P}^T$ の固有値となる．

一方, ガーシュゴリンの定理の帰結（Theorem 3.8.4）を $\boldsymbol{P}^T$ に適用すれば, $\boldsymbol{P}^T$ のすべての固有値 λ は

$$|\lambda| \leq \max_{i=1,\dots,N} \sum_{j=1}^{N} p_{ji} = 1$$

が成り立つ．すなわち 1 は $\boldsymbol{P}^T$ の固有値の中で絶対値が最大の固有値である．

ここで, $\boldsymbol{P}^T$ の固有値と $\boldsymbol{P}$ の固有値は一致することを使えば, $\boldsymbol{P}$ は 1 を固有値に持ち, 1 が絶対値最大の固有値であることがわかる．特に, 固有値 1 の重複度は 1 となる．

ここで, 再びペロン・フロベニウスの定理を使えば, $\boldsymbol{P}$ の絶対値最大の固有値 1 の固有ベクトルとして, すべての要素が正のものを取ることができる．そのベクトルを $\boldsymbol{x} = (x_i)$ とおいたとき,

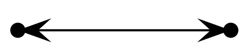
$$\boldsymbol{\pi} = \left(\frac{x_i}{\sum_{j=1}^{N} x_j} \right)$$

ととれば, $\boldsymbol{\pi}$ は $\boldsymbol{P}$ の固有値 1 に対する固有ベクトルであり, 確率分布となる． □

★ ページランクとの関係

これで一見すると, 前節の Problem 4.3.17 または Problem 4.3.18 の解答を得たように見える．たしかに, グラフ G が強連結であれば, Problem 4.3.18 は肯定的に解決できた．しかし, 次のような例を考えれば, Problem 4.3.17 を肯定的に解決したとは言えない．

Example 4.4.4. 下の図で表されるグラフ G を考える．



このグラフ G の推移確率行列 $\boldsymbol{P}_G$ は

$$\boldsymbol{P}_G = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

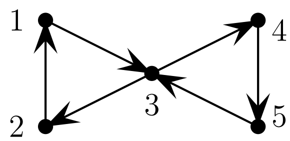
であり, その固有値は 1, -1 となり, すべての固有値の絶対値が 1 となる. 特に, 1 に対する固有ベクトルは $\boldsymbol{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, -1 に対する固有ベクトルは $\boldsymbol{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ となり, 例えば $\boldsymbol{\pi}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_2$ ととると, $\lim_{n\to\infty} \boldsymbol{\pi}(n)$ は存在しない. 特に,

$$\boldsymbol{\pi}(2n) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\pi}(2n+1) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

となり, 同じ状態が交互にあらわれる.

この例は極端な例であるが, もう少しだけマトモな例をあげてみよう.

Example 4.4.5. 下の図で表されるグラフ G を考える.



このグラフ G の確率推移行列 $\boldsymbol{P}_G$ は

$$\boldsymbol{P}_G = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

であり, 絶対値が 1 となる固有値が 3 つ存在する. (1 以外の絶対値 1 の固有値は $e^{2\pi i/3}$ と $e^{-2\pi i/3}$ である.) この例でも, 時刻 0 で頂点 3 に存在する確率が 1 であると仮定すると, 時刻 $3n$ でも頂点 3 に存在する確率が 1 となる.

Remark 4.4.6. いずれの例であっても, 不変分布の存在は Theorem 4.4.3 で保証されているんだが, 「絶対値最大固有値を計算するベキ乗法」 (Theorem 3.8.1) を考えると, 任意の初期分布 $\boldsymbol{\pi}(0)$ に対して

$$\lim_{n\to\infty} \boldsymbol{P}^n \boldsymbol{\pi}(0)$$

がいつでも存在することが言えない.

固有値の絶対値が 1 であるような固有値が 1 以外に存在しているので, その固有値の固有ベクトルが張る部分空間の成分が「くるくると回転する成分」として出てくるため, 上の極限が存在しないことが想像できる. (cf. Example 3.7.4).

したがって, 「ある一定時間ごとに同じ状態が繰り返される」こと, または, 「絶対値が 1 である固有値が 1 以外に存在する」ことが, 任意の初期分布に対してその長時間後の分布が不変分布に収束しないことの障害になっていると考えられる.

4.5 ランダムウォークの周期性

「ある一定時間ごとに同じ状態が繰り返される」ことが, ランダムウォークの不変分布が存在するための障害になっていると予想できる. そこで, そのようなことが起きないための条件を考えてみよう.

既約な推移確率行列 $\boldsymbol{P}$ から作られるランダムウォークを考える. また, $\boldsymbol{P}^k$ の成分を $p_{ij}^{(k)}$ であらわす. このとき, 時刻 0 で頂点 v_i にいた粒子が, 時刻 k で頂点 j にいる確率 $P(X(k)=j|X(0)=i)$ は,

$$P(X(k)=j|X(0)=i)=p_{ij}^{(k)}$$

になる.

Definition 4.5.1 (周期). 確率行列 $\boldsymbol{P}$ から決まるグラフ $G=(V,E)$ の各頂点 $i\in V$ に対して,

$$k_i=\gcd\{k\in\mathbb{N}:p_{ii}^{(k)}>0\}$$

と定義し, k_i を頂点 i の**周期**と呼ぶ. これは, 頂点 i にいた粒子が, 再び同じ頂点に戻ってくる確率が正になる最短の時間と考えてよい. 頂点 i に対して $k_i\geq 2$ のとき**周期的**と呼び, $k_i=1$ のとき**非周期的**と呼ぶ.

このとき, 次が成り立つ.

Proposition 4.5.2. 確率行列 $\boldsymbol{P}$ が既約ならば, $\boldsymbol{P}$ から決まるグラフ上のすべての頂点 i に対しての周期 k_i は同じ値になる.

Proof. いま $\boldsymbol{P}$ から決まるグラフを G とおくと, $\boldsymbol{P}$ が既約であるので, グラフ G が強連結となる. よって, 任意の 2 頂点 i,j に対して, ある自然数 k,ℓ が存在して,

$$p_{ij}^{(k)}>0,\quad p_{ji}^{(\ell)}>0$$

が成り立つ. そこで, $m=k+\ell$ とおく. ここで, $p_{ii}^{(n)}>0$ となるような $n\in\mathbb{N}$ をとると,

$$p_{jj}^{(m+n)}\geq p_{ji}^{(\ell)}p_{ii}^{(n)}p_{ij}^{(k)}>0 \tag{4.5}$$

が成り立つ. したがって, $m+n\equiv 0 \pmod{k_j}$ が成り立つ. また, $p_{jj}^{(m)}\geq p_{ji}^{(\ell)}p_{ij}^{(k)}>0$ であるので, $m\equiv 0 \pmod{k_j}$ が成り立つ. すなわち,

$$m+n\equiv 0,\quad m\equiv 0 \pmod{k_j}$$

であるので,

$$n\equiv 0 \pmod{k_j}$$

が成り立つ. ここで, n は $p_{ii}^{(n)}>0$ が成り立つ自然数と取ったので, k_j は $p_{ii}^{(n)}$ が成り立つような自然数の公約数となる. したがって, $k_i\leq k_j$ が成り立つ.

ここまでの証明の i と j をすべて逆にすれば, $k_j\leq k_i$ も証明できるので, $k_i=k_j$ が成り立つ. □

Remark 4.5.3. 不等式 (4.5) は, 推移確率行列の成分をみているだけではわからない. 時刻 0 で頂点 j にいて, 時刻 $m+n$ で頂点 j にいく路のうち, 特別な路をたどっているものの確率が (4.5) の右辺を表していると考えればよい.

Definition 4.5.4 (周期性). 既約な確率推移行列 $\boldsymbol{P}$ から作られるランダムウォークが**周期的**であるとは, $\boldsymbol{P}$ から作られるグラフのすべての頂点が周期的であることをいう. また, すべての頂点が非周期的であるとき, **非周期的**であるという.

グラフ G を強連結としているので, この定義の「すべての頂点」の部分を「ある頂点」と書き換えてもよい.

周期性の定義はこれでよいのだが, 我々が知りたいのは「行列 $\boldsymbol{P}$ をみて, 周期的か否かを判定できるか？」ということである. これに関しては, 次の定理が成り立つ.

Theorem 4.5.5 (非周期的となるための一つの十分条件). 既約な確率行列 $\boldsymbol{P}$ で定義されたランダムウォークは, $\boldsymbol{P}$ の対角成分 $\{p_{ii}\}$ のうち 1 つでも正のものがあれば, 非周期的となる.

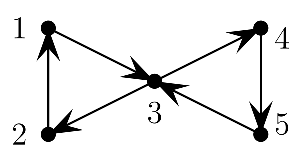
Proof. $\boldsymbol{P}$ は既約と仮定しているので, $\boldsymbol{P}$ から作られるグラフは G は強連結となる. よって, ランダムウォークが非周期的となるためには, どれか一つの頂点が非周期的であればよい. 仮定より, ある $i \in \{1, \dots N\}$ が存在して, $p_{ii} > 0$ となっている. これは, 頂点 i の周期 k_i が $k_i = 1$ であることを意味している. よって, このランダムウォークは非周期的である. □

ここまでで, 確率行列 $\boldsymbol{P}$ をみて, 非周期性を判定する一つの条件を得ることができた. 非周期性と固有値の関係としては, 以下の定理が成り立つ.

Theorem 4.5.6. 既約な確率行列 $\boldsymbol{P}$ で定義されたランダムウォークが非周期的ならば, $\boldsymbol{P}$ の固有値 λ で $|\lambda| = 1$ となるものは $\lambda = 1$ に限る. 特に, すべての成分が正であるような任意の初期分布 $\boldsymbol{\pi}(0)$ は, $t \to \infty$ の時, 不変分布 $\boldsymbol{\pi}$ に収束する.

Remark 4.5.7. Theorem 4.5.6 で「すべての成分が正であるような任意の初期分布」と言っている理由は, Theorem 3.8.1 で, 「ほとんどすべての初期ベクトル」と言っていることに起因する. (cf. Remark 3.8.2.)

Example 4.5.8. Example 4.4.5 で出てきたグラフ G を考えよう.



このグラフは「周期的」となる例として紹介したもので, $\boldsymbol{P}_G$ と周期と思われる $\boldsymbol{P}_G^3$ を計算すると,

$$\boldsymbol{P}_G = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{P}_G^3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

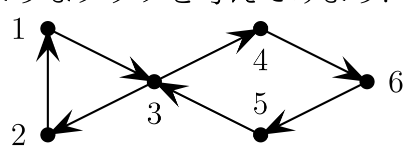
となっている.

Remark 4.5.9. Example 4.5.8 は, $\boldsymbol{P}_G^3$ の対角成分に正の値が出てくることから周期的であり, その周期が 3 であると結論したいのだが, 実はそうはいかない. 周期性の定義は, 「k ステップで戻ってくる確率が正となるような k の最大公約数が 2 以上である」ことなので, 例えば, Example 4.5.8 では, 3 の倍数でない k に対して $\boldsymbol{P}_G^k$ の対角成分に正の値が出てこないことを示すか, $e^{2\pi i/3}$ を固有値に持つことを示すかをしないと周期的であるとは結論できない. 実際,

$$\boldsymbol{x} = (1, e^{2\pi i/3}, 2e^{4\pi i/3}, e^{2\pi i/3}, 1)^T$$

ととると, $\boldsymbol{P}_G \boldsymbol{x} = e^{2\pi i/3}\boldsymbol{x}$ が成り立つので, $\boldsymbol{P}_G$ は $e^{2\pi i/3}$ を固有値に持つことがわかる.

Example 4.5.10. 次のようなグラフを考えてみよう.



このグラフの推移確率行列は

$$\boldsymbol{P}_G = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となり, $\boldsymbol{P}_G^3$, $\boldsymbol{P}^4$ はそれぞれ,

$$\boldsymbol{P}_G^3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{P}_G^4 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

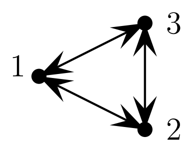
となり, 3 ステップと 4 ステップで戻ってくる確率が正である. よって, このグラフは非周期的となる. 実際, $\boldsymbol{P}_G$ の固有値は, 近似的に

$$\{1.0000, -0.17610 + 0.86072i, -0.17610 - 0.86072i, -0.64780, 0, 0\}$$

となり, 確かに非周期的である.

Remark 4.5.11. Example 4.5.8 のグラフの閉路の長さはすべて 3 の倍数であるので, このグラフの上の単純ランダムウォークは周期的であると想像できるが, Example 4.5.10 のグラフの閉路の長さには, 少なくとも 3 のものと 4 のものが含まれて, それらは互いに素であるので, このグラフの上の単純ランダムウォークは非周期的であると想像できる.

Example 4.5.12. 確率推移行列の対角成分がすべて 0 であっても, 固有値の絶対値が 1 になるものが $\lambda = 1$ に限る例は簡単に見つかる. 下の図で表されるグラフ G を考える.



ととれば, 確率推移行列 $\boldsymbol{P}_G$ は

$$\boldsymbol{P}_G = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$$

となり, 固有値は $\{1, -1/2, -1/2\}$ となる.

4.6 ページランクとの関係

ここまでで, 以下の定理を紹介できたことになる.

Theorem 4.6.1. 既約な確率行列 $\boldsymbol{P}$ で定義されたランダムウォークが非周期的ならば, ただひとつの不変分布 $\boldsymbol{\pi}_\infty$ が存在して, すべての成分が正であるような任意の初期分布 $\boldsymbol{\pi}(0)$ に対して $\lim_{n\to\infty} \boldsymbol{P}^n \boldsymbol{\pi}(0)$ が存在して

$$\boldsymbol{\pi}_\infty = \lim_{n\to\infty} \boldsymbol{P}^n \boldsymbol{\pi}(0)$$

が成り立つ.

これをウェブデータに関するページランクの言葉で言い換えると, 次のように言うことができる.

Theorem 4.6.2. ウェブデータ全体のリンク構造がなすグラフに関してのランダムウォークを考えたとき, その確率行列が Theorem 4.6.1 の仮定をみたすならば, ページランクは不変分布 $\boldsymbol{\pi}_\infty$ として定義することができる.

「これで話はおしまい」と言いたいところだが, リンク構造がなすグラフが「強連結」であるとか, その上の単純ランダムウォークが「非周期的」であるとは到底思えないので, 何らかの考察を加えた上で, 「ウェブデータ全体のリンク構造の上をユーザが移動していく様子をあらわすランダムウォーク」を再度きちんと定義して, それが Theorem 4.6.1 の仮定をみたすことを確かめる必要がある.

5　Google 行列とページランクの計算

ようやくページランクの計算を行う準備ができたので, この章では, ウェブデータ全体のリンク構造の上をユーザがランダムに推移していく確率過程を定義して, そのランダムウォークから不変分布としてページランクが定義できることをみていく.

5.1　Google 行列の定義

Introduction で説明したページランクの定義は, 以下のようなものであった.

- インターネット上のウェブデータ全体のリンク構造のなすグラフを考え, そのグラフ上の単純ランダムウォークの不変分布をページランクと呼ぶ.

この定義は, 「ウェブのデータの中をリンクをたどりながらあちらこちらに移動するユーザの各ウェブページの滞在確率」という意味では, 非常に妥当な定義である. しかし, これだけでは, 確率行列の既約性・ランダムウォークの非周期性を保証できないため, 「長時間経過したときの定常分布」という意味での不変分布の存在を保証できるわけではない. 以下では, このような問題をどのように回避するかを説明して, 妥当なページランクの定義を考えていこう.

★　★　★

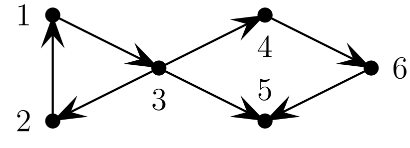
Definition 5.1.1. インターネット上のウェブデータ全体のリンク構造がなすグラフを G とおき, G から作られる「確率推移行列」を $\boldsymbol{H}$ とおく. この $\boldsymbol{H}$ を**ハイパーリンク行列**と呼ぶ

Remark 5.1.2. ここで $\boldsymbol{H}$ を「確率推移行列」と言ったが, 実際には G が強連結であるかどうかわからないので, $\boldsymbol{H}$ が確率行列になっているとは限らない.

★　★　★

まず, この段階で問題となるのは以下のような例である.

Example 5.1.3. グラフ $G = (V, E)$ の頂点（ウェブページ） v で, v を始点とする辺（ページ v から出ていくリンク）が一つも存在しないページがありうる. このようなページを**ぶら下がりノード**と呼ぶ. そのようなグラフの例としては, 以下のようなものがある.



このグラフの v_5 を始点とする辺は存在しない.

もちろん, このグラフは強連結でないので, 不変分布が存在することは保証されない. このグラフ上で単純ランダムウォークを行うとしたとき, v_5 に到達したユーザの行き先がなくなってしまう.

そこで, ぶら下がりノードに到達したユーザは「ずっとそのページに滞在する」と仮定して, v_5 に自己ループを付け加えると, ハイパーリンク行列 $\boldsymbol{H}$ と, その長時間後の分布 $\boldsymbol{\pi}_\infty$ は

$$\boldsymbol{H} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\pi}_\infty = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

となる. すなわち, 長時間経過した後にはすべてのユーザは v_5 に到達する.

これを言い換えると, 「ぶら下がりノードのページランクは, 他のページのランクよりも高くなる」ということであり, 他のページへのリンクを一切作らないことにより, 意図的にページランクを高くすることができる.

これでは, ページランクがユーザの挙動を的確に反映するものと言えないばかりか, ページランクが公正なものではなくなってしまう.

★ ぶら下がりノードへの対応

グラフ G の頂点数を N として, 頂点に $\{1, \ldots, N\}$ の番号をつける. $\boldsymbol{d} = (d_i) \in \mathbb{R}^N$ を

$$d_i = \begin{cases} 1 & \text{ページ } i \text{ がぶら下がりノード}, \\ 0 & \text{ページ } i \text{ はぶら下がりノードでない}, \end{cases}$$

と定義する. このとき,

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{N}\boldsymbol{d}\boldsymbol{e}^T, \quad \text{ただし } \boldsymbol{e} = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N$$

とおくと, $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{s}_1 \cdots \boldsymbol{s}_N \end{pmatrix}$ は, その第 i 列 $\boldsymbol{s}_i$ が

$$\boldsymbol{s}_i = \begin{cases} \dfrac{1}{N}\boldsymbol{e} & \text{ページ } i \text{ がぶら下がりノード}, \\ \boldsymbol{0} & \text{ページ } i \text{ はぶら下がりノードでない}, \end{cases}$$

となるような行列となる. 行列 $\boldsymbol{S}$ は明らかに確率行列となる.

そこで, 新たな $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{P}$ を

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{H} + \boldsymbol{S}$$

で定義する. このとき, $\boldsymbol{P}$ は確率行列となる. なぜなら, $\boldsymbol{S}$ の $\mathbf{0}$ でない列は, ぶら下がりノードに対応した列だけであり, ぶら下がりノードに対応した $\boldsymbol{H}$ の列は $\mathbf{0}$ になるからである. したがって, $\boldsymbol{P}$ を推移確率行列として持つランダムウォークを定義することができる. この一連のぶら下がりノードへの対応を**確率的調整**と呼ぶ.

Example 5.1.4. Example 5.1.4 のグラフに対して確率的調整を行うと,

$$\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/6 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1/6 & 0 \end{pmatrix},$$

となり, その $\boldsymbol{P}$ の定めるランダムウォークの不変分布 $\boldsymbol{\pi}_\infty$ は

$$\boldsymbol{\pi}_\infty = \begin{pmatrix} 1/6 \\ 2/15 \\ 1/5 \\ 2/15 \\ 1/5 \\ 1/6 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0.166667 \\ 0.133333 \\ 0.2 \\ 0.133333 \\ 0.2 \\ 0.166667 \end{pmatrix}$$

となる. 特に, もっともページランクが高いのは v_3, v_5 となる.

★ ★ ★

ここまでで, ウェブページ全体のリンク構造のなすグラフ G から, ハイパーリンク行列 $\boldsymbol{H}$ を作り, そのぶら下がりノードへの対応として確率的調整を行って

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{H} + \boldsymbol{S} = \boldsymbol{H} + \frac{1}{N}\boldsymbol{d}\boldsymbol{e}^T$$

を作った. しかし, これだけでは都合の悪いことが 2 つある.

1. $\boldsymbol{P}$ が定義するランダムウォークが非周期的であることが保証できない.
2. $\boldsymbol{P}$ が定義するランダムウォークが非周期的であったとしても, 1 の次に絶対値の大きい固有値が 1 に非常に近い可能性がある.

この後者の性質の意味は次の節で解説する. ここでは,「1 の次に絶対値の大きい固有値の絶対値が 1 から離れるほどうれしい」と思ってほしい.

★ テレポーテーション行列と Google 行列

実際のインターネットのユーザは, 多くの場合リンクをたどって様々なページを訪れるが, あるときには, URL を直接入力したり, 再度検索を行うことによって, 直接はリンクがないページへ移動を行う. このようなユーザの動きを反映しようと考えたのがテレポーテーション行列である.

Definition 5.1.5 (テレポーテーション行列)**.**

$$\boldsymbol{T} = \frac{1}{N}\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^T = \begin{pmatrix} 1/N & \cdots & 1/N \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1/N & \cdots & 1/N \end{pmatrix}$$

をテレポーテーション行列と呼ぶ.

明らかに, テレポーテーション行列 $\boldsymbol{T}$ は確率行列であり, $\boldsymbol{T}$ が定めるランダムウォークは, すべてのページへ等確率で移動するものに他ならず, ユーザがリンクをたどるのにあきて, 他のページを探して移動する様子をあらわしている.

この $\boldsymbol{T}$ と $\boldsymbol{P}$ とを重ねあわせたのが Google 行列である.

Definition 5.1.6 (**Google 行列**)**.** ウェブページ全体のなすリンク構造に付随する **Google 行列**とは, ある α $(0 < \alpha < 1)$ を使って,

$$\boldsymbol{G}(\alpha) = \boldsymbol{G} = \alpha\boldsymbol{P} + (1-\alpha)\boldsymbol{T} = \alpha\boldsymbol{H} + \frac{\alpha}{N}\boldsymbol{d}\boldsymbol{e}^T + \frac{1-\alpha}{N}\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^T$$

で定義される. ここで, α は, ユーザがリンクをたどって他のページに移動する確率をあらしている.

Theorem 5.1.7. Google 行列 $\boldsymbol{G}$ は確率行列である. 特に, Google 行列を推移確率行列とするランダムウォークが定義できる.

Proof. 2 つの確率行列 $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{T}$ を $\alpha : 1-\alpha$ で足し合わせたものなので, その各列の和は 1 になる. □

さらにうれしいことに次が成り立つ.

Theorem 5.1.8. Google 行列 $\boldsymbol{G}$ は既約である. （$\boldsymbol{G}$ が定めるグラフは強連結である.）また, $\boldsymbol{G}$ が定めるランダムウォークは非周期的である. したがって, $\boldsymbol{G}$ が定めるランダムウォークには, ただひとつの不変分布 $\boldsymbol{\pi}_\infty$ が存在し, 各成分がすべて正である任意の初期分布 $\boldsymbol{\pi}(0)$ に対して,

$$\boldsymbol{\pi}_\infty = \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{G}^k \boldsymbol{\pi}(0)$$

が成り立つ.

Proof. Google 行列 $\boldsymbol{G} = (g_{ij})$ は, すべての成分が正の値を持っている. したがって, $\boldsymbol{G}$ が定めるグラフは強連結となる. 特に, $\boldsymbol{G}$ の対角成分はすべて正であるので, $\boldsymbol{G}$ の定めるランダムウォークは非周期的となる. □

Example 5.1.9. Example 5.1.4 のグラフに対しての Google 行列を求めると, $\alpha = 9/10$ とおいたとき,

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{G} &= \frac{9}{10}\boldsymbol{P} + \frac{1}{10}\frac{1}{6}\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^T \\
&= \frac{9}{10}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/6 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/6 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1/6 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{10}\begin{pmatrix} 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 \\ 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 \\ 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 \\ 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 \\ 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 \\ 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 & 1/6 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{60} & \frac{11}{12} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{6} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{7}{15} & \frac{1}{60} & \frac{1}{6} & \frac{1}{60} \\ \frac{11}{12} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{6} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{7}{15} & \frac{1}{60} & \frac{1}{6} & \frac{1}{60} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{6} & \frac{11}{12} \\ \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{1}{60} & \frac{11}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{60} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

となり, 不変分布は近似的に

$$
\boldsymbol{\pi}_\infty = \begin{pmatrix} 0.167758 \\ 0.135007 \\ 0.197234 \\ 0.135007 \\ 0.197234 \\ 0.167758 \end{pmatrix}
$$

となり, もっともランクの高いページは v_3, v_5 となる.

Definition 5.1.10 (ページランク). ウェブページ全体のなすリンク構造に対して, $\alpha \in (0,1)$ を一つきめたときの Google 行列 $\boldsymbol{G}(\alpha)$ が定めるランダムウォークの不変分布を**ページランク**と呼ぶ.

Remark 5.1.11. この定義は, 明らかに α の取り方に依存する. α の値が小さいときには α を少しくらい変えても, ページランクの値は大きくは変動しないが, α が 1 に近づくと, α の小さな値の変化がページランクの大きな変化をもたらす.

より数学的な言い方をすれば, α をきめたときの不変分布を $\boldsymbol{\pi}_\infty(\alpha)$ と書いたとき, $\left\| \dfrac{d}{d\alpha}\boldsymbol{\pi}_\infty(\alpha) \right\|_1 \leq \dfrac{2}{1-\alpha}$ が成り立つ. 特に α が 1 に近いほど大きな値を取る. (cf. [1, Theorem 6.2.1].)

5.2 ページランクの計算

ここでは, Google 行列が決まったとき, ページランクを計算する方法を考えよう. この節で「計算する」と言ったときには, 「手で計算する」というよりは, 「コンピュータに計算させる」という意味であることに注意してほしい.

Theorem 5.1.8 をみれば, $N \times N$ Google 行列 $\boldsymbol{G}(\alpha) = \boldsymbol{G}$ がわかっていれば, 初期ベクトル $\boldsymbol{\pi}(0)$ として

$$\boldsymbol{\pi}(0) = \begin{pmatrix} 1/N \\ \vdots \\ 1/N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N$$

をとって, $\boldsymbol{G}^k \boldsymbol{\pi}(0)$ を計算すれば, このベクトルは十分に大きな k を取れば, ページランク（不変分布） $\boldsymbol{\pi}_\infty$ に収束する. ところが, 自然に次のような問題が生じる.

Problem 5.2.1. ページランク $\boldsymbol{\pi}_\infty$ を得るためには,

1. どれくらいの k まで計算すればよいのか, （何回くらい $\boldsymbol{G}$ とベクトルの掛け算を行えばよいのか.）
2. その計算にはどのくらいの時間がかかるのか.
3. その計算を行うにはどのくらいの規模のコンピュータが必要なのか.

などの情報を事前に知ることができるのか？

実用的には, このような問題にある程度の答を出しておく必要がある.

5.2.1 収束の意味と収束の速さ

ここまでゴマかして使ってきた言葉として「収束」という言葉があるので, それを説明しておこう.

Definition 5.2.2 (数列の収束). 実数の列 $\{a_n\}_{n=1}^{\infty}$ が a に収束するとは, n を大きく取っていくと a_n の値が a に限りなく近づくことである. 厳密には, 次のように定義する. 任意の $\epsilon > 0$ を取ったとき, ϵ に応じて十分大きな $N \in \mathbb{N}$ が存在して, $n > N$ をみたすすべての n に対して $|a_n - a| < \epsilon$ が成り立つとき, 数列 $\{a_n\}_{n=1}^{\infty}$ は a に収束するといい,

$$a = \lim_{n \to \infty} a_n$$

と書く.

Example 5.2.3. r を $|r| < 1$ をみたす実数とする. このとき, 数列 r^n は 0 に収束する. 実際, 小さな数 $\epsilon > 0$ を一つきめたとき,

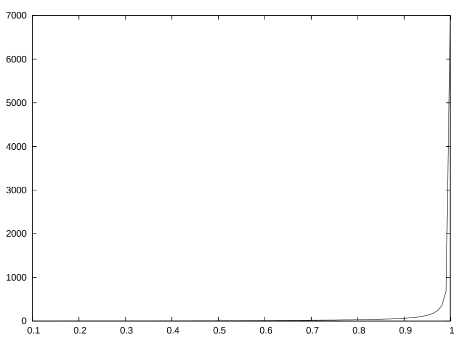
$$n > \log_r \epsilon \Longrightarrow |r^n| < \epsilon$$

が成り立つ. ($|r| < 1$ であり, $\epsilon < 1$ と思っているので, $\log_r \epsilon > 0$ であることに注意.)

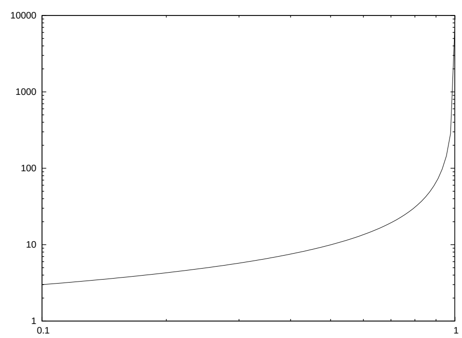
Example 5.2.4. ここで, 例えば $\epsilon = 1/1000 = 10^{-3}$ と取ったとき, $|r^n| < \epsilon$ が成り立つには, どのくらい n を大きく取ればよいかを r を取り替えて調べてみよう. 上の例から $n \sim \log_r \epsilon = -3 \log_r 10 = -3 \log 10 / \log r$ であるので, 以下のような表を得る.

r	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.85	0.9	0.99	0.999
n	3.00	4.29	5.74	7.54	9.97	13.5	19.4	31.0	42.5	65.6	687	6910

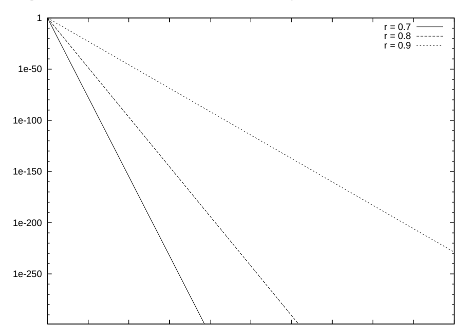
このように, r が 1 に近くなると, n の値は急激に大きくなることがわかる.



$f(x) = -3 \log 10 / \log r$ のグラフ



y 軸を対数目盛りにしたもの



r^n のグラフ. y 軸は対数目盛り

ここから「r が小さいほど, r^n が 0 に収束する速さが速い」と言うことができる.

次に, 「ベクトルが収束する」という意味を定義しておこう.

Definition 5.2.5 (ベクトルの収束)**.** $\mathbb{R}^n$ のベクトルの列 $\{\boldsymbol{x}_k\}_{k=1}^{\infty}$ が, ベクトル $\boldsymbol{y}$ に収束するとは, $a_n = \|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{y}\|$ で定義した数列が 0 に収束することを言う.

ここで, ベクトルのノルムはどんなノルムで取っても同じ結果をもたらすことが知られているが, Example 3.2.26 の $\|\boldsymbol{x}\|_2$ を使えば, 通常の 2 点間の距離が 0 に行くことと考えることができ, ベクトル $\boldsymbol{x}_n$ のすべての成分が $\boldsymbol{y}$ の対応する成分に収束すると考えても良い.

5.2.2 固有ベクトル計算の収束の速さ

「絶対値最大固有値を計算するベキ乗法」 (Theorem 3.8.1) では, $\boldsymbol{A}$ の固有値が

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_N|$$

をみたしているとき,

$$\boldsymbol{y}_{k+1} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k,$$
$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \frac{1}{\|\boldsymbol{y}_{k+1}\|}\boldsymbol{y}_{k+1}$$

によって, 繰り返し $\boldsymbol{x}_k$ を計算すると, ほとんどすべての初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ に対して, $\boldsymbol{x}_k$ は絶対値最大固有値 λ_1 に対する固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ に収束すると主張している.

このとき, 「ある程度満足できる精度で固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ を求めるには, どのくらいの計算が必要か？」ということが問題となる. 言い換えれば, ベキ乗法での $\boldsymbol{x}_n$ が $\boldsymbol{x}$ に収束する速さがどのくらいかを知る必要がある. これに関しては, 次の定理が成り立つ.

Theorem 5.2.6 (ベキ乗法の収束の速さ)**.** 「絶対値最大固有値を計算するベキ乗法」 (Theorem 3.8.1) では, $\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}\|$ が 0 に収束する速さは, $\left|\dfrac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k$ と行列サイズ N に関係した量に比例する.

つまり, 固有ベクトルの近似値 $\boldsymbol{x}_k$ が真の固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ に近づく速さは $|\lambda_2/\lambda_1|^k$ が 0 に近づく速さとほぼ同じである.

Remark 5.2.7. 数列 $\{a_n\}$ と $\{b_n\}$ の各項の比 $\{a_n/b_n\}$ が

$$\lim_{n\to\infty}\left|\frac{a_n}{b_n}\right| = C \quad \text{（有限の値）}$$

をみたすとき

$$|a_n| \sim O(|b_n|)$$

と書く. この記法を使えば, Theorem 5.2.6 の主張は, N に関係する量を無視すれば,

$$\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}\| \sim O\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)$$

と書くことができる.

ここで, Google 行列に関しては, 絶対値最大の固有値は 1 であるので, その次に絶対値が大きな固有値 λ_2 が 1 に近いほど, ベキ乗法でのページランクへの収束が遅くなることがわかる. 逆に λ_2 が小さいほど収束が速くてうれしいことがわかる.

★ ★ ★

Google 行列は, 非常に多くのウェブデータのリンク構造を反映した行列である. 現在では, 世の中に存在するウェブページの数は１００億ページ以上と言われていて, Google 行列は「１００億×１００億」を越えるサイズであると考えられる. したがって, 絶対値が 2 番目に大きな固有値 λ_2 の値は, 1 に極めて近いと考えられ, このままではページランクを事実上計算できないことになる. ところが, その状況を大幅に改善する次の定理が知られている.

Theorem 5.2.8 (**Google 行列の固有値**, [1, Theorem 4.7.1])**.** Google 行列を作る前段階の行列 $\boldsymbol{P}$ の固有値を $\{1, \lambda_2, \lambda_3, \ldots, \lambda_N\}$ とおくと, Google 行列 $\boldsymbol{G}(\alpha) = \alpha\boldsymbol{P} + (1-\alpha)\boldsymbol{T}$ の固有値は $\{1, \alpha\lambda_2, \alpha\lambda_3, \ldots, \alpha\lambda_N\}$ となる. 特に, $\boldsymbol{G}(\alpha)$ の絶対値が 2 番目に大きな固有値の絶対値は α 未満となる.

つまり, テレポーテーション行列 $\boldsymbol{T}$ を導入することにより, ランダムウォークの非周期性を保証することができただけでなく, ベキ乗法の収束の速さを大幅に改善することができる.

5.2.3 ページランクの計算量

ここでは, 実際に巨大な Google 行列 $\boldsymbol{G}(\alpha)$ の定めるランダムウォークの不変分布（ページランク）を, 計算機で計算するにはどれだけの計算リソースが必要かを考えてみよう.

以下では, Google 行列のサイズを $N \times N$ とおく.

Proposition 5.2.9 (**行列とベクトルの乗算の計算回数**)**.** $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{G}$ と $\mathbb{R}^N$ のベクトル $\boldsymbol{\pi}$ の積 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{\pi}$ を計算するには, およそ N^2 回の乗算と N^2 回の加算を必要とする. つまり, $\boldsymbol{G}\boldsymbol{\pi}$ の乗算結果を得るためには, $O(N^2)$ 回の計算が必要である. 特に, $\boldsymbol{G}\boldsymbol{\pi}$ の乗算を k 回繰り返すには $O(N^2k)$ 回の計算が必要である.

Remark 5.2.10. 最近のコンピュータに使われている CPU の代表的なものとして Intel Core i7 Desktop Processor i7-965 (3.2GHz) を例にあげると, その設計上の浮動小数点計算速度は 50Gflops 程度である (cf. [9]). つまり, 1 秒間に 50×10^9 回（およそ 500 億回) の計算を実行可能である. しかし, 行列サイズを少なく見積もって, およそ 1 億ページ, すなわち $N = 10^8$ と考えても, 行列とベクトルの 1 回の乗算には 10^{16} 回程度の計算が必要となり, 50 Gflops の CPU を用いても 200000 秒（おそよ 55.5 時間）が必要となる. （もし $N = 10^9$ とすれば, 5000 時間以上（200 日以上）となってしまう.

問題はそれだけではない.

Proposition 5.2.11 (**行列を格納するためのメモリサイズ**)**.** 浮動小数点係数（実数係数と思ってよい）の $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{G}$ を格納するために必要なメモリ量は $8N^2$ バイトである.

つまり, $N = 10^8$ の場合, $\boldsymbol{G}$ を格納するために必要なメモリ量は, 8×10^{16} バイト（およそ 800 ペタバイト）が必要となる. 実は, メモリの必要量に関しては, 工夫の余地が残されている.

Definition 5.2.12 (**疎行列と密行列**)**.** $N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ の 0 でない要素が $O(N)$ 程度の時, $\boldsymbol{A}$ を**疎行列**と呼び, それ以上に 0 でない要素があるとき**密行列**と呼ぶ.

疎行列に関しては,「疎行列格納形式」と呼ばれるデータの設定方法があり, $O(N)$ 程度のメモリ量しか必要としない. したがって $N = 10^8$ 程度の時には, およそ数百メガバイト〜数ギガバイトのメモリ量で格納可能となる. これは, 現在ではパーソナルコンピュータ程度でも実現可能なメモリ量である.

Remark 5.2.13. 世の中の各ウェブページに存在するリンクの数はある一定以上にはならないと思われるので, ハイパーリンク行列 $\boldsymbol{H}$ は明らかに疎行列である. しかし, Google 行列 $\boldsymbol{G}$ は密行列になってしまっている.

ところが, Google 行列の作り方を詳細にみてみると, Google 行列を密行列として格納しなくても計算可能であることがわかる.

Proposition 5.2.14. Google 行列 $\boldsymbol{G}(\alpha)$ を格納するためのメモリ量は $O(N)$ 程度でよい.

Proof.

$$\boldsymbol{G}(\alpha) = \alpha\boldsymbol{H} + \frac{\alpha}{N}\boldsymbol{d}\boldsymbol{e}^T + \frac{1-\alpha}{N}\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^T = \alpha\boldsymbol{H} + \left(\frac{\alpha}{N}\boldsymbol{d} + \frac{1-\alpha}{N}\boldsymbol{e}\right)\boldsymbol{e}^T \tag{5.1}$$

とかけるので, Google 行列 $\boldsymbol{G}(\alpha)$ を格納するには, 疎行列 $\boldsymbol{H}$ と, $\mathbb{R}^N$ のベクトル $\boldsymbol{d}$ だけを格納すればよい. これらを格納するには, ともに $O(N)$ 程度のメモリ量で十分である. □

さらに, 計算回数に関しても次が成り立つ.

Proposition 5.2.15. Google 行列 $\boldsymbol{G}(\alpha)$ と確率分布 $\boldsymbol{\pi}$ の積の計算回数は, $\boldsymbol{H}\boldsymbol{\pi}$ の積の計算回数で左右される.

Proof. 上の (5.1) は

$$\boldsymbol{G}(\alpha)\boldsymbol{\pi} = \alpha\boldsymbol{H}\boldsymbol{\pi} + \left(\frac{\alpha}{N}\boldsymbol{d} + \frac{1-\alpha}{N}\boldsymbol{e}\right)\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{\pi} = \alpha\boldsymbol{H}\boldsymbol{\pi} + (\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{\pi})\left(\frac{\alpha}{N}\boldsymbol{d} + \frac{1-\alpha}{N}\boldsymbol{e}\right)$$

と書き換えることができる. ここで, 右辺第 2 項は $\boldsymbol{\pi}$ と $(\cdot)$ の内積を $\boldsymbol{e}$ の係数としたものなので, $O(N)$ 程度の計算回数で済む. したがって, この計算の主要部分は $\boldsymbol{H}\boldsymbol{\pi}$ の計算であることがわかる. □

Remark 5.2.16. 実は, 計算時間に関しては $O(N^2)$ 程度ならば気にすることはない. 近年の「スーパーコンピュータ」とは, 「ある程度高速なコンピュータ」を大量に並べた（同時に使う）ものである. つまりスーパーコンピュータとは大規模な並列コンピュータのことである.

一方, 行列とベクトルの乗算は並列化可能である. つまり, 第 i 列目の計算と第 j 列目の計算は, 全く独立に同時に行うことができるため, 各成分を多数のコンピュータに振り分けで計算できる. したがって, M 台のコンピュータがある状態で, $N \times N$ 行列とベクトルの計算を行うためには, 1 台は N/M 列分のみを計算すればよい.

ここまでで, 1 回の Google 行列と確率分布の積を計算するために必要な計算リソースを知ることができた.

★ ★ ★

最後に問題となるのは, 果たして何回くらい Google 行列と確率分布の積を計算する必要があるかである. その指針となるのは, 次の, Theorem 5.2.6 と Theorem 5.2.8 から直ちに得られる結果である

Theorem 5.2.17. Google 行列 $\boldsymbol{G}(\alpha)$ の不変分布の計算のためのベキ乗法は,

$$\sum_{i=1}^{N} |p_i^{(k)} - p_i^{(\infty)}| = \|\boldsymbol{\pi}(k) - \boldsymbol{\pi}_\infty\| \sim O(\alpha^k)$$

をみたす. 特に, 任意の i に対して,

$$|p_i^{(k)} - p_i^{(\infty)}| \leq C\alpha^k$$

が成り立つ. ただし, 定数 C は, 行列サイズ N に依存する.

ここで, ページランク（不変分布）を精度 $\epsilon = 10^{-\ell}$ で計算したいとしよう. つまり, 小数点以下第 ℓ 桁までページランクを計算して, 各ページに順位付けを与えよう. このとき, 真のページランク $\boldsymbol{\pi}_\infty$ で隣あう順位のページを i と j とおくと, 真のページランクの値については,

$$|p_i^{(\infty)} - p_j^{(\infty)}| > \epsilon$$

が成り立つ. ここで, k 回の繰り返しの後,

$$|p_j^{(k} - p_i^{(k)}| > \epsilon$$

が成り立てば,

$$|p_i^{(\infty)} - p_i^{(k)}| \leq \frac{\epsilon}{2}, \quad |p_j^{(\infty)} - p_j^{(k)}| \leq \frac{\epsilon}{2}$$

であることから,
$$|p_i^{(\infty)} - p_j^{(\infty)}| > \epsilon$$
を保証できる. したがって, $\epsilon = 10^{-\ell}$ の精度でページランクを計算したければ,
$$C\alpha^k \le \frac{\epsilon}{2} = 0.5 \times 10^{-\ell} \tag{5.2}$$
が成り立つような k まで計算する必要がある.

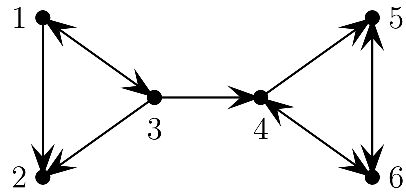
ここで, 簡単のため (5.2) で $C = 1$ ととり, Google 行列を作るパラメータを $\alpha = 0.85$ と取ろう. (この値は, 実際に Google が採用しているパラメータの値とされている.) さらに, ページランクの値を小数点以下 4 桁まで保証しよう. つまり, $\ell = 4$ と取る. すると (5.2) は
$$(0.85)^k \le 0.5 \times 10^{-4} \quad \Longleftrightarrow \quad k \ge \frac{\log_{10}(0.5) - 4}{\log_{10}(0.85)} \sim 60.9374$$
となり, 61 回程度の繰り返しを行えばよいことがわかる. 一方, $\alpha = 0.90$ と取ってしまうと,
$$(0.90)^k \le 0.5 \times 10^{-4} \quad \Longleftrightarrow \quad k \ge \frac{\log_{10}(0.5) - 4}{\log_{10}(0.90)} \sim 93.8862$$
となってしまい, 93 回の繰り返しが必要となってしまう. このように, α をある程度小さく取ることにより, 不変分布の近似値を得るための繰り返し回数が少なくなることがわかる.

Remark 5.2.18. 実際にプログラムを組んで計算する場合には, ある程度大きな k について
$$\begin{aligned}&\|\boldsymbol{\pi}(k+1) - \boldsymbol{\pi}(k)\| \le \alpha\|\boldsymbol{\pi}(k) - \boldsymbol{\pi}(k)\|,\\ &\|\boldsymbol{\pi}(k+1) - \boldsymbol{\pi}(k)\| \le (1-\alpha)\epsilon \Longrightarrow \|\boldsymbol{\pi}(k) - \boldsymbol{\pi}_\infty\| \le \epsilon\end{aligned}$$
が成り立つことを利用して,
$$\|\boldsymbol{\pi}(k+1) - \boldsymbol{\pi}(k)\| > (1-\alpha)\epsilon$$
となっている間は繰り返しを行うようなプログラムを書けばよい.

5.3 実際の計算例

最後に, ページランクの計算をいくつかの例でやってみよう. 一つは, ページランクの解説によく掲載されているページ数 6 の例であり, もう一つは, ２００３年頃の実際のウェブページのリンク情報の抜粋の例である.

Example 5.3.1. 最初の例は, 次のグラフ ($N = 6$) に関するページランクである.



(v_2 はぶら下がりノードとなっている.) このグラフに関するハイパーリンク行列 $\boldsymbol{H}$, ぶら下がりノードをあらわすベクトル $\boldsymbol{d}$ は,

$$\boldsymbol{H} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{d} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

である. よって, $\alpha = 0.85$ ととると,

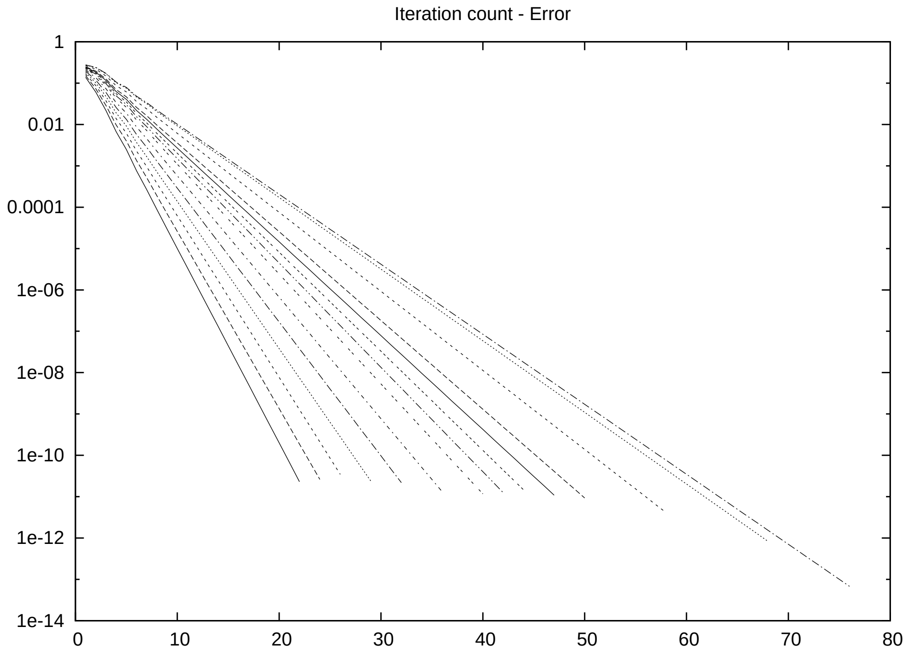
$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{H} + \frac{1}{6}\boldsymbol{d}\boldsymbol{e}^T = \begin{pmatrix} 0 & 1/6 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/6 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/6 & 1/3 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/6 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/6 & 0 & 1/2 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{G} = 0.85\boldsymbol{P} + 0.15\boldsymbol{T} \sim \begin{pmatrix} 0.0250 & 0.1667 & 0.3083 & 0.0250 & 0.0250 & 0.0250 \\ 0.4500 & 0.1667 & 0.3083 & 0.0250 & 0.0250 & 0.0250 \\ 0.4500 & 0.1667 & 0.0250 & 0.0250 & 0.0250 & 0.0250 \\ 0.0250 & 0.1667 & 0.3083 & 0.0250 & 0.0250 & 0.4500 \\ 0.0250 & 0.1667 & 0.0250 & 0.4500 & 0.0250 & 0.4500 \\ 0.0250 & 0.1667 & 0.0250 & 0.4500 & 0.8750 & 0.0250 \end{pmatrix}$$

となり, ページランクは

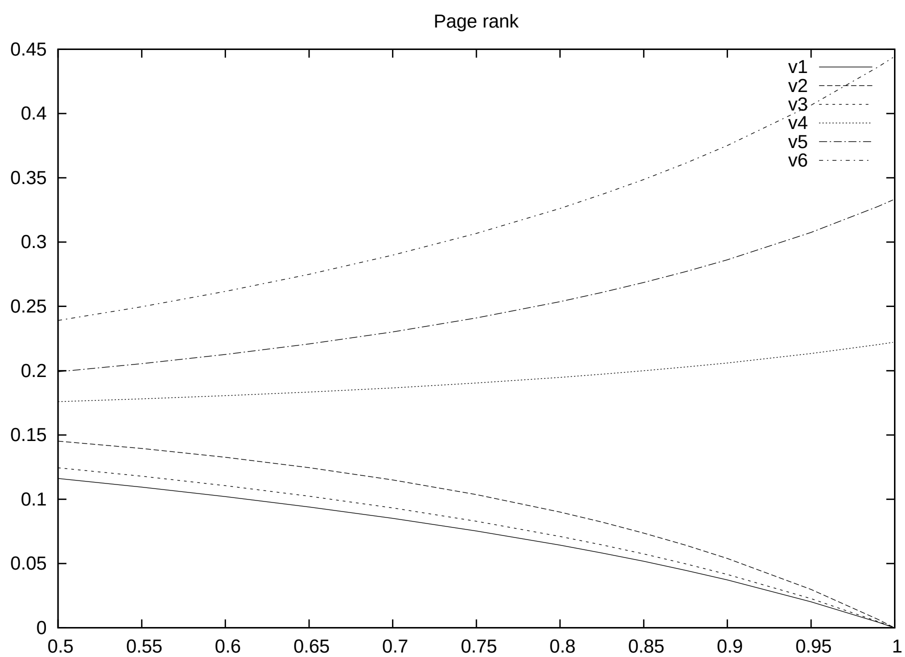
$$\boldsymbol{\pi}_\infty \sim \begin{pmatrix} 0.05170475 \\ 0.07367926 \\ 0.05741241 \\ 0.1999038 \\ 0.2685961 \\ 0.3487037 \end{pmatrix}$$

となり, 上位から順に v_6, v_5, v_4, v_2, v_3, v_1 の順となる. また, 精度 10^{-10} で計算するために必要な繰り返し回数は, 次のグラフのようになる.

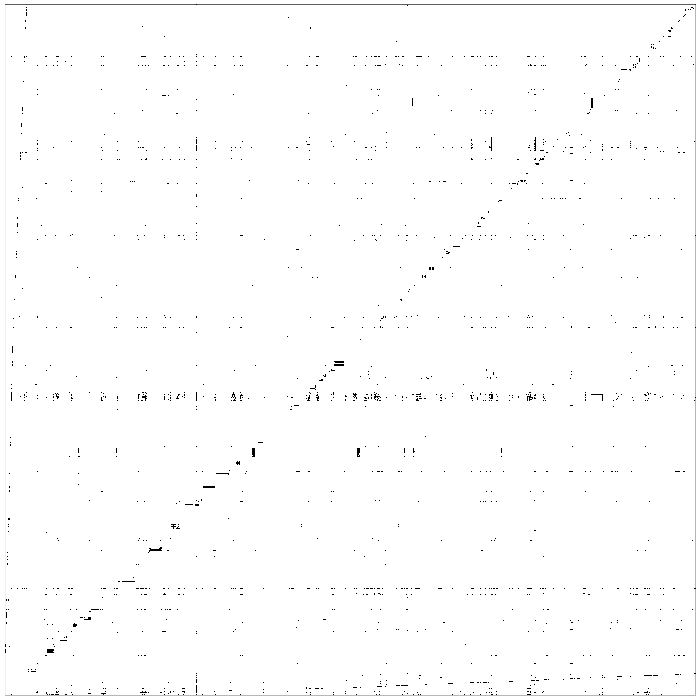


$\alpha = 0.50, 0.55, 0.60, 0.65, 0.70, 0.75, 0.80, 0.825, 0.85, 0.875, 0.90, 0.95, 0.99, 0.999$ と順に変化させたときの繰り返し回数と精度のグラフ

一方 α を変化させるとページランクの値は変化する．その変化の様子を表した図が次のものである．



Example 5.3.2. 最後の例は, [10] にある 2003 年頃の “Movie” というキーワードに一致した 5757 個のウェブページに関するリンクデータである．



リンクデータの隣接行列を図であらわしたもの
これをみると, N^2 個の要素の中で 0 でないものは非常に少ないことがわかる
(ページ数 $N = 5757$, リンク数 24451, 1 ページあたりの平均リンク数 4.25)

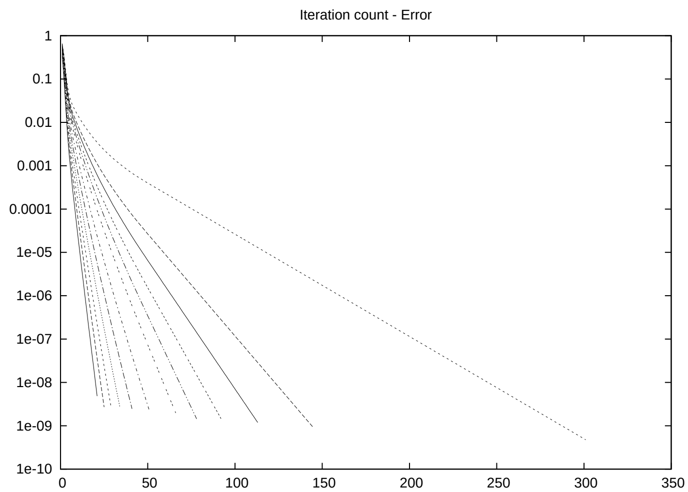
ここで, $\alpha = 0.85$ と取ったときのページランク上位は,

$$
\begin{aligned}
&419 = 3835 = 3839 = 3840 = 3842 = 3845 = 3846 = 3847 = 3848 = 3849 = 3850 \\
&> 1645 > 3712 > 3448 = 3457 > 1166
\end{aligned}
$$

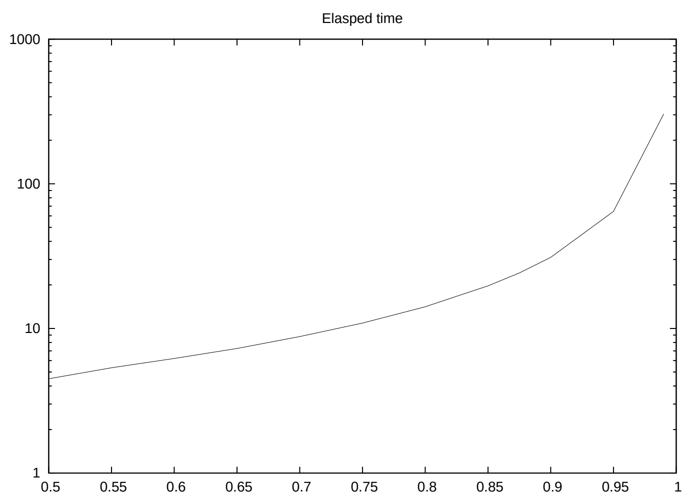
となっているのだが, $\alpha = 0.99$ の時のページランク上位は,

$$
\begin{aligned}
&1115 > 5415 > 5425 > 495 = 499 > 4067 > 4836 > 2411 > 3812 = 3815 > 2852 \\
&> 4715 = 4716 = 4717 = 4724 = 4726
\end{aligned}
$$

となって, α を変えると大幅にページランクが変わることが読み取れる. また, 精度 10^{-8} で計算するために必要な繰り返し回数と, そのための実際の計算時間は, 次のグラフのようになる.



繰り返し回数 ($\alpha = 0.50$ から 0.95 まで)



実計算時間 (MacPro Intel Xeon 3GHz, MacOSX 10.6.8)

この例からもわかるように, 大規模な計算では, ページランクは α に敏感に反応してしまう.

6　終りに

実際に Google 検索の結果に表示される順序は, ページランクの順序そのものではない. 検索結果に表示される順位は,

- そのページに含まれる検索語の数などの情報. しかも, 単純に「含まれる検索語の数」ではなく, 「検索語にマッチした語の重要性」（これは, HTML 構文から判定可能である）などにも依存している.
- ページランクの順位付けの過去の変動.
- ウェブページの更新頻度.
- Google が把握できる範囲でのアクセス状況.

などの多様な要素によって決定されている. （cf. Google 特許文書.）しかしながら, 検索結果の表示順位の主要部分を占めているのは, ページランクの値であることにかわりはなく, ページランクが低いページが検索結果の上位に出現することは極めて稀であり, ページランクが高いページが検索結果の極めて下位に出現することもほぼあり得ない.

このような内容も含めて, ここに解説した内容を発展させたページランクの改良等は [1] を参照するとよい.

参考文献

[1] A.N.Langville, C.D.Meyer, Google PageRank の数理, 共立出版, 2009.

[2] 斎藤正彦, 線形代数入門, 東京大学出版会, 1995.

[3] 佐竹一郎, 線形代数学, 裳華房, 1974.

[4] 砂田利一, 行列と行列式, 岩波書店, 2003.

[5] 長谷川浩司, 線形代数, 日本評論社, 2004,

[6] F. シャトラン, 行列の固有値, シュプリンガー東京, 2003.

[7] 砂田利一, ダイヤモンドはなぜ美しい, シュプリンガー東京, 2006.

[8] 熊谷隆, 確率論, 共立出版, 2003.

[9] Intel Processors,
`http://www.intel.com/support/processors/sb/CS-023143.html`,
(2011 年 8 月 1 日閲覧)

[10] Datasets for experiments on link analysis ranking algorithms,
`http://www.cs.toronto.edu/~tsap/experiments/datasets/`,
(2011 年 8 月 2 日閲覧)

- [1] が Google ページランクに関する, 現時点ではほぼ唯一の？参考書である.
- 線形代数の教科書としては [2], [3], [4] が標準的なものである. そのほかにも [5] は比較的平易で読みやすいかもしれない.
- ランダムウォーク（マルコフ過程）に関しては [8] に解説がある. そのほかにも [7] には, 一般のグラフ上のランダムウォークと幾何学との関連が説明されている.

索 引