

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

$$A = U\Sigma V \quad (1)$$

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,

$$D = \text{diag}(d_1^*, d_2^*, \dots, d_n^*) \quad (2)$$

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 U, V 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。
- $A^T A$ 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 $A^T A = V^T \Sigma^T \Sigma V$ 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

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 2 & 4 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \\ -2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$A^T A = \begin{pmatrix} 10 & -5 & -5 \\ -5 & 7 & -2 \\ -5 & -2 & 7 \end{pmatrix} \quad (4)$$

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

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, $\mu_1 = \sqrt{15}$, $\mu_2 = \sqrt{9} = 3$ となる.

$$\Delta_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{15} & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \quad (6)$$

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

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

となるから, A の特異値分解は

$$A = \sqrt{15} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{10}} \\ -\frac{1}{\sqrt{10}} \\ \sqrt{\frac{2}{5}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} + 3 \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (8)$$

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.

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

特異値に関する性質 特異値に関する補助定理 1

$$\max_x \frac{\|Ax\|}{\|x\|} = \mu_1(A) \quad (10)$$

特異値に関する補助定理 2

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

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