特異値と特異値分解

1. 特異値と特異ベクトル

　A を $m \times n$ 行列とし $m \geq n$ であるとする（そうでない場合には転置行列を改めて A とすればよい）．$A^T A$ は n 次の対称行列である．ここでは，A 自身の分解を考える．まず $A^T A$ および AA^T の固有値，固有ベクトルの関係をみる．

定理 1（固有値の性質）

　任意の $m \times n$ 行列 A に対し，$A^T A$ と AA^T の 0 でない固有値は等しい．

（証明）

　λ を $A^T A$ の 0 でない固有値とし，$\boldsymbol{v}$ をその固有ベクトルとすると

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

と書ける．この式の両辺の左から A をかけると

$$AA^T A \boldsymbol{v} = \lambda A \boldsymbol{v}$$

となるので，$\boldsymbol{u} = A\boldsymbol{v}$ とおくと

$$AA^T \boldsymbol{u} = \lambda \boldsymbol{u}$$

となる．これより，λ は AA^T の固有値でもある．逆も成り立つ．

（証明終）

　$A^T A$ と AA^T の固有ベクトルについては次の関係がある．

定理 2（固有ベクトル間の関係）

　固有値 λ に対応する $A^T A$ の正規化された固有ベクトルを $\boldsymbol{v}$ および同じ λ に対応する AA^T の正規化された固有ベクトル $\boldsymbol{u}$ 間には

$$\boldsymbol{u} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} A \boldsymbol{v}, \quad \boldsymbol{v} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} A^T \boldsymbol{u}$$

の関係がある．

（証明）

定理１の証明から固有値λに対応する A^TA の固有値ベクトルを $\boldsymbol{v}$ とするとき $\boldsymbol{u} = A\boldsymbol{v}$ は同じ固有値に対応する AA^T の固有ベクトルとなる．$\|\boldsymbol{v}\| = 1$ とすると

$$\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{u} = \frac{1}{\lambda}\boldsymbol{v}^T A^T A\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^T\boldsymbol{v} = 1$$

となる．もう片方も成り立つ．（証明終）

$m \times n$ 行列 A の階数を $r = \mathrm{rank}\, A$ とすると，A^TA と AA^T は共に階数 r の非負定値対称行列となる．これらの行列は共に r 個の正の固有値 $\lambda_i\,(i = 1, . . . , r)$ を持ち，それらは定理１より互いに等しくなる．そして，$m \times n$ 行列 A の分解には以下で定義する特異値，特異ベクトルが主要な役割を果たす．

定義１（特異値と特異ベクトル）

階数 r の $m \times n$ 行列 A に対し，AA^T あるいは A^TA の 0 でない固有値$\lambda_i\,(i = 1, . . . , r)$ の正の平方根

$$\mu_i = \sqrt{\lambda_i} \quad (i = 1, \ldots, r)$$

を A の特異値 (singular value) という．また，対応する固有ベクトル $\boldsymbol{u}_1, . . . , \boldsymbol{u}_r$ および $\boldsymbol{v}_1, . . . , \boldsymbol{v}_r$ を特異ベクトル (singular vector) という．

一般化逆行列

1. 一般化逆行列の定義

n 次正方行列 A が正則のとき，$AA^{-1} = A^{-1}A = I$ を満足する逆行列 A^{-1} が存在する．しかし，正方行列であっても正則でない行列および正方でない行列には逆行列は存在しない．ここでは，逆行列を一般化し，正方でない行列を含むすべての行列に対して定義される一般化逆行列について述べる．

定義 1（一般化逆行列）

$m \times n$ 行列 A に対し，

(1) $$AGA = A$$

を満足する $n \times m$ 行列 G を A の一般化逆行列（generalized inverse あるいは簡単に g-inverse）といい A^- と書く．

A が正則でその逆行列を A^{-1} とすると，A^{-1} は

$$AA^{-1}A = I \times A = A$$

より (1) を満足する．逆行列が存在しない場合でも A^- は常に存在するので A^- は逆行列 A^{-1} の一般化であり，その意味で一般化逆行列と呼ばれる．

例 1

一般化逆行列を具体的に求めてみよう．いま，

(2) $$A = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

としたとき，

$$A^- = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

とすると

$$AA^-A = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4a+2b+4c+2d & 4a+2b+4c+2d \\ 2a+b+2c+d & 2a+b+2c+d \end{pmatrix}$$
$$= A = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

であるので，条件

$$2a+b+2c+d=1$$

が成り立つ必要がある．したがって，(2) の A の一般化逆行列 A^- は，a，b，c を任意の定数として

(3) $$A^- = \begin{pmatrix} a & b \\ c & 1-2a-b-2c \end{pmatrix}$$

となる．たとえば，$a=1/2$，$b=c=0$ とすると，

$$G_1=\begin{pmatrix}1/2 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

となり，$a=1$，$b=c=0$ とすると

$$G_2=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

となる．明らかに G_1 は階数 1，G_2 は階数 2 である．

一般に，

(4)
$$A=\begin{pmatrix}g & rg\\ h & rh\end{pmatrix}$$

とすると，$AA^{-}A=A$ より条件

$$ga+hb+rgc+rhd=1$$

が導かれるので、一般化逆行列 A^{-} は

(5)
$$A^{-}=\begin{pmatrix}a & b\\ c & (1-ga-hb-rgc)/rh\end{pmatrix}$$

となる．$r=1$ のとき条件は

$$ga+hb+gc+hd=1$$

となり，$g=2$，$h=1$ とすると (5) は (3) に一致する．（例終）

上の例で見たように，行列の一般化逆行列は一意的には定まらず，その階数も異なる．一般化逆行列は線形連立方程式の解と密接な関係がある．

定理 1（連立方程式の解）

$\boldsymbol{y}$ を m 次ベクトルとした連立一次方程式

(6)
$$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$$

が解を持つとき，$n\times m$ 行列 G に対し，$\boldsymbol{x}=G\boldsymbol{y}$ が (6) の解となるための必要十分条件は G が (1) を満足する A の一般化逆行列となることである．

（証明）

○ 必要性

$AGA = A$ が成り立つとする．(6) は解を持つので $\boldsymbol{y}$ は A の値域 $S(A)$ に属し，ある $\boldsymbol{b}$ を用いて $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{b}$ と書くことができる．$AGA = A$ の両辺の右から $\boldsymbol{b}$ をかけると

$$AGA = A \Rightarrow AGA\boldsymbol{b} = A\boldsymbol{b} \Rightarrow AG\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}$$

であるので，$\boldsymbol{x} = G\boldsymbol{y}$ は $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ を満たし (6) の解となる．

○ 十分性

$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ を満たす任意のひとつの解を $\boldsymbol{x}_1$ とする．すなわち $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}_1$ である. いま与えられた G に対し, $\boldsymbol{x}_2 = G\boldsymbol{y}$ とする ($\boldsymbol{x}_1$ と $\boldsymbol{x}_2$ は一致しないかもしれない)．題意より $\boldsymbol{x}_2$ は $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ の解であるので，$A\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{y}$ が成り立つ． これより,

$$A\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}_2 = AG\boldsymbol{y} = AGA\boldsymbol{x}_1$$

が任意の $\boldsymbol{x}_1$ に対して成立するので $AGA = A$ が成り立つ.（証明終)

定理 1 は必要十分条件であるので，一般化逆行列の定義を連立一次方程式 (6) の解 $\boldsymbol{x} = G\boldsymbol{y}$ を与える行列 G としてもよい.

例 2（例 1 の続き）

(2) の A に対し，連立一次方程式を

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix}$$

(7)

とすると

$$A^{-}y = \begin{pmatrix} a & b \\ c & 1-2a-b-2c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4a+2b \\ 2-(4a+2b) \end{pmatrix}$$

であるので，$r = 4a+2b$ と置き (7) の一般解

$$A^{-}y = \begin{pmatrix} r \\ 2-r \end{pmatrix}$$

が得られる．ところが，(7) の右辺を零ベクトル $\boldsymbol{0}$ と置いた同次方程式

(8) $$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

については，$\boldsymbol{x} = A^{-}\boldsymbol{0} = \boldsymbol{0}$ は明らかに解であるが，(8) の一般解

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} r \\ -r \end{pmatrix}$$

は $\boldsymbol{x} = A^{-}\boldsymbol{0}$ の形には表わせない．（例終）

一般化逆行列は定理 1 に述べたように連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ の解と密接な関係があるが，G は一般に R^m から R^n への変換行列であり，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ が解を持たないような $\boldsymbol{y}$ に対しても $\boldsymbol{x} = G\boldsymbol{y}$ は定義される．

定理 2

行列 A の一般化逆行列を A^{-} とするとき，

$$\mathrm{rank}(A^{-}) \geq \mathrm{rank}(A)$$

である．

（証明）

一般に $\mathrm{rank}(AB) \leq \mathrm{rank}(A)$ である．$\mathrm{rank}(A^{-}) < \mathrm{rank}(A)$ とすると, $\mathrm{rank}(AA^{-}A) < \mathrm{rank}(A)$ となり $AA^{-}A = A$ に矛盾する．（証明終）

ムーアーペンローズ型一般化逆行列

定義 1（ムーアーペンローズ型一般化逆行列）

$m \times n$ 行列 A に対し，一般化逆行列の条件 $AGA = A$ に加え，

(1) (i) $GAG = G$, (ii) $(GA)^T = GA$, (iii) $(AG)^T = AG$,

の 3 条件を満足する $n \times m$ 行列 G を A のムーアーペンローズ型一般化逆行列 (Moore-Penrose generalized inverse) といい A^{+} と書く．

定理 1（ムーアーペンローズ型一般化逆行列の一意性）

ムーアーペンローズ型一般化逆行列は一意的に定められる．

（証明）

G および H を 2 つのムーアーペンローズ型一般化逆行列とすると，

$G = GAG = (GA)G = (GA)^TG = A^TG^TG = (AHA)^TG^TG = A^TH^TA^TG^TG$

$= A^T H^T (GA)^T G = A^T H^T GAG = A^T H^T G = (HA)^T G = HAG = H(AHA)G$
$= H(AH)(AG) = H(AH)^T(AG)^T = H(H^T A^T)(G^T A^T) = HH^T(A^T G^T A^T)$
$= HH^T(AGA)^T = HH^T A^T = H(AH)^T = HAH = H$
となり，G と H は一致する．（証明終）

<u>定理 2（ムーアーペンローズ型一般化逆行列の表現）</u>

$m \times n$ 行列 A の特異値分解を

$$A = U_1 \Delta_1 V_1^T$$

とする. ここで Δ_1 は0でない特異値からなる対角行列である. このとき，A のムーアーペンローズ型一般化逆行列 A^+ は

(2) $$A^+ = V_1 \Delta_1^{-1} U_1^T$$

で与えられる.

（証明）

定義 1 の 4 条件が成立することを確かめればよい．まず

$$AA^+A = (U_1\Delta_1V_1^T)(V_1\Delta_1^{-1}U_1^T)(U_1\Delta_1V_1^T) = U_1\Delta_1V_1^T = A$$

であり，

(i) $A^+AA^+ = (V_1\Delta_1^{-1}U_1^T)(U_1\Delta_1V_1^T)(V_1\Delta_1^{-1}U_1^T) = V_1\Delta_1^{-1}U_1^T = A^+$
(ii) $(A^+A)^T = \{(V_1\Delta_1^{-1}U_1^T)(U_1\Delta_1V_1^T)\}^T = (V_1V_1^T)^T = V_1V_1^T = A^+A$
(iii) $(AA^+)^T = \{(U_1\Delta_1V_1^T)(V_1\Delta_1^{-1}U_1^T)\}^T = (U_1U_1^T)^T = U_1U_1^T = AA^+$

より確かめられた.（証明終）

<u>例 1</u>

(2) の行列 A のムーアーペンローズ型一般化逆行列を求めよう．まず，A の特異値分解を求める.

$$AA^T = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 & 4 \\ 4 & 2 \end{pmatrix}$$

であり，その固有値は$\lambda =$ 10 および 0 となる．したがって特異値は

$$\mu_1 = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{10}$$

となり，$\lambda_1 = 10$ に対応する正規化された固有ベクトルは

$$\boldsymbol{u}_1 = \begin{pmatrix} 2/\sqrt{5} \\ 1/\sqrt{5} \end{pmatrix}$$

となる．次に,

$$A^T A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 5 \\ 5 & 5 \end{pmatrix}$$

であるので，その固有値は同じく $\lambda = 10$ および 0 となり，$\lambda_1 = 10$ に対応する正規化された固有ベクトルは

$$\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

と計算される．よって，A の特異値分解は

$$A = \mu_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1{}^T = \sqrt{10}\begin{pmatrix} 2/\sqrt{5} \\ 1/\sqrt{5} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

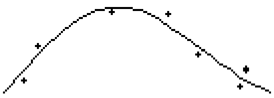
となる．しかるに，定理 1 より A のムーアーペンローズ型一般化逆行列 A^+ は (2) より

$$A^+ = \frac{1}{\mu_1} v_1 u_1{}^T = \frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} \end{pmatrix} = \frac{1}{10}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

と求められる．これは (3) で求めた一般化逆行列の一般形で $a = 2/10$，$b = 1/10$，$c = 2/10$ と置いたものに相当している．（例終）

最小２乗法、ムーアペンローズ一般化逆行列のカーブフィッティングへの応用

多項式を $y=a_0+a_1x+\cdots+a_Nx^N$ で表し、誤差 $S=\sum_{i=1}^{M}\left(y_i-\sum_{n=0}^{N}a_nx_i^n\right)^2$ を最小にするよう係数 a_0,・・・,a_n を決める、つまり逆問題を解くことになる。



$$\frac{\partial S}{\partial a_n}=\sum_{i=1}^{M}\left\{2a_nx_i^{2n}-2x_i^n\left(y_i-\sum_{m\neq n}a_mx_i^m\right)\right\}=0 \quad (x_i, y_i)\ i=1\text{〜}M$$

を解く。結果は、次の連立方程式（１）を解くことになる。

$$\begin{pmatrix} \sum x_i^{0+0} \cdots \sum x_i^{0+N} \\ \vdots \qquad\quad \vdots \\ \sum x_i^{N+0} \cdots \sum x_i^{N+N} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{M} y_i \\ \sum_{i=1}^{M} x_i y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{M} x_i^N y_i \end{pmatrix} \qquad (1)$$

付け加えて言うならば、式の数 M が変数の数 N より多い連立方程式、

$$\begin{pmatrix} \sum x_i^{0} \cdots \sum x_i^{N} \\ \vdots \qquad \vdots \\ \sum x_i^{0} \cdots \sum x_i^{N} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_M \end{pmatrix} \qquad (2)$$

において、両辺に左から A の転置行列 A^t を掛けて、$A^tAX=A^tb$ とした式と（１）式は同じである。X について解いた式、X

$=(A^tA)^{-1}A^t b$ において $A^+=(A^tA)^{-1}A^t$ とおいた A^+ が、ムーアペンローズ逆行列である。$X=A^+b$ となる。直線近似では　$y=a_0+a_1x$ であるから、（１）式は（３）式になる。

$$\begin{pmatrix} M & \sum_{i=1}^{M} x_i \\ \sum_{i=1}^{M} x_i & \sum_{i=1}^{M} x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{M} y_i \\ \sum_{i=1}^{M} x_i y_i \end{pmatrix} \qquad (3)$$

以下に､いろいろなケースの逆行列計算結果を示す。

係数行列

1	2	3
2	3	1

1	2
2	3
3	1

1	1
1	-2
-2	1

逆行列(ランク=2)

-3	2
2	-1

逆行列(ランク=2)

-3	2
2	-1

逆行列(ランク=2)

	0.3333
0.66667	3
0.33333	-0.3333

ムーアペンローズ逆行列

-0.106	0.2266
7	7

ムーアペンローズ逆行列

-0.106	-0.066	
7	7	0.41333

ムーアペンローズ逆行列

	-0.3
0.33333	0 333

-0.066 7	0.2666 7
0.4133 3	-0.253 3

固有値 λ2

25 3

特異値 μ=Sqr(λ2)

1.7320

5 5

ベクトル U

0.7071 1	0.7071 1
0.7071 1	-0.707 1

ベクトル V

0.7071 1	0.7071 1
0.7071 1	-0.707 1

0.2266 7	0.2666 7	-0.2533

固有値 λ2

25 3

特異値 μ=Sqr(λ2)

1.7320

5 5

ベクトル U

0.7071 1	0.7071 1
0.7071 1	-0.707 1

ベクトル V

0.7071 1	0.7071 1
0.7071 1	-0.707 1

0.33333	-0.3333	0

固有値 λ2

9 3

特異値 μ=Sqr(λ2)

1.73

3 205

ベクトル U

0.70711	0.70 711
-0.7071	0.70 711

ベクトル V

0.70711	-0.7071
0.70711	0.7071 1

2	1	3	3
4	2	1	6
2	4	2	3

逆行列(ランク=3)

	0.3333	-0.166
0	3	7
	-0.066	0.3333
-0.2	7	3
0.4	-0.2	0

ムーアペンローズ逆行列

	0.1025	-0.051
0	6	3
	-0.066	0.3333
-0.2	7	3
0.4	-0.2	0
	0.1538	-0.076
0	5	9

固有値 λ2

2	4	2
1	2	4
3	1	2
3	6	3

逆行列(ランク=3)

0	-0.2	0.4
	-0.066	
0.33333	7	-0.2
	0.3333	
-0.1667	3	0

ムーアペンローズ逆行列

0	-0.2	0.4	0
	-0.066		0.1538
0.10256	7	-0.2	5
	0.3333		
-0.0513	3	0	-0.0769

固有値 λ2

101.847.12774.0294

3 8 1

特異値 μ=Sqr(λ2)

10.0912.66972.0073

7 9 4

ベクトルU

		0.8872
0.4397	0.1393	8
0.7271	-0.635	-0.260
7	1	7
0.5271	0.7598	-0.380
6	1	5

ベクトルV

	0.7271	0.5271
0.4397	7	6
	-0.635	0.7598
0.1393	1	1
0.8872	-0.260	-0.380
8	7	5

7.1277

101.843 8 4.02941

特異値 μ=Sqr(λ2)

2.6697

10.0917 9 2.00734

ベクトルU

0.4397	0.1393	0.88728
	-0.635	
0.72717	1	-0.2607
	0.7598	
0.52716	1	-0.3805

ベクトルV

	0.7271	
0.4397	7	0.52716
	-0.635	
0.1393	1	0.75981
	-0.260	
0.88728	7	-0.3805