特異値分解

ref: 線形代数セミナー p28〜30

k 本の左特異ベクトルの正規直交系 $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_k$ を拡張して、$\mathbb{R}^m$ の正規直交基底 $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{u}_{k+1}, \ldots, \boldsymbol{u}_m$ が定義できる
同様に、k 本の右特異ベクトルの正規直交系 $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k$ を拡張して、$\mathbb{R}^n$ の正規直交基底 $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{v}_{k+1}, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ が定義できる

$\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ と $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ はそれぞれ $AA^\top$ と $A^\top A$ の固有ベクトルであり、これらに対応する共通の固有値を $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ とおく

$AA^\top$ および $A^\top A$ は半正定値行列であるので、その固有値はすべて零か正の数である
また、$AA^\top$ および $A^\top A$ は対称行列であり、対称行列の階数 r は非零の固有値の個数に等しい
n 個の固有値のうち、r 個ある正の固有値は特異値の条件を満たすので、

- $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ は特異値（正の固有値）$\sigma_1, \ldots, \sigma_r$
- $\lambda_{r+1}, \ldots, \lambda_n$ は零の固有値

とする

特異値が r 個あることから、左特異ベクトルと特異値の組の個数、右特異ベクトルと特異値の組の個数は、どちらも r であることがいえる

$$k = r$$

以上の議論をまとめると、

$$AA^\top \boldsymbol{u}_i = \begin{cases} \sigma_i \boldsymbol{u}_i & (i = 1, \ldots, r) \\ \boldsymbol{0} & (i = r+1, \ldots, m) \end{cases}$$

$$A^\top A \boldsymbol{v}_i = \begin{cases} \sigma_i \boldsymbol{v} & (i = 1, \ldots, r) \\ \boldsymbol{0} & (i = r+1, \ldots, n) \end{cases}$$

ここで、$i = 1, \ldots, r$ の範囲に限っては、特異値と特異ベクトルの関係

より、

$$\begin{aligned} A^\top \boldsymbol{u}_i &= \sigma_i \boldsymbol{v}_i \\ A\boldsymbol{v}_i &= \sigma_i \boldsymbol{u}_i \end{aligned}$$

という形で書ける

$i > r$ の場合についても同じ形で書くために、次の定理を示す

行列積による零化

i. $AA^\top \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \Longrightarrow A^\top \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$

ii. $A^\top A\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \Longrightarrow A\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$

証明

(i) $AA^\top \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$ について

$AA^\top \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$ の両辺で $\boldsymbol{u}$ との内積をとって、

$$(\boldsymbol{u}, AA^\top \boldsymbol{u}) = 0$$

このとき、左辺は、

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{u}, AA^\top \boldsymbol{u}) &= (\boldsymbol{u}, A(A^\top \boldsymbol{u})) \\ &= (A^\top \boldsymbol{u}, A^\top \boldsymbol{u}) \\ &= \|A^\top \boldsymbol{u}\|^2 \end{aligned}$$

外側の A に
随伴公式を適用

と変形できるので、

$$\|A^\top \boldsymbol{u}\|^2 = 0$$

が成り立つ

ここで、内積の正値性

$$\|A^\top \boldsymbol{u}\|^2 = (A^\top \boldsymbol{u}, A^\top \boldsymbol{u}) \geq 0$$

において、等号が成立するのは、

$$A^\top \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$$

の場合のみである ■

(ii) $A^\top A\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$ について

$A^\top A\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$ の両辺で $\boldsymbol{v}$ との内積をとって、

$$(\boldsymbol{v}, A^\top A\boldsymbol{v}) = 0$$

このとき、左辺は、

$$(\boldsymbol{v}, A^\top A\boldsymbol{v}) = (A\boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v}) = \|A\boldsymbol{v}\|^2$$

と変形できるので、

$$\|A\boldsymbol{v}\|^2 = 0$$

が成り立つ

ここで、内積の正値性

$$\|A\boldsymbol{v}\|^2 = (A\boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v}) \geq 0$$

において、等号が成立するのは、

$$A\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$$

の場合のみである ■

この定理を用いると、

$$A\boldsymbol{v}_i = \begin{cases} \sigma_i \boldsymbol{u}_i & (i = 1, \ldots, r) \\ \mathbf{0} & (i = r+1, \ldots, m) \end{cases}$$

$$A^\top \boldsymbol{u}_i = \begin{cases} \sigma_i \boldsymbol{v}_i & (i = 1, \ldots, r) \\ \mathbf{0} & (i = r+1, \ldots, n) \end{cases}$$

とまとめられる

これより、A は $\mathbb{R}^n$ の正規直交基底 $\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ をそれぞれ

$$\sigma_1 \boldsymbol{u}_1, \ldots, \sigma_r \boldsymbol{u}_r, \mathbf{0}, \ldots, \mathbf{0}$$

に写像するから、正規直交基底による表現行列の展開より、A は

$$A = \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^\top + \cdots + \sigma_r \boldsymbol{u}_r \boldsymbol{v}_r^\top \quad (\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0)$$

と表すことができる

同様に、$A^\top$ は $\mathbb{R}^m$ の正規直交基底 $\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_m\}$ をそれぞれ

$$\sigma_1 \boldsymbol{v}_1, \ldots, \sigma_r \boldsymbol{v}_r, \mathbf{0}, \ldots, \mathbf{0}$$

に写像するから、$A^\top$ は

$$A^\top = \sigma_1 \boldsymbol{v}_1 \boldsymbol{u}_1^\top + \cdots + \sigma_r \boldsymbol{v}_r \boldsymbol{u}_r^\top \quad (\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0)$$

と表すことができる

このように、任意の行列は、その特異値と特異ベクトルによって表すことができ、これを**特異値分解**と呼ぶ