基礎数理　室田

特異値分解

階数 r の $n \times m$ 実行列 A は,

$$A = U\ \Sigma\ V^\top \tag{1}$$

の形に分解される．ここで，U は n 次直交行列，V は m 次直交行列，Σ は

$$\begin{aligned} \Sigma &= \begin{bmatrix} D & O_{r,m-r} \\ O_{n-r,r} & O_{n-r,m-r} \end{bmatrix}, \\ D &= \mathrm{diag}\,(\sigma_1, \ldots, \sigma_r), \qquad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0, \end{aligned}$$

のような $n \times m$ 行列である．式 (1) は A の**特異値分解**，対角要素 σ_i $(i = 1, \ldots, r)$ は A の**特異値**と呼ばれる．式 (1) より

$$A^\top A = (U\Sigma V^\top)^\top (U\Sigma V^\top) = V\Sigma^\top \Sigma V^\top$$

であるから，A の特異値は $A^\top A$ の非零固有値の平方根に等しく，V の列ベクトルは $A^\top A$ の固有ベクトルである． 同様に,

$$AA^\top = (U\Sigma V^\top)(U\Sigma V^\top)^\top = U\Sigma\Sigma^\top U^\top$$

であるから，U の列ベクトルは $AA^\top$ の固有ベクトルである．

以下　Advanced Topic

以下は，特異値分解がどう役立つかを示す解説（［4］より）．大雑把に理解すればよい．

特異値分解は，最小 2 乗法の数値解法に利用される．最小 2 乗問題とは，一般に，縦長の行列 A とベクトル $\boldsymbol{b}$ が与えられたときに，$||A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}||^2 = (A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b})^\top (A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b})$ を最小にする $\boldsymbol{x}$ を求める問題である．最小 2 乗問題は基本的には**正規方程式**

$$A^\top A\boldsymbol{x} = A^\top \boldsymbol{b} \tag{2}$$

を解くことに帰着される

［これについては，ここでは，信じてください．何処かで聞いたことがあるかも］

特異値分解を利用する方法は，A の列ベクトルが 1 次従属である可能性のある場合に，数値計算精度の観点から最も信頼性のある計算法であり，また，**最小ノルム解** (正規方程式 (2) の解 $\boldsymbol{x}$ の中でノルム $||\boldsymbol{x}|| = \left(|x_1|^2 + \cdots + |x_m|^2\right)^{1/2}$ が最小であるもの) を与える．

特異値分解 (1) を用いて正規方程式 (2) を書き換えると,

$$\Sigma^\top \Sigma\, V^\top \boldsymbol{x} = \Sigma^\top\, U^\top\, \boldsymbol{b} \tag{3}$$

となる．$\boldsymbol{c} = U^\top \boldsymbol{b}$ とおくと，方程式 (3) の解の全体は,

$$\{\, \boldsymbol{x} = V\boldsymbol{y} \mid\ y_i = c_i/\sigma_i\ (1 \leq i \leq r),\ y_i\ (r < i \leq m)\ \text{は任意}\ \} \tag{4}$$

と表される．とくに，$y_i = 0$ $(r < i \leq m)$ と選んで得られる解

$$\boldsymbol{x} = V\,\Sigma^{+}\,U^{\top}\,\boldsymbol{b}, \tag{5}$$

ただし

$$\Sigma^{+} = \begin{bmatrix} D^{-1} & O_{r,n-r} \\ O_{m-r,r} & O_{m-r,n-r} \end{bmatrix},$$

が最小ノルム解である．なお，$A^{+} = V\,\Sigma^{+}\,U^{\top}$ は A の逆行列みたいなものであり，**Moore-Penrose 型一般化逆行列**と呼ばれる．

以上が数学的な筋道であるが，これを数値的に実行するには，解の精度と計算量の 2 点を考察する必要がある．

行列 A の階数 r が予め分かっていない場合に，これを数値的に定めるのは丸め誤差のために実際上不可能である．また，あまり小さな特異値 σ_i による除算は，丸め誤差の影響を拡大するので好ましくない．そこで，実際の計算では，最大特異値 σ_1 に比べて非常に小さい特異値 σ_i は 0 とみなすことによって r を定め，式 (5) に従って解を計算するのが普通である．

参考書

［1］伊理正夫：線形代数汎論，朝倉書店，2009
　・第 6.9 節：特異値標準形
　・第 7 章：一般逆行列
［2］金子　晃：線形代数講義，
　ライブラリ数理・情報系の数学講義 2，サイエンス社，2004
　・第 6.6 節：特異値分解と主成分分析
［3］G. E. Forsythe, M. A. Malcolm, C. B. Moler 著, 森正武訳：
　計算機のための数値計算法，日本コンピュータ協会, 1978（絶版）
　・第 9 章　最小 2 乗法と特異値分解
［4］杉原正顯, 室田一雄: 線形計算の数理, 岩波書店, 2009
　・第 5 章　最小 2 乗法の解法

以上 (2009-09-05)