



特異値分解

k 本の左特異ベクトルの正規直交系 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k$ を拡張して、 \mathbb{R}^m の正規直交基底 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k+1}, \dots, \mathbf{u}_m$ が定義できる

ref: 線形代数セミナー
p28~30

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

$\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ と $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ 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 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 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、

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

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

ここで、 $i = 1, \dots, r$ 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

todo

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

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

証明

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

$AA^{\top} \boldsymbol{u} = \mathbf{0}$ 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、

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{u}, AA^{\top} \boldsymbol{u}) &= (\boldsymbol{u}, A(A^{\top} \boldsymbol{u})) \\ &= (A^{\top} \boldsymbol{u}, A^{\top} \boldsymbol{u}) \quad \left. \begin{array}{l} \text{外側の } A \text{ に} \\ \text{随伴公式を適用} \end{array} \right\} \\ &= \|A^{\top} \boldsymbol{u}\|^2\end{aligned}$$

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、

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

の場合のみである 

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

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

$$(\mathbf{v}, A^T A \mathbf{v}) = 0$$

このとき、左辺は、

$$(\mathbf{v}, A^T A \mathbf{v}) = (A \mathbf{v}, A \mathbf{v}) = \|A \mathbf{v}\|^2$$

と変形できるので、

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

が成り立つ

ここで、内積の正值性

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

において、等号が成立するのは、

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

の場合のみである ■

この定理を用いると、

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

とまとめられる

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

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

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

$$A = \sigma_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T + \dots + \sigma_r \mathbf{u}_r \mathbf{v}_r^T \quad (\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r > 0)$$

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 $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$ をそれぞれ

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

に写像するから、 A^\top は

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

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