1　特異値分解 (Singular Value Decomposition;SVD)

$$A = U\Sigma V \tag{1}$$

ここで A を $m \times n$ 行列で，U は $m \times m$ 直交行列，Σ は $m \times n$ 行列，V は $n \times n$ 直交行列である．Σ は対角行列であり，d_i^* を行列 A の特異値とすると，

$$D = diag(d_1^*, d_2^*, ..., d_n^*) \tag{2}$$

とかける．

特異値分解の性質

- A が与えられたとき，特異値を定める行列 Σ は一意に決まりますが，直交行列 U,V は一意に定まるとは限りません。
- 行列の（0 でない）特異値の数は，その行列のランクと一致します。
- 行列の特異値の二乗和はその行列の全成分の二乗和と等しいです。先ほどの具体例ではどちらも 24 になっています。この値の平方根を行列のフロベニウスノルムと言います。
- A が対称行列のとき，A の固有値と特異値は一致します。対称行列は直交行列で対角化できるからです。
- A^TA の 0 でない固有値の正の平方根は A の特異値です。これは，$A = U\ \Sigma\ V$ のとき $A^TA = V^T\ \Sigma^T\ \Sigma\ V$ であることから分かります。同様に，AA^T の 0 でない固有値の正の平方根も A の特異値です。

1.1　特異値分解の例題

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

$$A^TA = \begin{pmatrix} 10 & -5 & -5 \\ -5 & 7 & -2 \\ -5 & -2 & 7 \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$\phi(\lambda) = |\lambda I - A^T A| = (\lambda - 15)(\lambda - 9)\lambda = 0 \tag{5}$$

したがって，$A^T A$ の固有値は，$\lambda_1 = 15$，$\lambda_2 = 9$，$\lambda_3 = 0$ となるよって行列 A の特異値は，$\mu_1 = \sqrt{15}$，$\mu_1 = \sqrt{9} = 3$ となる．

$$\Delta_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{15} & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \tag{6}$$

さらに，$A^T AV_{[2]} = V_2 \Delta_2^2$，$U_{[2]} = AV_2 \Delta_2^{-1}$ より

$$U_{[2]} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{5}} & 0 \\ -\sqrt{\frac{1}{10}} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\sqrt{\frac{1}{10}} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \sqrt{\frac{2}{5}} & 0 \end{pmatrix},\ V_{[2]} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{7}$$

となるから，A の特異値分解は

$$A = \sqrt{15} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{10}} \\ -\frac{1}{\sqrt{10}} \\ \sqrt{\frac{2}{5}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} + 3 \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{8}$$

2　一般逆行列

定義　A を (n, m) 型行列とする線形方程式 $Ax = y$ が解 x をもつような y に対して，$x = A^- y$ がこの方程式の一つの解となる場合，(m, n) 型行列 A^- を A の一般逆行列という．ムーアペンローズ一般逆行列 (Moore and Penrose generalized inverse) の定義

1. $AA^- A = A$
2. $A^- AA^- = A^-$
3. $(AA^-)' = AA^-$
4. $(A^- A)' = A^- A$

補助定理　(n, m) 型行列 A の特異値分解が式 (1) で与えられ，S_1，S_2，S_3 がそれぞれ任意の $(r, n-r)$，$(m-r, r)$，$(m-r, n-r)$ 型行列のとき，A の一般逆行列は次式で与えられる．

$$A^- = V \begin{pmatrix} \Delta_r^{-1} & S_1 \\ S_2 & S_3 \end{pmatrix} U^T \tag{9}$$

特異値に関する性質　　特異値に関する補助定理 1

$$\max_{x} \frac{||Ax||}{||x||} = \mu_1(A) \tag{10}$$

特異値に関する補助定理 2

$$\max_{V_1' x = 0} \frac{x'A'Ax}{x'x} = \lambda_{s+1}(A'A) \max_{V_1' x = 0} \frac{||Ax||}{||x||} = \mu_{s+1}(A) \tag{11}$$

実際の計算

$$A^T A = \begin{pmatrix} 10 & -5 & -5 \\ -5 & 7 & -2 \\ -5 & -2 & 7 \end{pmatrix} \tag{12}$$

$A^T A$ の固有値，正規化された固有ベクトルを計算する．

$$\lambda = 3,\ 9 \tag{13}$$

はじめに $\lambda_1 = 3$ のとき

$$u_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{14}$$

次に $\lambda_2 = 9$ のとき

$$u_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{15}$$

固有値固有ベクトルを使って，次のベクトルを計算する．はじめに $\lambda_1 = 3$ のとき

$$v_1 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \tag{16}$$

次に $\lambda_2 = 9$ のとき

$$v_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{17}$$

それらの値を使って，特異値，ムーアペンローズ逆行列を計算できる．

$$A = \sqrt{3} v_1 u_1^T + \sqrt{9} v_2 u_2^T \tag{18}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & -\frac{3}{2} \\ -\frac{3}{2} & \frac{3}{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{19}$$

$$
\begin{aligned}
A^{-} &= \frac{1}{\sqrt{3}} u_1 v_1^T + \frac{1}{\sqrt{9}} u_2 v_2^T && (20) \\
&= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} && (21)
\end{aligned}
$$

参考文献

[1] 特異値分解の定義，性質，具体例, https://mathtrain.jp/svd

[2] 一般逆行列 https://www.slideshare.net/wosugi/ss-79624897

[3] 射影行列・一般逆行列・特異値分解