特異値分解　の入口

singular value decomposition / SVD

1　導入

この講義で重要なのは、**特異値分解　は、正方行列に限定されない行列を、直交変換と軸方向の伸縮へ分解する方法である**ということである。

固有値と対角化は正方行列を主対象にする。一方、実務や応用では、縦横の大きさが異なる行列が頻出する。　特異値分解　は、そのような長方行列にも適用できる標準的な分解である。

SVD は、一般の行列に対する「直交基底つきの最も安定した分解」と位置付けられる。入力側の正規直交基底、出力側の正規直交基底、軸方向の非負の伸縮率を分離するため、階数、最小二乗法、擬似逆行列、低階数近似を同一の枠組みで記述できる。

2　用語と定義

特異値分解とは、実の $m \times n$ 行列 A を

$$A = U\Sigma V^T$$

と表示することである。ここで U は $m \times m$ 直交行列、V は $n \times n$ 直交行列、Σ は対角方向に非負数を並べた $m \times n$ 行列である。

Σ の対角成分

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq 0$$

を A の特異値という。複素行列では

$$A = U\Sigma V^*$$

と表示する。

3　方針

方針は、実行列では A^TA、複素行列では A^*A を解析することである。A^TA は実対称かつ非負定値であり、A^*A はエルミート行列かつ非負定値であるため、直交またはユニタリに対角化できる。

なぜ A^*A を見るかというと、任意の x に対して

$$\langle A^*Ax, x\rangle = \langle Ax, Ax\rangle = \| Ax \|^2 \geq 0$$

となるからである。したがって A^*A はエルミート行列かつ非負定値であり、固有値は 0 以上の実数になる。この固有値の平方根が特異値である。

$$A^TA = V\Lambda V^T$$

複素の場合は

$$A^*A = V\Lambda V^*$$

である。この固有値 λ_i は非負であり、$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ が特異値になる。

→ 講義 対称行列と直交対角化 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/対称行列と直交対角化-講義/

→ 講義 複素内積とユニタリ行列 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/複素内積とユニタリ行列-講義/

4 直感的な説明

特異値分解（singular value decomposition / SVD）は、行列（matrix） A の作用を

$$\text{直交変換} \longrightarrow \text{軸方向の伸縮} \longrightarrow \text{直交変換}$$

に分解する。直交変換は長さと角度を保存し、Σ だけが長さを変更する。したがって特異値（singular value）は、行列（matrix）が各主方向をどれだけ伸縮するかを表す。

5 厳密な説明

5.1 1. A^TA または A^*A から右特異ベクトルを得る

実行列では A^TA が実対称行列である。したがって正規直交固有ベクトル（eigenvector） $v_1, ..., v_n$ を選択できる。

$$A^TAv_i = \sigma_i^2 v_i$$

である。この v_i が右特異ベクトルである。複素行列では A^*A を用い、

$$A^*Av_i = \sigma_i^2 v_i$$

と記述する。この変更により、定義の $A = U\Sigma V^*$ と導出の記法が整合する。

5.2 2. 左特異ベクトルを構成する

$\sigma_i > 0$ のとき

$$u_i = \frac{Av_i}{\sigma_i}$$

と定義する。この u_i は互いに直交（orthogonal）し、長さ 1 である。これを補完して $\mathbb{R}^m$ の正規直交基底（orthonormal basis）にすると、U が得られる。

左特異ベクトルは AA^T からも特徴付けられる。実行列では

$$AA^Tu_i = \sigma_i^2 u_i$$

であり、複素行列（complex matrix）では

$$AA^*u_i = \sigma_i^2 u_i$$

である。つまり、A^TA または A^*A は入力側の主方向を与え、AA^T または AA^* は出力側の主方向を与える。

5.3 3. 階数（rank）との関係

非零特異値の個数は A の階数（rank）に等しい。

$$\boxed{\operatorname{rank}(A) = \#\{i \mid \sigma_i > 0\}}$$

小さい特異値は、行列が情報を強く圧縮する方向を示す。

5.4 4. コンパクト SVD と基本部分空間

A の階数を r とし、正の特異値だけを残すと

$$A = U_r \Sigma_r V_r^T$$

と表示できる。これをコンパクト SVDという。複素の場合は V_r^* を用いる。

この表示では、U_r の列が $\operatorname{Col}(A)$ の正規直交基底を与え、V_r の列が $\operatorname{Row}(A)$ の正規直交基底を与える。さらに、零特異値に対応する右特異ベクトルは $\ker(A)$ を、零特異値に対応する左特異ベクトルは $\ker(A^T)$ または $\ker(A^*)$ を記述する。

5.5 5. 低階数近似への接続

特異値を大きい順に並べ、上位 k 個だけを残すと

$$A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T$$

を得る。複素の場合は v_i^* を用いる。Eckart-Young の定理により、A_k は階数 k 以下の行列の中で A に最も近い近似を与える。

$$\| A - A_k \|_F = \sqrt{\sigma_{k+1}^2 + \cdots + \sigma_r^2}, \qquad \| A - A_k \|_2 = \sigma_{k+1}$$

である。この事実により、SVD は分解の存在だけでなく、圧縮や雑音除去の基礎にもなる。

6 具体例

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

では、すでに軸方向の伸縮が分離されている。したがって

$$U = I, \qquad \Sigma = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad V = I$$

とでき、特異値は $3, 1$ である。

一般の行列では、まず V^T が入力空間を主方向へ回転し、Σ が伸縮し、U が出力空間へ配置する。

7 別の観点

特異値分解は、最小二乗法と擬似逆行列の基礎である。A が正則でなくても、非零特異値の方向だけを反転することで、最小ノルム解を定義できる。

8 判定基準

- 特異値(singular value)は $A^T A$ の固有値(eigenvalue)の平方根である。
- 非零特異値の個数は階数(rank)である。
- 特異値分解(singular value decomposition / SVD)は長方行列にも適用できる。
- 小さい特異値(singular value)は情報の圧縮や数値的不安定性と関係する。
- コンパクト SVD は、列空間(column space)・行空間(row space)・核(kernel)を同時に記述する。

9 どこまで成り立つか

特異値分解(singular value decomposition / SVD)は任意の実行列・複素行列に成立する。固有値分解とは異なり、正方行列(square matrix)や対角化可能性を前提にしない。

10 最終形

$$\boxed{A = U\Sigma V^T}$$

$$\boxed{A = U\Sigma V^* \quad \text{(complex case)}}$$

$$\boxed{\sigma_i = \sqrt{\lambda_i(A^T A)}}$$

$$\boxed{\mathrm{rank}(A) = \#\{i : \sigma_i > 0\}}$$

$$\boxed{A_k = \textstyle\sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T}$$

11 一言でいうと

- 特異値分解(singular value decomposition / SVD)は、任意の行列(matrix)を直交変換と軸方向の伸縮へ分解する標準形である。

12 演習リンク

→ 基本演習 固有値・対角化・発展 exercise math linear-algebra
https://study.bem130.com/exercise/math/linear-algebra/固有値・対角化・発展-基本演習/

13 関連リンク

→ 講義 対称行列と直交対角化 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/対称行列と直交対角化-講義/

→ 講義 複素内積とユニタリ行列 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/複素内積とユニタリ行列-講義/

→ 講義 **階数の基本** lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/階数の基本-講義/

→ 講義 **最小二乗法の基本** lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/最小二乗法の基本-講義/

→ 講義 **擬似逆行列の基本** lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/擬似逆行列の基本-講義/