レッスン　11　特異値分解

レッスン 11 の主題は$m\times n$行列$\mathbf{A}$の特異値分解$\mathbf{A}=\mathbf{U}\cdot diag\{\sigma_1,\cdots,\sigma_r,\mathbf{0}\}\cdot\mathbf{V}^*$、ここに$\sigma_1\geq\cdots\geq\sigma_r>0,\ r=rank(\mathbf{A}),\ \mathbf{U}^{-1}=\mathbf{U}^*,\mathbf{V}^{-1}=\mathbf{V}^*$、である。これは$\mathbf{A}^*\mathbf{A}$または$\mathbf{A}\mathbf{A}^*$のシュール分解をいくらか変形したものと見なせる。そして$\mathbf{A}$の最大特異値σ_1は$\mathbf{A}$の 2-演算子ノルムに等しい。$\mathbf{A}$がn次可逆行列なら、$\mathbf{A}$を中心とする半径σ_nの開球は可逆行列のみを含む。また、σ_n^{-1}は$\mathbf{A}^{-1}$の 2-演算子ノルムに等しい。特異値分解の用途は、階数分析、行列方程式の誤差解析、最小自乗法、次節の主題 CS 分解など、多彩である。

11.1　実行列の特異値分解

(I)　定義　与えられた$m\times n$実行列$\mathbf{A}$は適当なm次実直交行列$\mathbf{U}$（$\mathbf{U}^{-1}=\mathbf{U}^T$）および$n$次実直交行列$\mathbf{V}$（$\mathbf{V}^{-1}=\mathbf{V}^T$）をとれば、

$$(1)\quad \mathbf{A}=\mathbf{U}\left[\begin{array}{ccc:c}\sigma_1 & & \mathbf{0} & \\ & \ddots & & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & & \sigma_r & \\ \hdashline & \mathbf{0} & & \mathbf{0}\end{array}\right]\mathbf{V}^T\equiv\mathbf{U}diag\{\sigma_1,\cdots,\sigma_r,\mathbf{0}\}\mathbf{V}^T\equiv\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T$$

の形に分解できる。ここに、$\sigma_1\geq\cdots\geq\sigma_r>\sigma_{r+1}=\cdots=\sigma_{m\wedge n}=0$を$\mathbf{A}$の<u>特異値</u> singular value といい、(1)を$\mathbf{A}$の<u>特異値分解</u> singular value decomposition, SVD という。ここに$r=rank(\mathbf{A})$、$m\wedge n\equiv\min\{m,n\}$。そして、$\Sigma$を特異値分解の<u>標準形</u> cannonical form という。証明は後述する。

(1)を受け入れると、

$$\mathbf{V}^T(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{V}=\Sigma^T\Sigma=diag\{\sigma_1^2,\cdots,\sigma_r^2,\mathbf{0}\}:n\times n$$

$$\mathbf{U}^T(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)\mathbf{U}=\Sigma\Sigma^T=diag\{\sigma_1^2,\cdots,\sigma_r^2,\mathbf{0}\}:m\times m$$

が従う。ゆえに、$\mathbf{A}$の各特異値は$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$または$\mathbf{A}\mathbf{A}^T$の大きい方から$m\wedge n$個の固有値の平方根に等しい。これより、特異値と標準形Σは$\mathbf{A}$によって一意的に定まることがわかる。また、$\mathbf{A}$と$\mathbf{B}\equiv\mathbf{PAQ}$（ただし、$\mathbf{P},\mathbf{Q}$は任意の直交行列）は同一の標準形をもつことがわかる。この関係を$\mathbf{A}\sim\mathbf{B}$によって表せば、関係「～」は回帰性、対称性、推移性を満たすので、同値関係を表す。また、直前の 2 式より、$\mathbf{U}$の各列は$\mathbf{A}\mathbf{A}^T$の固有ベクトル、$\mathbf{V}$の各列は$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$の固有ベ

クトルを表すこともわかる。$\mathbf{U}$ の各列を $\mathbf{A}$ の左特異ベクトル left singular vector、$\mathbf{V}$ の各列を右特異ベクトル right singular vector という。$\mathbf{R}^n$ 、$\mathbf{R}^m$ 内に直交座標変換 $\mathbf{x}=\mathbf{V}\mathbf{x}'$ 、$\mathbf{y}=\mathbf{U}\mathbf{y}'$ を導入すれば、$\mathbf{y}=\mathbf{A}\mathbf{x}$ は $\mathbf{y}'=\mathbf{U}^T\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{x}'=\Sigma\mathbf{x}'$ となる。すなわち、Σ は今導入した新座標系から見た $\mathbf{A}$ の姿を表すものと解釈できる。

証明　n 次実対称行列 $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ のシュール分解（→レッスン 7）を

(*)　$\mathbf{V}^T(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{V}=\mathbf{D}\equiv diag\{d_1,\cdots,d_n\}=diag\{d_1,\cdots,d_r,\mathbf{0}\}$ （$r=rank(\mathbf{A})$）

とする。ここに $\mathbf{V}$ は適当な n 次直交行列を表し、$d_1\geq\cdots\geq d_n$ にとるものとする。

$$0\leq(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{e}_i)^T(\mathbf{A}\mathbf{V}\mathbf{e}_i)=(\mathbf{V}\mathbf{e}_i)^T(\mathbf{A}^T\mathbf{A})(\mathbf{V}\mathbf{e}_i)=(\mathbf{V}\mathbf{e}_i)^T(\mathbf{V}\mathbf{D}\mathbf{V}^T)(\mathbf{V}\mathbf{e}_i)=\mathbf{e}_i{}^T\mathbf{D}\mathbf{e}_i=d_i$$

ここに $\mathbf{e}_i$ は第 i 単位ベクトルを表す（$i=1,\cdots,n$）。そこで $d_i=\sigma_i{}^2,\sigma_i\geq 0$ と書き、(*)を

$$(\mathbf{A}\mathbf{V})^T\mathbf{A}\mathbf{V}=(\mathbf{A}\mathbf{V})^T(\mathbf{A}\mathbf{V})=\mathbf{D}=diag\{\sigma_1{}^2,\cdots,\sigma_r{}^2,\mathbf{0}\}\quad(\sigma_1\geq\cdots\geq\sigma_r>0)$$

と書き直し、$\mathbf{A}\mathbf{V}=\left[\mathbf{p}_1\cdots\mathbf{p}_r\cdots\mathbf{p}_n\right]:\ m\times n$ と書けば、直前の式は

$$(\mathbf{p}_i/\sigma_i)^T(\mathbf{p}_j/\sigma_j)=\delta_{ij}\ (i,j=1,\cdots,r),\ \mathbf{p}_j=\mathbf{0}\ (r<j\leq n)$$

は意味する。すなわち、$\{\mathbf{u}_1\equiv\mathbf{p}_1/\sigma_1,\cdots,\mathbf{u}_r\equiv\mathbf{p}_r/\sigma_r\}$ は正規直交系をなす。これを $\mathbf{R}^{m\times 1}$ の正規直交基底 $\{\mathbf{u}_1,\cdots,\mathbf{u}_r,\mathbf{u}_{r+1},\cdots,\mathbf{u}_m\}$ に拡張し、これらを列とする行列 $\mathbf{U}=\left[\mathbf{u}_1,\cdots,\mathbf{u}_m\right]:\ m\times m$ を定義すると、$\mathbf{U}$ は $\mathbf{U}^T\mathbf{U}=\mathbf{I}$ を満たし、

$$\mathbf{U}^T\mathbf{A}\mathbf{V}=\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1{}^T\\ \vdots\\ \mathbf{u}_r{}^T\\ \vdots\\ \mathbf{u}_m{}^T\end{bmatrix}\left[\mathbf{p}_1\cdots\mathbf{p}_r\ \ \mathbf{0}\cdots\mathbf{0}\right]=diag\{\sigma_1,\cdots,\sigma_r,\mathbf{0}\}$$

となる。これは $\mathbf{A}$ の特異値分解形に他ならない。$\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ のシュール分解 $\mathbf{U}^T\mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{U}):\ m\times m$ から出発しても、同様の手続きを踏めば、やはり $\mathbf{A}$ の特異値分解を導出できる。■

(1)において、$\mathbf{U}=\left[\mathbf{u}_1\cdots\mathbf{u}_m\right],\ \mathbf{V}=\left[\mathbf{v}_1\cdots\mathbf{v}_n\right]$ と書けば、次の関係従う：

(2)　$\mathbf{A}\mathbf{V}=\mathbf{U}\Sigma$ 、すなわち、$\mathbf{A}\mathbf{v}_j=\sigma_j\mathbf{u}_j\ \ (j=1,\cdots,r)$

(3)　$\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T = \left[\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_m\right]\begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \mathbf{0} \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_r & \\ \mathbf{0} & & & \mathbf{0} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{v}_1{}^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n{}^T \end{bmatrix} = \sigma_1\mathbf{u}_1\mathbf{v}_1{}^T + \cdots + \sigma_r\mathbf{u}_r\mathbf{v}_r{}^T$

(2)(3)もともに有用な式である。

例 1　$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \equiv \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T$ は $\mathbf{A}$ の特異値分解を表す。特異値は $\sigma_1 = 2,\ \sigma_2 = 1$ によって与えられる。■

例 2　$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = (\frac{1}{\alpha}\begin{bmatrix} a_1 & -a_2 \\ a_2 & a_1 \end{bmatrix}) \cdot \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix} \cdot [1] \equiv \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T$（ただし、$\alpha \equiv \sqrt{a_1{}^2 + a_2{}^2} > 0$）は $\mathbf{A}$ の特異値分解を表す。特異値は $\sigma_1 = \alpha$ の 1 個のみである。■

例 3　$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix}$ $(\alpha \equiv \sqrt{a_1{}^2 + \cdots + a_m{}^2} > 0)$　$\mathbf{A}$ の特異値は $\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \left[a_1{}^2 + \cdots + a_m{}^2\right]$:$1\times1$ の固有値の平方根、すなわち $\sigma_1 = \alpha$ によって与えられる。特異値分解を考えると、$a_2 = \cdots = a_n = 0$ の場合は $\mathbf{A} = \pm\mathbf{I}\cdot\left[|a_1|\ 0 \cdots 0\right]^T \cdot [1]$ としてよく、$a_2{}^2 + \cdots + a_n{}^2 > 0$ の場合は、$\mathbf{HA} = \alpha\mathbf{e}_1$ を満たす反射行列 $\mathbf{H} = \mathbf{I} - 2\mathbf{w}\mathbf{w}^T / \mathbf{w}^T\mathbf{w}$　$(\mathbf{w} = \mathbf{A} - \alpha\mathbf{e}_1 \neq \mathbf{0})$ をとれば、この式自体が特異値分解を表す。反射行列についてはレッスン 7、7.2 節参照。■

例 4　$\mathbf{D} = diag\{d_1, \cdots, d_n\} \in \mathbf{R}^{n\times n}$　$d_1, \cdots, d_n$ を絶対値の減少する順に並べかえたものを $d_\alpha, d_\beta, \cdots, d_\gamma$、$\mathbf{P} = \left[\mathrm{sgn}(d_\alpha)\mathbf{e}_\alpha\ \mathrm{sgn}(d_\beta)\mathbf{e}_\beta \cdots \mathrm{sgn}(d_\gamma)\mathbf{e}_\gamma\right]$（$\mathbf{e}_1 = \left[1\ 0 \cdots 0\right]^T, \cdots$、$\mathrm{sgn}(a) = 1 (a \geq 0),\ -1 (a < 0)$、$\mathrm{sgn}(a)\cdot a = |a|$）、$\mathbf{Q} = \left[\mathbf{e}_\alpha\ \mathbf{e}_\beta \cdots \mathbf{e}_\gamma\right]$ とすれば、$\mathbf{P}^T\mathbf{P} = \mathbf{Q}^T\mathbf{Q} = \mathbf{I}$、$\mathbf{P}^T\mathbf{D}\mathbf{Q} = diag\{|d_\alpha|, |d_\beta|, \cdots, |d_\gamma|\}$ は $\mathbf{D}$ の特異値分解を与えている。■

11.2　複素行列の特異値分解

与えられた $\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{m\times n}$ は適当なユニタリ行列 $\mathbf{U} \in \mathbf{C}^{m\times m},\ \mathbf{V} \in \mathbf{C}^{n\times n}$（$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^*, \mathbf{V}^{-1} = \mathbf{V}^*$）に対して

(1)　$\mathbf{A} = \mathbf{U}^* diag\{\sigma_1, \cdots, \sigma_r, \mathbf{0}\}\mathbf{V} \equiv \mathbf{U}^*\Sigma\mathbf{V}$（$r = rank(\mathbf{A}),\ \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$）

の形に分解できる。これを複素行列 $\mathbf{A}$ の特異値分解という。 証明法は前節の実行列に対するものを多少変更すればよい。

11.3　ベクトル 2-ノルム

この節では $\mathbf{C}^{n\times 1}$ 型複素行列の 2-ノルム 2-norm（以下、単にベクトルノルムまたはノルムという）に関する基本的事項を学ぶ。これを拡張した $\mathbf{C}^{m\times n}$ 型行列の 2-ノルムは次節の話題とする。行列計算においては「行列の大きさ」を評価する必要性が常に起る。この目的にはノルムの使われることが多い。

$\mathbf{x}=\left[x_1,\cdots,x_n\right]^T\in\mathbf{C}^{n\times 1}$ のノルム（2-ノルム）とは負でない実数

(1)　$\|\mathbf{x}\|_2\equiv\|\mathbf{x}\|\equiv\sqrt{\mathbf{x}^*\mathbf{x}}=\sqrt{|x_1|^2+\cdots+|x_n|^2}\geq 0$

をいう。この定義から次の事実が従う：

(2)　$\mathbf{x}=\mathbf{0}\leftrightarrow\|\mathbf{x}\|=0$

(3)　$\|c\mathbf{x}\|=|c|\|\mathbf{x}\|$　（c は任意の複素数）

(4)　$\mathbf{Q}:m\times n\ (n\leq m),\ \mathbf{Q}^*\mathbf{Q}=\mathbf{I}_n,\ \mathbf{x}\in\mathbf{C}^{n\times 1}$ なら、$\|\mathbf{Qx}\|=\|\mathbf{x}\|$（$\mathbf{Qx}:m\times 1$、$\mathbf{x}:n\times 1$ に注意）

以上の証明は練習問題とする。

(5)　コーシー・シュワルツ不等式Ｃａｕｃｈｙ- Schuwarz inequality： 任意の $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbf{C}^{n\times 1}$ に対して、$|\mathbf{x}^*\mathbf{y}|\leq\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|$ が成立する。 $\mathbf{x}^*\mathbf{y}\neq 0$ の場合、等号成立の必要十分条件は $\mathbf{x},\mathbf{y}$ の一方が他方の複素数倍であることである。

証明　(4) $\mathbf{x}\neq\mathbf{0},\mathbf{y}\neq\mathbf{0},\mathbf{x}^*\mathbf{y}\neq 0$ の場合のみ考えれば十分である。この場合は、$\lambda\equiv|\mathbf{x}^*\mathbf{y}|/\mathbf{x}^*\mathbf{y}$ とおけば、

$$0\leq\left\|\frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}-\lambda\frac{\mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|}\right\|^2=\left(\frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}-\lambda\frac{\mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|}\right)^*\left(\frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}-\lambda\frac{\mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|}\right)=2\left(1-\frac{|\mathbf{x}^*\mathbf{y}|}{\|\mathbf{x}\|\cdot\|\mathbf{y}\|}\right)$$

これより $|\mathbf{x}^*\mathbf{y}|\leq\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|$ が出る。ここで、等号の成立は明らかに $\dfrac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}-\lambda\dfrac{\mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|}=\mathbf{0}$ と同値である。これは、$\mathbf{x},\mathbf{y}$ の一方が他方の複素数倍でることと同値である（確かめて下さい）。■

別証　$n\times 2$ 行列 $\mathbf{A}=\left[\mathbf{x}\ \ \mathbf{y}\right]$（$\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbf{C}^{n\times 1}$）を考えると、$\mathbf{A}^*\mathbf{A}=\begin{bmatrix}\mathbf{x}^*\mathbf{x} & \mathbf{x}^*\mathbf{y}\\ \mathbf{y}^*\mathbf{x} & \mathbf{y}^*\mathbf{y}\end{bmatrix}:2\times 2$ 。

$\mathbf{A}$ の特異値を $\sigma_1 \ge \sigma_2 \ge 0$ とすれば、$\mathbf{A}^*\mathbf{A}$ の固有値は $\sigma_1{}^2, \sigma_2{}^2$ だから、

$$0 \le \sigma_1{}^2 \sigma_2{}^2 = \det(\mathbf{A}^*\mathbf{A}) = \mathbf{x}^*\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}^*\mathbf{y} - (\mathbf{x}^*\mathbf{y})(\mathbf{y}^*\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|^2 \|\mathbf{y}\|^2 - |\mathbf{x}^*\mathbf{y}|^2$$

次に、$|\mathbf{x}^*\mathbf{y}| = \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\|$ は $\det(\mathbf{A}^*\mathbf{A}) = 0$ と同値、これは $rank(\mathbf{A}^*\mathbf{A}) = rank(\mathbf{A}) \le 1$ と同値である。「階数」＋「零空間の次元」＝列数＝２ゆえ、これは $\mathbf{A}$ の零空間の次元は１以上であること、すなわち、$[\mathbf{x}\ \mathbf{y}]\begin{bmatrix}\alpha \\ \beta\end{bmatrix} = \mathbf{0}$ が非零解 $\begin{bmatrix}\alpha \\ \beta\end{bmatrix} \ne \mathbf{0}$ をもつこと、すなわち、$\mathbf{x} = \lambda\mathbf{y}$ か $\mathbf{y} = \mu\mathbf{x}$ を満たす複素数 λ, μ が存在すること、と同値である。■

(5)　<u>三角不等式</u> triangular inequality　$\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\| \le \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$

等号が成立するための必要十分条件は $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ の一方が他方の<u>負でない実数倍</u>であることである。

証明　$\mathbf{x} \ne \mathbf{0}$ 、$\mathbf{y} \ne \mathbf{0}$ の場合だけを考えておけば十分である。

$$\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\|^2 = (\mathbf{x}+\mathbf{y})^*(\mathbf{x}+\mathbf{y}) = \|\mathbf{x}\|^2 + 2\cdot \mathrm{Re}(\mathbf{x}^*\mathbf{y}) + \|\mathbf{y}\|^2$$ （$\mathrm{Re}(\cdots) = \cdots$ の実部）

$$\le \|\mathbf{x}\|^2 + 2|\mathbf{x}^*\mathbf{y}| + \|\mathbf{y}\|^2 \le \|\mathbf{x}\|^2 + 2\|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\| + \|\mathbf{y}\|^2$$ （コーシー・シュワルツ不等式）

$$= (\|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|)^2$$ （前半の証明了）

等号が成立するための必要十分条件は、$\mathrm{Re}(\mathbf{x}^*\mathbf{y}) = |\mathbf{x}^*\mathbf{y}| = \|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\|$ であるが、最初の相等関係は $\mathbf{x}^*\mathbf{y} \ge 0$ と同値である。後半の相等関係はコーシー・シュワルツ不等式により $\mathbf{y} = c\mathbf{x}$（$c \ne 0$ は適当な複素数）と同値である。この二つの条件は「$\mathbf{y} = c\mathbf{x}$ かつ $c \ge 0$ 」と同値である。■

(6) 三角不等式の別形　$\big|\,\|\mathbf{x}\| - \|\mathbf{y}\|\,\big| \le \|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|$

これは「ノルムの連続性」（ベクトル間の差が小さければ、ノルム値間の差も小さい）を示す。

証明　$\mathbf{x} = (\mathbf{x}-\mathbf{y}) + \mathbf{y}$ のノルムをとると、三角不等式より $\|\mathbf{x}\| \le \|\mathbf{x}-\mathbf{y}\| + \|\mathbf{y}\|$ が出る。同様にして、$\|\mathbf{y}\| \le \|\mathbf{y}-\mathbf{x}\| + \|\mathbf{x}\|$ も出る。この両者から(6)が出る（$\because\ \|\mathbf{x}-\mathbf{y}\| = \|\mathbf{y}-\mathbf{x}\|$）。■

11.4　ノルム空間

前節において定義したベクトル 2-ノルムは $\mathbf{C}^{n\times 1}$ から負でない実数全体への写像を表し、次の３性質を満たす：任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{C}^{n\times 1}$ 、任意の複素数 c に対して

(a) $\mathbf{x}=\mathbf{0}\leftrightarrow\|\mathbf{x}\|=0$　(b) $\|c\mathbf{x}\|=|c|\|\mathbf{x}\|$　(c) $\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\|\le\|\mathbf{x}\|+\|\mathbf{y}\|$

このような構造は線形代数ではよく現れる。そこで一般に、与えられた複素ベクトル空間 X から負でない実数への写像 $\|\cdot\|$ が上の 3 性質を満たすとき、$\|\cdot\|$ を X 上のノルム norm、X をノルム空間 normed space という。有限次元ノルム空間の詳しい話をレッスン 14 で行う。

与えられたノルム空間 X 内の任意の $\mathbf{x},\mathbf{y}$ に対して $\mathbf{x},\mathbf{y}$ 間の距離を $d(\mathbf{x},\mathbf{y})=\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|$ によって定義すれば、ノルムの性質から、任意の $\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}\in X$ に対して

(d) $d(\mathbf{x},\mathbf{y})\ge 0;\ d(\mathbf{x},\mathbf{y})=0\leftrightarrow\mathbf{x}=\mathbf{y}$

(e) $d(\mathbf{x},\mathbf{y})=d(\mathbf{y},\mathbf{x})$

(f) $d(\mathbf{x},\mathbf{y})+d(\mathbf{y},\mathbf{z})\ge d(\mathbf{x},\mathbf{z})$ （3 角不等式）

が成り立つ。一般に、任意の集合 X 上にこのような性質を満たす写像 $d(\cdot,\cdot)$ が定義された空間を距離空間 metric space といい、$d(\cdot,\cdot)$ を距離 metric という。また、任意の集合 X に対して、$d(\mathbf{x},\mathbf{y})=0\leftrightarrow\mathbf{x}=\mathbf{y};\ d(\mathbf{x},\mathbf{y})=1\leftrightarrow\mathbf{x}\ne\mathbf{y}$ とおけば、X は距離空間となるので（確かめて下さい）、距離空間に何らの構造的特徴はないことがわかる。このコンテンツで現れる距離空間はノルム空間のみである。

ノルム空間の話をする場合、よく現れるのが、与えられたベクトル $\mathbf{a}$ を中心とする半径 $\rho>0$ の開球 open shere $\{\mathbf{x}\in X:\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|<\rho\}$ である。その表面 surface $\{\mathbf{x}\in X:\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|=\rho\}$ との合併集合を、$\mathbf{a}$ を中心とする半径 $\rho>0$ の閉球 closed shere いう。

11.5　行列ノルム（演算子 2-ノルム）

(I)　定義　　与えられた $\mathbf{A}=\left[a_{ij}\right]\in\mathbf{C}^{m\times n}$ の特異値分解（11.2 節）を

(1)　$\mathbf{A}=\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^*\equiv\mathbf{U}diag\{\sigma_1,\cdots,\sigma_r,\mathbf{0}\}\mathbf{V}^*$　　$(\sigma_1\ge\sigma_2\ge\cdots\ge\sigma_r>0,\ \mathbf{U}^{-1}=\mathbf{U}^*,\ \mathbf{V}^{-1}=\mathbf{V}^*)$）

とすれば

(2)　$\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|^2=\|\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^*\mathbf{x}\|^2=\mathbf{x}^*\mathbf{V}\Sigma^*\mathbf{U}^*\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^*\mathbf{x}=\|\Sigma\mathbf{y}\|^2$ （$\mathbf{y}\equiv\mathbf{V}^*\mathbf{x}\equiv\left[y_1\cdots y_n\right]^*$）

$$=\sigma_1{}^2|y_1|^2+\cdots+\sigma_{m\wedge n}{}^2|y_{m\wedge n}|^2$$

いま、$\mathbf{x}\in\mathbf{C}^{n\times1}$ が $\|\mathbf{x}\|=1$ を満たすすべての値をとるとき、$\mathbf{y}$ は $\|\mathbf{y}\|=\|\mathbf{V}^*\mathbf{x}\|=\|\mathbf{x}\|=1$ を満たすすべての値をとる。ゆえに、(2)より $\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|$ は $\mathbf{y}=\mathbf{e}_1$ とき、すなわち、$\mathbf{x}=\mathbf{V}\mathbf{e}_1$ のとき、最大

値 σ_1 をとる。すなわち、$\max_{\|\mathbf{x}\|=1}\|\mathbf{Ax}\| = \|\mathbf{AVe}_1\| = \sigma_1$。この量 $\max_{\|\mathbf{x}\|=1}\|\mathbf{Ax}\|$ をベクトル 2-ノルムに対応する $\mathbf{A}$ の演算子 2-ノルム operator 2-norm corresponding to the vector 2-norm といい（以下単に演算子ノルム)、記号 $\|\mathbf{A}\|$ で表す：

(3)　$\|\mathbf{A}\| = \max_{\|\mathbf{x}\|=1, \mathbf{x}\in\mathbf{C}^{n\times1}}\|\mathbf{Ax}\| = \|\mathbf{A}(\mathbf{Ve}_1)\| = \sigma_1$

すなわち､演算子ノルム $\|\mathbf{A}\|$ とは $\mathbf{x}$ が $\mathbf{C}^{n\times1}$ の単位球表面を自由に動いたときの $\|\mathbf{Ax}\|$ の最大値を表し、その値は $\mathbf{A}$ の最大特異値 σ_1 に等しい。

(II)　任意の $\mathbf{A}\in\mathbf{C}^{m\times n}$ 、任意の $\mathbf{x}\in\mathbf{C}^{n\times1}$ に対して　$\|\mathbf{Ax}\| \le \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}\|$

証明　$\mathbf{x}\ne\mathbf{0}$ としてよい。すると $\|\mathbf{x}/\|\mathbf{x}\|\| = 1$ ゆえ、(3)より $\left\|\mathbf{A}\dfrac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}\right\| \le \|\mathbf{A}\|$。■

(III)　$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n}$ なら、 $\|\mathbf{A}\| = \max_{\|\mathbf{x}\|=1, \mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times1}}\|\mathbf{Ax}\| = \max_{\|\mathbf{x}\|=1, \mathbf{x}\in\mathbf{C}^{n\times1}}\|\mathbf{Ax}\|$

ゆえに、実行列の演算子ノルムを、このどちらの式によって定義しても、混乱は生じない。

証明：　$\alpha \equiv \max_{\|\mathbf{x}\|=1, \mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times1}}\|\mathbf{Ax}\|$、$\beta \equiv \max_{\|\mathbf{x}\|=1, \mathbf{x}\in\mathbf{C}^{n\times1}}\|\mathbf{Ax}\|$ とおけば、明らかに $\alpha\le\beta$ が成り立つから、$\beta\le\alpha$ を示せば十分である。そこで、任意の $\mathbf{z} = \mathbf{x}+i\mathbf{y}\in\mathbf{C}^{n\times1}$ $(\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbf{R}^{n\times1}, i^2=-1)$ をとれば

$$\|\mathbf{Az}\|^2 = \|\mathbf{A}(\mathbf{x}+i\mathbf{y})\|^2 = \|\mathbf{Ax}+i\mathbf{Ay}\|^2 = \|\mathbf{Ax}\|^2 + \|\mathbf{Ay}\|^2 \quad (\because \mathbf{A},\mathbf{x},\mathbf{y}\text{ は実行列})$$

$$\le \alpha(\|\mathbf{x}\|^2 + (\|\mathbf{y}\|^2) = \alpha\|\mathbf{x}+i\mathbf{y}\|^2 = \alpha\|\mathbf{z}\|^2$$

$\mathbf{z}\in\mathbf{C}^{n\times1}$ は全く任意であったからこの式は $\beta\le\alpha$ を示す。■

別証：$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n}$ に対しては、実行列の特異値分解（11.1 節）を使い、$\mathbf{x}$ を実ベクトルに制限すれば、$\|\mathbf{A}\| = \max_{\|\mathbf{x}\|=1, \mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times1}}\|\mathbf{Ax}\| = \|\mathbf{A}(\mathbf{Ve}_1)\| = \sigma_1$ がいえる。■

例 1　演算子ノルムの定義(4)から $\left\|\begin{bmatrix}-2 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{bmatrix}\right\| = \left\|\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -2 & 0\end{bmatrix}\right\| = \left\|\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -2\end{bmatrix}\right\| = 2$　■

例 2　$\mathbf{a} = \left[a_1\cdots a_n\right]^T \in\mathbf{C}^{n\times1}$ の演算子ノルムとベクトルノルムの値は一致する。実際、前者を $\|\mathbf{a}\|_{op}$ と書くと、(3)により、$\|\mathbf{a}\|_{op} = \sigma_1 = \sqrt{\mathbf{a}^*\mathbf{a}} = \|\mathbf{a}\|$（ベクトルノルム)。ゆえに両者に同じ記

号を使っても混乱は起きない。　■

11.6　演算子ノルムの性質

以下とくに断らない限り、$\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{m \times n}$ は与えられた行列とする。

(I)　すべての $\mathbf{x} \in \mathbf{C}^{n \times 1}$ に対して、$\|\mathbf{Ax}\| \le \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{x}\|$ （前節から再掲）

(II)　$\|\mathbf{A}\|$ の最小性：与えられた実定数 α に対して、$\|\mathbf{Ax}\| \le \alpha \|\mathbf{x}\|$ がすべての $\mathbf{x} \in \mathbf{C}^{n \times 1}$ に対して成立するなら、$\|\mathbf{A}\| \le \alpha$ が成り立つ。

証明　$\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{Ax}_0\|$ を満たす $\mathbf{x}_0 \in \mathbf{C}^{n \times 1}$ $(\|\mathbf{x}_0\| = 1)$ をとれば、$\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{Ax}_0\| \le \alpha \|\mathbf{x}_0\| = \alpha$ 。■

(III)　$\|\mathbf{A}\| = 0 \leftrightarrow \mathbf{A} = \mathbf{0}$

証明　$\|\mathbf{A}\| = 0$ なら、すべての $\mathbf{x} \ne \mathbf{0}$ に対して $\|\mathbf{A}(\mathbf{x}/\|\mathbf{x}\|)\| = 0$ 。ゆえに、すべての $\mathbf{x} \ne \mathbf{0}$ に対して $\|\mathbf{Ax}\| = 0$ 、すなわち、$\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$ 。これは $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ を意味する。逆は明らかに真。■

(IV)　任意の複素数 c 、任意の $\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{m \times n}$ に対して　$\|c\mathbf{A}\| = |c| \cdot \|\mathbf{A}\|$

証明　行列ノルムの定義から直ちに出る。■

(V)　三角不等式：　任意の $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbf{C}^{m \times n}$ に対して　$\|\mathbf{A} + \mathbf{B}\| \le \|\mathbf{A}\| + \|\mathbf{B}\|$

証明　任意の $\mathbf{x} \in \mathbf{C}^{n \times 1}$ に対して $\|(\mathbf{A} + \mathbf{B})\mathbf{x}\| = \|\mathbf{Ax} + \mathbf{Bx}\| \le \|\mathbf{Ax}\| + \|\mathbf{Bx}\|$

（ベクトルに対する三角不等式）$\le \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{B}\|\|\mathbf{x}\|$ （(I)による）$= (\|\mathbf{A}\| + \|\mathbf{B}\|)\|\mathbf{x}\|$

(II)により、$\|\mathbf{A} + \mathbf{B}\| \le \|\mathbf{A}\| + \|\mathbf{B}\|$。■

(III)(IV)(V)により、「演算子ノルムは $\mathbf{C}^{m \times n}$ 上のノルムを表す」。

(VI)　（演算子ノルムの連続性）任意の $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbf{R}^{m \times n}$ に対して　$\left| \|\mathbf{A}\| - \|\mathbf{B}\| \right| \le \|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|$

証明　練習問題とする。11.3 節(6)参照。■

(VII)　積のノルムに関する不等式　$\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{m \times n}, \mathbf{B} \in \mathbf{C}^{n \times p}$ なら $\|\mathbf{AB}\| \le \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{B}\|$

証明　(I)により、すべての $\mathbf{x}\in\mathbf{C}^{p\times 1}$ に対して $\|(\mathbf{AB})\mathbf{x}\|=\|\mathbf{A}(\mathbf{Bx})\|\le\|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{Bx}\|\le\|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{B}\|\cdot\|\mathbf{x}\|$ が成り立つ。これに(II)を適用する。■

(VIII)　$\mathbf{P}\in\mathbf{C}^{l\times m}$（$l\ge m$）が $\mathbf{P}^*\mathbf{P}=\mathbf{I}_m$ を満たせば、$\|\mathbf{P}\|=1$ が成り立つ。ゆえに、ユニタリ行列の演算子ノルムは 1 に等しい。

証明　任意の $\mathbf{y}\in\mathbf{C}^{m\times 1}$ に対して、$\|\mathbf{Py}\|^2=\mathbf{y}^*\mathbf{P}^*\mathbf{Py}=\mathbf{y}^*\mathbf{I}_m\mathbf{y}=\|\mathbf{y}\|^2$。　■

(IX)　$\|\mathbf{A}\|=\|\mathbf{A}^*\|$

証明　$\mathbf{A}$ と $\mathbf{A}^*$ は全く同一の特異値を共有することから明らか。■

(X)　任意の $\mathbf{A}\in\mathbf{C}^{m\times n}$、任意の n 次ユニタリ行列 $\mathbf{Q}$（$\mathbf{Q}^*=\mathbf{Q}^{-1}$）、$\mathbf{P}^*\mathbf{P}=\mathbf{I}_m$ を満たす任意の $\mathbf{P}\in\mathbf{C}^{l\times m}$（$l\ge m$）に対して、$\|\mathbf{PAQ}\|=\|\mathbf{A}\|$ が成り立つ。

証明　(VII)(VIII)により、$\|\mathbf{PAQ}\|\le\|\mathbf{P}\|\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{Q}\|=1\cdot\|\mathbf{A}\|\cdot 1=\|\mathbf{A}\|$ が成り立つ。次に、$\|\mathbf{A}\|=\|\mathbf{Ax}_0\|$ を満たす $\mathbf{x}_0\in\mathbf{C}^{n\times 1}$（$\|\mathbf{x}_0\|=1$）をとり、$\mathbf{y}_0=\mathbf{Q}^*\mathbf{x}_0$ とおけば、$\|\mathbf{y}_0\|=1$（$\mathbf{Q}$ のユニタリ性による)。そして $\|\mathbf{PAQy}_0\|=\|\mathbf{AQy}_0\|$（前項による）$=\|\mathbf{AQ}\cdot\mathbf{Q}^*\mathbf{x}_0\|=\|\mathbf{Ax}_0\|=\|\mathbf{A}\|$。これより $\|\mathbf{PAQ}\|\ge\|\mathbf{A}\|$ が出る。■

(XI)　任意の行列 $\mathbf{A},\mathbf{B}$ に対して $\left\|\begin{bmatrix}\mathbf{A}&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\mathbf{B}\end{bmatrix}\right\|=\left\|\begin{bmatrix}\mathbf{0}&\mathbf{B}\\\mathbf{A}&\mathbf{0}\end{bmatrix}\right\|=\|\mathbf{A}\|\vee\|\mathbf{B}\|$（$\equiv\max\{\|\mathbf{A}\|,\|\mathbf{B}\|\}$）

略証：$\mathbf{A}\in\mathbf{C}^{m\times n},\ \mathbf{B}\in\mathbf{C}^{p\times q}$ とし、$\mathbf{X}=\begin{bmatrix}\mathbf{A}&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\mathbf{B}\end{bmatrix}$ とおけば、任意の $\mathbf{x}\in\mathbf{C}^{n\times 1}$、$\mathbf{y}\in\mathbf{C}^{q\times 1}$ に対して

$\left\|\mathbf{X}\begin{bmatrix}\mathbf{x}\\\mathbf{y}\end{bmatrix}\right\|^2=\left\|\begin{bmatrix}\mathbf{Ax}\\\mathbf{By}\end{bmatrix}\right\|^2=\|\mathbf{Ax}\|^2+\|\mathbf{By}\|^2\le(\|\mathbf{A}\|^2\vee\|\mathbf{B}\|^2)(\|\mathbf{x}\|^2+\|\mathbf{y}\|^2)=(\|\mathbf{A}\|^2\vee\|\mathbf{B}\|^2)\left(\left\|\begin{bmatrix}\mathbf{x}\\\mathbf{y}\end{bmatrix}\right\|^2\right.$ となる。これより $\|\mathbf{X}\|\le\|\mathbf{A}\|\vee\|\mathbf{B}\|$。他方、$\|\mathbf{Au}_0\|=\|\mathbf{A}\|$ $(\|\mathbf{u}_0\|=1)$、$\|\mathbf{Bv}_0\|=\|\mathbf{B}\|$ $(\|\mathbf{v}_0\|=1)$ を満たす $\mathbf{u}_0\in\mathbf{C}^{n\times 1}$、$\mathbf{v}_0\in\mathbf{C}^{q\times 1}$ とれば、$\left\|\mathbf{X}\begin{bmatrix}\mathbf{u}_0\\\mathbf{0}\end{bmatrix}\right\|=\|\mathbf{A}\|$、$\left\|\mathbf{X}\begin{bmatrix}\mathbf{0}\\\mathbf{v}_0\end{bmatrix}\right\|=\|\mathbf{B}\|$ $\left(\left\|\begin{bmatrix}\mathbf{u}_0\\\mathbf{0}\end{bmatrix}\right\|=1\right.$、$\left.\left\|\begin{bmatrix}\mathbf{v}_0\\\mathbf{0}\end{bmatrix}\right\|=1\right)$。

ゆえに、$\|\mathbf{X}\| \ge \|\mathbf{A}\| \vee \|\mathbf{B}\|$。他の相等関係も同様の手続きで証明できる。■

(XII)　$\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{n\times n}$ の任意の固有値 λ に対して $|\lambda| \le \|\mathbf{A}\|$ が成立する。

証明　固有値・固有ベクトル間の関係式 $\lambda\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ （$\mathbf{x} \ne \mathbf{0}$）のノルムをとればよい。■

11.6　階数分析への応用

この節では便宜上実行列を扱う。

(I)　与えられた行列 $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ の階数を $r\,(>0)$ とし、$r-1$ またはそれ以下の特定の階数をもつ行列までの最短距離を求める問題を考える。特異値分解を使えば実に明快な答えが出ることを示す。実際、$\mathbf{A}$ の特異値分解を

(1)　$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T \equiv [\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_m]\, diag\{\sigma_1, \cdots, \sigma_r, \mathbf{0}\} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1{}^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n{}^T \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i{}^T \quad (r = rank(\mathbf{A}))$$

とし、$\mathbf{A}_k = \mathbf{U}\Sigma_k\mathbf{V}^T \equiv \mathbf{U}diag\{\sigma_1, \cdots, \sigma_k, \mathbf{0}\}\mathbf{V}^T = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i{}^T$ （$0 \le k < r$）とすれば

(2)　$$\min_{rank(\mathbf{X}) \le k} \|\mathbf{X} - \mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}_k - \mathbf{A}\| = \sigma_{k+1}(\mathbf{A}) = \min_{rank(\mathbf{X}) = k} \|\mathbf{X} - \mathbf{A}\|$$ （$rank(\mathbf{A}_k) = k$ に注意！）

すなわち、「$\mathbf{A}$ から階数 k 以下の行列までの最短距離は $\sigma_{k+1}(\mathbf{A})$ に等しく、これは階数 k の行列 $\mathbf{A}_k$ によって実現される」。いいかえれば、「$\mathbf{A}$ を中心とする半径 $\sigma_{k+1}(\mathbf{A})$ の開球は階数が少なくとも $k+1$ またはそれ以上の行列のみを含み、その表面上に階数 k の行列 $\mathbf{A}_k$ が存在する（$\sigma_{k+1}(\mathbf{A}) \ge \sigma_r > 0$ に注意）」。とくに、「n 次可逆行列 $\mathbf{A}$ から非可逆行列までの最短距離は σ_n に等しく（$\because \sigma_1 \ge \cdots \ge \sigma_n > 0$）、それは階数 $n-1$ の行列 $\mathbf{A}_{n-1} = \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i{}^T$ によって実現され、$\mathbf{A}$ を中心とする半径 σ_n の開球は可逆行列のみを含む」。

証明　まず、$\mathbf{A}_k$ の形から $rank(\mathbf{A}_k) = k$ は明らかである。そして

$$\|\mathbf{A}_k - \mathbf{A}\| = \|\mathbf{U}(\Sigma_k - \Sigma)\mathbf{V}^T\| = \|(\Sigma_k - \Sigma)\|$$ （$\because$ $\mathbf{U}, \mathbf{V}$ は直交行列ゆえ、前節(X)を適用）

$$= \|diag\{\mathbf{0}, \sigma_{k+1}, \cdots, \sigma_r, \mathbf{0}\}\| = \sigma_{k+1}$$ （$\because$ 11.1 節例 4）

次に、$rank(\mathbf{X}) \le k$ なら、$\|\mathbf{X} - \mathbf{A}\| \ge \sigma_{k+1}$ が成立することを示す。実際、$\mathbf{X}$ の零空間を $N(\mathbf{X})$ と書けば、$\dim N(\mathbf{X}) = n - rank(\mathbf{X}) \ge n - k$ ゆえ、$S = N(\mathbf{X})$、$T = span\{\mathbf{v}_1, \cdots, \mathbf{v}_{k+1}\}$ に次元公式を適用し、

$$\dim(S \cap T) = \dim S + \dim T - \dim(S + T) \ge n - k + k + 1 - n = 1$$

が出る。ゆえに、$\|\mathbf{x}\|=1$ を満たす $\mathbf{x}\in S\cap T$ が存在する。すると

$$\|\mathbf{X}-\mathbf{A}\|\geq\|(\mathbf{X}-\mathbf{A})\mathbf{x}\|=\|\mathbf{X}\mathbf{x}-\mathbf{A}\mathbf{x}\|=\|\mathbf{0}-\mathbf{A}\mathbf{x}\| \quad (\because\ \mathbf{x}\in N(\mathbf{B}))$$

$$=\left\|\mathbf{A}\mathbf{V}\begin{bmatrix}\mathbf{y}\\\mathbf{0}\end{bmatrix}\right\| \quad (\mathbf{x}=\mathbf{V}\begin{bmatrix}\mathbf{y}\\\mathbf{0}\end{bmatrix},\ \mathbf{y}:(k+1)\times 1 \quad \because\ \mathbf{x}\in T=span\{\mathbf{v}_1,\cdots,\mathbf{v}_{k+1}\})$$

$$=\left\|\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T\mathbf{V}\begin{bmatrix}\mathbf{y}\\\mathbf{0}\end{bmatrix}\right\|=\left\|\Sigma\begin{bmatrix}\mathbf{y}\\\mathbf{0}\end{bmatrix}\right\|\geq\sigma_{k+1} \quad (\because\ \|\mathbf{x}\|=1\text{ ゆえ、}\|\mathbf{y}\|=1) \quad ■$$

例 1 $\mathbf{A}=\begin{bmatrix}7&2&0\\2&6&-2\\0&-2&5\end{bmatrix}=\mathbf{U}\begin{bmatrix}9&0&0\\0&6&0\\0&0&3\end{bmatrix}\mathbf{U}^T$ （$\mathbf{U}=\frac{1}{3}\begin{bmatrix}-2&-2&1\\-2&1&-2\\1&-2&-2\end{bmatrix}$、$\mathbf{U}^T\mathbf{U}=\mathbf{I}$）は $\mathbf{A}$ の特異値分解（かつシュール分解）を表し、特異値は $\sigma_1=9,\ \sigma_2=6,\ \sigma_3=3$ によって与えられる。ゆえに、

$$3=\sigma_3=\min_{rank(\mathbf{X})\leq 2}\|\mathbf{X}-\mathbf{A}\|=\|\mathbf{A}_2-\mathbf{A}\|,\ \mathbf{A}_2=\mathbf{U}diag\{9,6,0\}\mathbf{U}^T$$

$$6=\sigma_2=\min_{rank(\mathbf{X})\leq 1}\|\mathbf{X}-\mathbf{A}\|=\|\mathbf{A}_1-\mathbf{A}\|,\ \mathbf{A}_1=\mathbf{U}diag\{9,0,0\}\mathbf{U}^T$$

$$9=\sigma_1=\min_{rank(\mathbf{X})\leq 0}\|\mathbf{X}-\mathbf{A}\|=\|\mathbf{A}_0-\mathbf{A}\|,\ \mathbf{A}_0=\mathbf{U}diag\{0,0,0\}\mathbf{U}^T=\mathbf{0}$$

$\mathbf{A}$ を中心とする半径、それぞれ、$\sigma_3,\sigma_2,\sigma_1$ の開球を S_3,S_2,S_1 と呼べば、S_3 は階数 3 の行列（＝可逆行列）のみ、S_2 は階数 2 以上のもの、S_1 は階数 1 以上のもの（＝非零行列）のみを含む。ただ、$\mathbf{A}$ の非零実数倍はやはり可逆行列であるから、S_1 外にも可逆行列が存在することは明らかである。■

例 2　与えられた行列 $\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n}$ の特異値分解を数値計算によって求めると、得られた特異値分解は $\mathbf{A}+\mathbf{X}_0\equiv\mathbf{A}_c$ の厳密な特異値分解となっていることが知られている。ここに $\mathbf{X}_0$ は計算誤差を表す行列である。$rank(\mathbf{A}_c)=\rho$ とする。もし $\|\mathbf{X}_0\|<\sigma_\rho(\mathbf{A}_c)$ が保証されれば、$\mathbf{A}$ は $\mathbf{A}_c$ を中心とする半径 $\sigma_\rho(\mathbf{A}_c)$ の開球内に存在することになり（$\because\ \|\mathbf{A}-\mathbf{A}_c\|=\|\mathbf{X}_0\|<\sigma_\rho(\mathbf{A}_c)$）、その階数は ρ またはそれ以上であることが保証される。反対に、$\|\mathbf{X}_0\|>\sigma_\rho(\mathbf{A}_c)$ なら、$\mathbf{A}$ は問題の開球の外側にあるため、$rank(\mathbf{A})\geq\rho$ の保証はない。■

11.7　行列方程式への応用

この節では特異値分解の応用として、行列方程式の解摂動問題、すなわち、「データの変動に解がどう反応するか」を考える。そこで、$\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{n \times n}$ を可逆行列とし、その特異値分解を

$$(1)\quad \mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T \equiv [\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n] \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \sigma_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1{}^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n{}^T \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i{}^T \quad (\sigma_1 \ge \cdots \ge \sigma_n > 0)、$$

とすれば、方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ （$\mathbf{b} \in \mathbf{R}^{n \times 1}$ は既知）の解は次式によって与えられる：

$$(2)\quad \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{V}\Sigma^{-1}\mathbf{U}^T\mathbf{b} \equiv \mathbf{V} \begin{bmatrix} \sigma_1{}^{-1} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \sigma_n{}^{-1} \end{bmatrix} \mathbf{U}^T = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i{}^{-1} \mathbf{v}_i (\mathbf{u}_i{}^T \mathbf{b})$$

特異値分解は LDU 分解に比べて計算量が大きいから、この式を使って(1)を解くことは通常行われないが、この式から $\mathbf{A}$ の変動に解がどう反応するかについての定性的な性質を見ることができる。すなわち、(2)式を見ると、解は、小さな特異値の変動に、より敏感に反応することが読み取れる（$y = 1/x$ の原点付近の挙動を考えればよい)。

定量的な解析を示そう。　そこで、行列方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}(\ne \mathbf{0})$ にデータの変動 $\mathbf{A} \to \mathbf{A} + \vartriangle\mathbf{A}$、$\mathbf{b} \to \mathbf{b} + \vartriangle\mathbf{b}$ を与えたとき、解の変動 $\mathbf{x} \to \mathbf{x} + \vartriangle\mathbf{x}$ をどう評価できるか、について考える。次の結果が成り立つ：

$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$、$(\mathbf{A} + \vartriangle\mathbf{A})(\mathbf{x} + \vartriangle\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \vartriangle\mathbf{b}$、$\|\vartriangle\mathbf{A}\| < \sigma_n$ とすれば、$(\mathbf{A} + \vartriangle\mathbf{A})^{-1}$ が存在し、

$$(3)\quad \frac{\|\vartriangle\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \le \frac{cond(\mathbf{A})}{1 - (\|\vartriangle\mathbf{A}\| / \sigma_n)} \left(\frac{\|\vartriangle\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|} + \frac{\|\vartriangle\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|} \right)$$

ここに、$cond(\mathbf{A}) \equiv \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\| = \dfrac{\sigma_1}{\sigma_n} \ge 1$ は $\mathbf{A}$ の<u>条件数</u> condition number と呼ばれる。この式を見ると、「$\|\vartriangle\mathbf{A}\| / \sigma_n \ll 1$ なら、データ $\mathbf{A}, \mathbf{b}$ の相対変動率の和がほぼ条件数倍されて解の相対変動率に伝播しうる」ことがわかる。

証明　与えられた条件 $\|\vartriangle\mathbf{A}\| < \sigma_n$ は、$\mathbf{A} + \vartriangle\mathbf{A}$ が $\mathbf{A}$ を中心とする半径 σ_n の開球内にあることを示す。ゆえに、$(\mathbf{A} + \vartriangle\mathbf{A})^{-1}$ が存在する（前節参照）。すると、与えられた 2 方程式から、

$$\vartriangle\mathbf{x} = (\mathbf{A} + \vartriangle\mathbf{A})^{-1}(\vartriangle\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \vartriangle\mathbf{b}) = (\mathbf{I} + \mathbf{A}^{-1}\vartriangle\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{-1}(\vartriangle\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} + \vartriangle\mathbf{b})$$

ここに、$\mathbf{I} + \mathbf{A}^{-1}\vartriangle\mathbf{A} = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{A} + \vartriangle\mathbf{A})$ ゆえ、左辺の逆行列は確かに存在する。ノルムをとり、$\|\mathbf{x}\|$ で割ると、

(*)　$$\frac{\|\triangle\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \le \|(\mathbf{I}+\mathbf{A}^{-1}\triangle\mathbf{A})^{-1}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|(\|\triangle\mathbf{A}\|+\frac{\|\triangle\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{x}\|})$$

ここで、$\mathbf{Y}=\mathbf{A}^{-1}\triangle\mathbf{A}$ とおけば、$\|\mathbf{Y}\| \le \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\triangle\mathbf{A}\| = \sigma_n^{-1}\|\triangle\mathbf{A}\| < 1$。また、$(\mathbf{I}+\mathbf{Y})(\mathbf{I}+\mathbf{Y})^{-1}=\mathbf{I}$

より、$(\mathbf{I}+\mathbf{Y})^{-1}=\mathbf{I}-\mathbf{Y}(\mathbf{I}+\mathbf{Y})^{-1}$だから、ノルムをとれば$\|(\mathbf{I}+\mathbf{Y})^{-1}\| \le (1-\|\mathbf{Y}\|)^{-1}$ ($\because \|\mathbf{Y}\|<1$)。

また、 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ のノルムをとれば、$1/\|\mathbf{x}\| \le \|\mathbf{A}\|/\|\mathbf{b}\|$。以上を(*)に使うと、(3)が出る。■

(3)について追加説明を行う。条件数の逆数$(\|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{A}^{-1}\|)^{-1}=\sigma_n/\sigma_1$は、$\mathbf{A}$ から非可逆行列までの最短距離を$\|\mathbf{A}\|$で割った商に等しい。$\mathbf{A}$ を c 倍すれば、特異値は$|c|$倍されるから、σ_n/σ_1は「$\mathbf{A}$ から非可逆行列までの正規化された最短距離」を表すと考えてよい。ゆえに、「条件数が大きい（＝悪条件である ill-conditioned）ほど、その行列は非可逆行列に近い」と考えてよい。従って、 $\mathbf{A}$ が悪条件なら、 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ は“解きにくい”ことが予想される。(3)式はこのことを定量的に示すものと解釈できる。 $\mathbf{A}$ が直交行列なら $\sigma_1=\cdots=\sigma_n=1$ だから、直交行列の条件数は1に等しい。条件数が過度に大でない $\mathbf{A}$ を良条件である well-conditioned という。$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ をよい算法を使って数値的に解き、解 $\mathbf{x}_c$ が得られたとすれば、 $\mathbf{x}_c$ は小さな $\Delta\mathbf{A},\Delta\mathbf{b}$ に対して $(\mathbf{A}+\Delta\mathbf{A})\mathbf{x}_c=\mathbf{b}+\Delta\mathbf{b}$ の厳密解になっていることが知られているが、$\mathbf{A}$ が悪条件なら、たとえ $\triangle\mathbf{A},\triangle\mathbf{b}$ が小さくても、 $\mathbf{x}_c$ は(3)式の意味で原方程式の解 $\mathbf{x}$ と大きく違っていることがあり得るわけである。

11.8　最小自乗法への応用

最小自乗法（あるいは最小自乗問題）とは何か。一般論の前に例による説明を行う。

(I) 例　ある物理量（例：温度の変化量）に正比例する他の物理量（例：均質な細い棒の伸縮量）という理論模型を考える。実験を行い、データの組 $(l_1,t_1),\cdots,(l_m,t_m)$ が得られたとしよう。模型が正しく、実験誤差がなければ、$l_i=\alpha t_i\ , i=1,\cdots,m,$ のすべてを満たす比例定数 α が定まるはずだが、実際にはそうはならない。誤差が一定の統計的分布（正規分布）に従うとすれば、最も確からしい α の値は

(1)　$(l_1-\alpha t_1)^2+\cdots+(l_m-\alpha t_m)^2 \equiv f(\alpha)$ ＝最小

となるような $\alpha=\alpha_{opt}$ であることが知られている。問題(1)を最小自乗法または最小自乗問題 least square method or problem という。左辺は α の 2 次式であり、$\sum t_i^2>0$ を仮定すれば、

$$f(\alpha)=\sum l_i^2-2(\sum l_1 t_i)\alpha+(\sum t_i^2)\alpha^2\equiv C-2B\alpha+A\alpha^2=C-\frac{B^2}{A}+A(\alpha-\frac{B}{A})^2$$

と変形できるから、α_{opt} の値と $f(\alpha_{opt})$ は次式によって与えられる：

(2)　$\alpha_{opt}=\dfrac{B}{A}=\dfrac{\sum l_i t_i}{\sum t_i^2}$、$f(\alpha_{opt})=\dfrac{CA-B^2}{A}=\dfrac{\sum l_i^2\sum t_i^2-(\sum l_i t_i)^2}{\sum t_i^2}$

いま、 $\mathbf{l}=\left[l_1,\cdots,l_m\right]^T$, $\mathbf{t}=\left[t_1,\cdots,t_m\right]^T\neq\mathbf{0}$ とおけば、(1)(2)は簡潔に次のように書ける：

(3)　$\left\|\mathbf{t}\left[\alpha\right]-\mathbf{l}\right\|^2$ ＝最小（$\mathbf{t}\neq\mathbf{0}$）、$\alpha_{opt}=\dfrac{\mathbf{l}^T\mathbf{t}}{\|\mathbf{t}\|^2}$、　$f(\alpha_{opt})=\dfrac{\|\mathbf{l}\|^2\cdot\|\mathbf{t}\|^2-(\mathbf{l}^T\mathbf{t})^2}{\|\mathbf{t}\|^2}$

方程式 $\mathbf{t}\left[\alpha\right]=\mathbf{l}$ は先ほどいったように、一般に可解ではないが、左から $\mathbf{t}^T$ を乗じた<u>正規方程式</u> normal equation $\mathbf{t}^T\mathbf{t}\left[\alpha\right]=\mathbf{t}^T\mathbf{l}$ は常に可解であり、これを満たす α が α_{opt} に他ならないことは注目に値する。

(II)　最小自乗法問題　一般に、$m\times n$ 実行列方程式

(4)　$\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ （$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n},\mathbf{b}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$ は既知、$\mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ は未知）

を最小自乗法の意味で解くとは、$\mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ を自由に変えて

(5)　$\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|^2$ ＝最小（$\leftrightarrow$ $\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|$ ＝最小

となる $\mathbf{x}=\mathbf{x}_{opt}$ を求める問題である。応用上は $m\gg n$ の場合が多い。そして

$r(\mathbf{x})\equiv\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|$ は<u>残差</u> residual と呼ばれることが多い。

　幾何学的にいえば、最小自乗法とは与えられた点 $\mathbf{b}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$ から $\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n}$ の値域へ垂線を引く問題に他ならない。垂線の足を $\mathbf{y}_0$ と書けば、$\mathbf{Ax}=\mathbf{y}_0$ を満たす解 $\mathbf{x}_0\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ が最小自乗法の解、距離 $\|\mathbf{Ax}_0-\mathbf{b}\|$ が残差の最小値を与えることになる。

　このレッスンの主題である特異値分解を応用すれば最小自乗法問題の解法は以下のようになる。$\mathbf{A}$ の特異値分解を

(6)　$\mathbf{A}=\mathbf{U\Sigma V}^T\equiv\mathbf{U}\cdot diag\{\sigma_1,\cdots,\sigma_r,\mathbf{0}\}\cdot\mathbf{V}^T$

とする。以下場合に分けて考える。

(a)　$rank(\mathbf{A}) = n$ の場合　この場合は必然的に「$m \ge n$ かつ $\sigma_1 \ge \cdots \ge \sigma_n > 0$」が満たされ、特異値分解は

(7)　$\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T \equiv \mathbf{U}diag\{\sigma_1,\cdots,\sigma_n,\mathbf{0}\}\mathbf{V}^T = \mathbf{U}\begin{bmatrix}\Sigma_1 \\ \mathbf{0}\end{bmatrix}\mathbf{V}^T$　（$\Sigma_1 = diag\{\sigma_1,\cdots,\sigma_n\}$）

の形をとる。最小化すべき式にこれを使って変形していくと

$$\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T\mathbf{x}-\mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{U}(\Sigma\mathbf{V}^T\mathbf{x}-\mathbf{U}^T\mathbf{b})\|^2 = \|\Sigma\mathbf{V}^T\mathbf{x}-\mathbf{U}^T\mathbf{b}\|^2 \quad (\because\ \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^T)$$

$$\equiv \|\Sigma\mathbf{y}-\mathbf{c}\|^2 \quad (\mathbf{y} \equiv \mathbf{V}^T\mathbf{x},\ \mathbf{c} \equiv \mathbf{U}^T\mathbf{b})$$

$$\equiv \left\|\begin{bmatrix}\Sigma_1 \\ \mathbf{0}\end{bmatrix}\mathbf{y} - \begin{bmatrix}\mathbf{c}_1 \\ \mathbf{c}_2\end{bmatrix}\right\|^2 = \left\|\begin{bmatrix}\Sigma_1\mathbf{y}-\mathbf{c}_1 \\ \mathbf{0}-\mathbf{c}_2\end{bmatrix}\right\|^2 = \|\Sigma_1\mathbf{y}-\mathbf{c}_1\|^2 + \|\mathbf{c}_2\|^2$$

これより $\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|^2$ ＝最小の解は一意的に

(8)　$\mathbf{x} = \mathbf{x}_{opt} = \mathbf{V}(\Sigma_1^{-1}\mathbf{c}_1) = \mathbf{V}diag\{\sigma_1^{-1},\cdots,\sigma_n^{-1}\}\mathbf{U}_1^T\mathbf{b}$　（$\mathbf{U} \equiv [\mathbf{U}_1\ \ \mathbf{U}_2],\ \mathbf{U}_1 : n \times m$）

$$\|\mathbf{Ax}_{opt}-\mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{c}_2\|^2 = \|\mathbf{U}_2^T\mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{b}\|^2 - \|\mathbf{U}_1^T\mathbf{b}\|^2$$

(b)　$0 < rank(\mathbf{A}) \equiv r < n$ の場合

解は (a)の場合と同様の計算を行えば出てくるが、解は一意ではない。実際、この場合の $\mathbf{A}$ の特異値分解は

(9)　$\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T \equiv \mathbf{U}\begin{bmatrix}\Sigma_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}\mathbf{V}^T$　（$\Sigma_1 = diag\{\sigma_1,\cdots,\sigma_r\}$）

の形をとるから

$$\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|^2 = \|\Sigma_1\mathbf{V}_1^T\mathbf{x}-\mathbf{U}_1^T\mathbf{b}\|^2 + \|\mathbf{U}_2^T\mathbf{b}\|^2$$

（$\mathbf{U} = [\mathbf{U}_1\ \ \mathbf{U}_2],\ \mathbf{V} = [\mathbf{V}_1\ \ \mathbf{V}_2],\ \mathbf{U}_1 : m \times r,\ \mathbf{V}_1 : n \times r$）

となる。ここに $\Sigma_1\mathbf{V}_1^T\mathbf{x}-\mathbf{U}_1^T\mathbf{b} = \mathbf{0}$ は $r \times n$ 行列方程式である。その特解の一つは明らかに

$\mathbf{x} = \mathbf{V}_1\Sigma_1^{-1}\mathbf{U}_1^T\mathbf{b}$ であり、同次方程式 $\Sigma_1\mathbf{V}_1^T\mathbf{x} = \mathbf{0}$ の一般解は $\mathbf{x} = \mathbf{V}_2\mathbf{c}$ $(\mathbf{c} : (n-r)\times 1)$ だから

（$\mathbf{x} = \mathbf{Vy}$ $(\mathbf{y} : n \times 1)$ と書けばわかる）、結局 $\Sigma_1\mathbf{V}_1^T\mathbf{x}-\mathbf{U}_1^T\mathbf{b} = \mathbf{0}$ の一般解（すなわち、$\mathbf{x}_{opt}$）は

(10)　$$\mathbf{x}_{opt} = \mathbf{V}_1\Sigma_1^{-1}\mathbf{U}_1^T\mathbf{b} + \mathbf{V}_2\mathbf{c} = \begin{bmatrix}\mathbf{V}_1 & \mathbf{V}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\Sigma_1^{-1}\mathbf{U}_1\mathbf{b} \\ \mathbf{c}\end{bmatrix} = \mathbf{V}\begin{bmatrix}\Sigma_1^{-1}\mathbf{U}_1\mathbf{b} \\ \mathbf{c}\end{bmatrix}$$

によって与えられる。このうちで最小のノルムをもつもの $\mathbf{x}_{opt}^{(0)}$ は明らかに次式によって与えられる：

(11)　$$\mathbf{x}_{opt}^{(0)} = \mathbf{V}\begin{bmatrix}\Sigma_1^{-1}\mathbf{U}_1\mathbf{b} \\ \mathbf{0}\end{bmatrix} = \mathbf{V}_1\Sigma_1^{-1}\mathbf{U}_1\mathbf{b}$$

例　(II)で得られた一般的結果を例(I)に適用してみよう。最小自乗問題は、$\mathbf{A} = \mathbf{t} = \begin{bmatrix}t_1 \cdots t_m\end{bmatrix}^T$、

$\mathbf{b} = \mathbf{l} = \begin{bmatrix}l_1 \cdots l_m\end{bmatrix}^T$、$\mathbf{x} \equiv \begin{bmatrix}\alpha\end{bmatrix}:1\times 1$、$\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|$ =最小、である。$\mathbf{t}$ の特異値は $\sigma_1 = \sqrt{\mathbf{t}^T\mathbf{t}}\ (=\|\mathbf{t}\|) > 0$ のみであるから、一般論(a)の場合になる。$\mathbf{t}$ の特異値分解の形は

$$\mathbf{t} = \begin{bmatrix}t_1 \\ \vdots \\ t_m\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}t_1\sigma_1^{-1} & x\cdots x \\ \vdots & x\cdots x \\ t_m\sigma_1^{-1} & x\cdots x\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\end{bmatrix} \equiv \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T\ \ (\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^T, \mathbf{V} = \begin{bmatrix}1\end{bmatrix})$$

でなければならないから、(8)式より、

$$\mathbf{x}_{opt} = \mathbf{V}\Sigma_1\mathbf{U}_1^T\mathbf{b} = \begin{bmatrix}1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma_1^{-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}t_1\sigma_1^{-1}\cdots t_m\sigma_1^{-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}l_1 \\ \vdots \\ l_m\end{bmatrix} = \frac{\mathbf{t}^T\mathbf{l}}{\sigma_1^{\ 2}} = \frac{\mathbf{t}^T\mathbf{l}}{\mathbf{t}^T\mathbf{t}}$$

（$\mathbf{U}_1 = \begin{bmatrix}t_1\sigma_1^{-1} & \cdots & t_m\sigma_1^{-1}\end{bmatrix}^T$、$\Sigma_1 = \begin{bmatrix}\sigma_1\end{bmatrix}:1\times 1$）

$$\|\mathbf{Ax}_{opt}-\mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{b}\|^2 - \|\mathbf{U}_1^T\mathbf{b}\|^2 = \mathbf{l}^T\mathbf{l} - (\frac{\mathbf{t}^T\mathbf{l}}{\sigma_1})^2 = \frac{\mathbf{l}^T\mathbf{l}\cdot\mathbf{t}^T\mathbf{t}-\mathbf{t}^T\mathbf{l}}{\mathbf{t}^T\mathbf{t}} = \frac{\|\mathbf{l}\|^2\cdot\|\mathbf{t}\|^2-\mathbf{t}^T\mathbf{l}}{\|\mathbf{t}\|^2}$$

によって与えられる。以上は(I)で得られた結果と当然一致する。■

　最小自乗法に関する話題はまだまだあるが、続きの話は腕試し問題に回すことにする。

最後にひとこと：上で見たように、特異値分解は理論解析用にも実務計算用にも価値の高い分解である。（実）$m\times n$ 行列 $\mathbf{A}$ の特異値分解とは、$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ のシュール分解をいくらか変形したものであることを忘れないこと。

腕試し問題

問題 11.1　$\mathbf{D}=\begin{bmatrix}0&0&0\\0&-1&0\\0&0&-2\end{bmatrix}$ の特異値分解と特異値を求めよ。

（略解：11.1 節例 4 参照。特異値分解例

$$\begin{bmatrix}0&0&-1\\0&-1&0\\1&0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&0&0\\0&-1&0\\0&0&-2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{bmatrix}$$

特異値は $\sigma_1=2,\ \sigma_2=1,\ \sigma_3=0$ によって与えられる。■）

問題 11.2 （特異値分解計算の簡略化）まず、レッスン 7 からの既知事実をのべる：

(1)　$\mathbf{a}=\left[a_1,\cdots,a_m\right]^T\ (a_2{}^2+\cdots+a_m{}^2>0),\ \mathbf{b}=\left[\sqrt{\mathbf{a}^T\mathbf{a}},0,\cdots,0\right]^T\in\mathbf{R}^{m\times1}$,

$$\mathbf{H}=\mathbf{I}-\frac{2\mathbf{c}\mathbf{c}^T}{\mathbf{c}^T\mathbf{c}}\quad(\mathbf{c}\equiv\mathbf{a}-\mathbf{b})\rightarrow\mathbf{Ha}=\mathbf{b}$$

ここに $\mathbf{H}$ は「反射行列」または「ハウスホルダー行列」と呼ばれ、$\mathbf{H}^T=\mathbf{H},\ \mathbf{H}^2=\mathbf{I}$ を満たすから、実対称直交行列を表す。

$\mathbf{A}=\left[a_{ij}\right]\in\mathbf{R}^{m\times n},\ m\geq n$ を与えられた行列とすれば、適当な m 、n 次反射行列または単位行列 $\mathbf{U}_1,\cdots,\mathbf{U}_{m-1}$ 、$\mathbf{V}_1,\cdots,\mathbf{V}_{n-1}$ をとれば、$(\mathbf{U}_{m-1}\cdots\mathbf{U}_1)\mathbf{A}(\mathbf{V}_1\cdots\mathbf{V}_{n-2})$ を 2 重対角行列形 $\begin{bmatrix}x&x&&\mathbf{0}\\&\ddots&\ddots&\\&&x&x\\\mathbf{0}&&&x\end{bmatrix}\equiv\mathbf{B}$ に変形できることを示せ。これにより、$\mathbf{B}$ の特異値分解がわかれば、$\mathbf{A}$ の特異値分解も計算できることになる。

（略解：　$\mathbf{A}\rightarrow\mathbf{U}_1\mathbf{A}=\begin{bmatrix}x&x&\cdots&x\\0&x&\cdots&x\\\vdots&\vdots&&\vdots\\0&x&\cdots&x\end{bmatrix}\rightarrow\mathbf{U}_1\mathbf{A}\mathbf{V}_1=\begin{bmatrix}x&x&0\cdots&0\\0&x&x\cdots&x\\\vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\0&x&x\cdots&x\end{bmatrix}\rightarrow\cdots$ （以下同様）■）

問題 11.3　$\left|\|\mathbf{x}\|-\|\mathbf{y}\|\right|\leq\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|$ において等号が成立するための必要十分条件は何か。ただし、$\|\cdot\|$ は $\mathbf{C}^{n\times1}$ 上で定義された 2-ノルムを表す。

（略解 : 場合わけの後、11.3 節 3 角不等式における等号成立条件を応用すればよい。答 : $\mathbf{x},\mathbf{y}$ の一方が他方の負でない実数倍であること。■）

問題 11.4 （最小自乗法）　最小自乗問題

(1) $\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|^2$ ＝最小（$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n},\mathbf{b}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$ は既知、$\mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ は未知）

を考える。正規方程式

(2)　$\mathbf{A}^T\mathbf{Ax}=\mathbf{A}^T\mathbf{b}$

は常に可解であり（$rank(\mathbf{A})=n$ なら、$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ は可逆行列となる）、(1)(2)の解は一致すること

を示せ。また、任意解 $\mathbf{x}_{opt}$ に対応する残差は次式によって与えられることを示せ :

(3)　$\|\mathbf{Ax}_{opt}-\mathbf{b}\|^2=\mathbf{b}^T(\mathbf{b}-\mathbf{Ax}_{opt})=\|\mathbf{b}\|^2-\|\mathbf{Ax}_{opt}\|^2$

注意　(2)は「すべての $\mathbf{w}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ に対して $(\mathbf{Aw})^T(\mathbf{b}-\mathbf{Ax})=0$ 」と同値である。この条件は「$\mathbf{b}-\mathbf{Ax}$ が $\mathbf{A}$ の値域と直交する」に他ならないから、最小自乗問題(1)とは $\mathbf{b}$ から $\mathbf{A}$ の値域へ垂線を下す問題に他ならず、(3)はピタゴラスの定理（三平方の定理）を表す。また、誤差解析上の理由から、正規方程式を解くことはお奨めできない。）

（略証　正規方程式は常に可解であることを示す。可解性の必要十分条件は「$\mathbf{y}^T\mathbf{A}^T\mathbf{A}=\mathbf{0}\to\mathbf{y}^T\mathbf{A}^T\mathbf{b}=\mathbf{0}\ (\mathbf{y}\in\mathbf{R}^{n\times 1})$」であるが、これは満たされている :

$\mathbf{0}=\mathbf{y}^T\mathbf{A}^T\mathbf{A}\to\mathbf{0}=\mathbf{y}^T\mathbf{A}^T\mathbf{Ay}=(\mathbf{Ay})^T\mathbf{Ay}\to\mathbf{0}=\mathbf{Ay}\to\mathbf{0}=\mathbf{y}^T\mathbf{A}^T$ 。次に、(2)の任意解 $\mathbf{x}_0$ をとり、$\mathbf{x}=\mathbf{x}_0+\mathbf{y}$ とおけば、

$$\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|^2=\|\mathbf{Ay}\|^2+\mathbf{b}^T(\mathbf{b}-\mathbf{Ax}_0)=\|\mathbf{Ay}\|^2+\|\mathbf{b}\|^2-\|\mathbf{Ax}_0\|^2\geq\|\mathbf{b}\|^2-\|\mathbf{Ax}_0\|^2$$

が成り立つ。この式より $\mathbf{A}^T\mathbf{Ax}=\mathbf{A}^T\mathbf{b}$ の解と最小自乗問題の解は一致することがわかる。■）

問題 11.5（最小自乗法と QR 分解）　最小自乗問題

(1)　$\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|^2$ ＝最小（$\mathbf{A}\in\mathbf{R}^{m\times n},\mathbf{b}\in\mathbf{R}^{m\times 1}$ は既知、$\mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ は未知）

を QR 分解（→レッスン 7）を使って解け。ただし、$\mathbf{A}$ の QR 分解を

(2)　$\mathbf{A}=\mathbf{QR}\equiv\mathbf{Q}\begin{bmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1n} \\ & \ddots & \\ & & r_{nn} \\ & \mathbf{0} & \end{bmatrix}\equiv\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_1 & \mathbf{Q}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0}\end{bmatrix}$ $(\mathbf{Q}_1 : m\times n,\ \mathbf{Q}_2 : m\times(m-n),\ \mathbf{Q}^{-1}=\mathbf{Q}^T)$

とし、かつ $r_{11},\cdots,r_{nn}>0$ とする。

（略解：$\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|^2=\|\mathbf{Q}(\mathbf{Rx}-\mathbf{Q}^T\mathbf{b})\|^2=\left\|\begin{bmatrix}\mathbf{R}_1\\ \mathbf{0}\end{bmatrix}\mathbf{x}-\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_1{}^T\mathbf{b}\\ \mathbf{Q}_2{}^T\mathbf{b}\end{bmatrix})\right\|^2=\|\mathbf{R}_1\mathbf{x}-\mathbf{Q}_1{}^T\mathbf{b}\|^2+\|\mathbf{Q}_2{}^T\mathbf{b}\|^2$

だから、解は$\mathbf{x}_{opt}=\mathbf{R}_1{}^{-1}\mathbf{Q}_1\mathbf{b}$、残差は$\|\mathbf{Ax}_{opt}-\mathbf{b}\|=\|\mathbf{Q}_2{}^T\mathbf{b}\|$によって与えられる。■）

問題 11.6 （特異値と固有値の関係）複素n次正方行列$\mathbf{A}$の固有値を$\lambda_1,\cdots,\lambda_n$とし、特異値を$(0\le)\sigma_{\min}\le\cdots\le\sigma_{\max}$とすれば、$\sigma_{\min}\le\min\limits_i|\lambda_i|\le\max\limits_i|\lambda_i|\le\sigma_{\max}$が成り立つことを示せ。

（略証：$\mathbf{A}$のシュール分解を$\mathbf{Q}^*\mathbf{AQ}=\mathbf{T}=\begin{bmatrix}\lambda_1 & \cdots\cdots\\ & \ddots\ \vdots\\ \mathbf{0} & \lambda_n\end{bmatrix}$とすれば、$\mathbf{A}$と$\mathbf{T}$の特異値は等しいから、$\sigma_{\max}=\max\limits_{\|\mathbf{x}\|=1}\|\mathbf{Tx}\|\ge\|\mathbf{Te}_j\|=\left\|\begin{bmatrix}\vdots\\ \lambda_j\\ \mathbf{0}\end{bmatrix}\right\|\ge|\lambda_j|$（$j=1,\cdots,n$、$\mathbf{e}_j$＝第$j$単位ベクトル)。つぎに、$\sigma_{\min}\le\min\limits_i|\lambda_i|$を示す。$\sigma_{\min}=0$の場合は除外してよいから、$\sigma_{\min}>0$とすれば、$\mathbf{A}^{-1}$の存在が保証される。$\mathbf{A}^{-1}$の特異値、固有値は、それぞれ、$\mathbf{A}$の特異値、固有値の逆数だから、これに上の結果を適用すれば$1/\sigma_{\min}\ge1/|\lambda_j|$（$j=1,\cdots,n$）が得られる。■）