第５０話　固有値と特異値

今回は特異値、特に固有値と特異値の関係及び特異値分解についてお話しする。行列 $\mathbf{A}$ は、$n \times m$ 次元、$rank\ \mathbf{A} = r \le \min(n,m)$ のとき、次式のように分解可能で、これを**特異値分解**(singular value decomposition SVD)と呼ぶ。ここで $rank\ \mathbf{A}$ とは $\mathbf{A}$ の階数(ランク)を意味する。

ユニタリ行列とエルミート行列とは、実数の直交行列と対称行列の複素行列拡張版である。

$$\mathbf{A} = \mathbf{USV}^* \qquad \cdots\cdots\cdots(1)$$

ただし、$\mathbf{U}, \mathbf{V}$ は各々、$n \times n$ 次元と $m \times m$ 次元のユニタリ行列である。また $\mathbf{V}^*$ は行列 $\mathbf{V}$ の複素共役の転置行列であり、行列 $\mathbf{S}$ は $n \times m$ 次元で、

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \mathbf{\Sigma} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{\Sigma} = diag(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \cdots, \sigma_r); \\ &\sigma_1 \ge \sigma_2 \ge \sigma_3, \cdots \ge \sigma_r > 0 \end{aligned}\right\} \cdots\cdots\cdots(2)$$

ここで $\sigma_j\,(j = 1,\cdots,r)$ を行列 $\mathbf{A}$ の**特異値**(singular value)といい、上式下より、$\sigma_1 = \bar{\sigma}[\mathbf{A}]$ **を最大特異値**、$\sigma_r = \underline{\sigma}[\mathbf{A}]$ **をゼロ以外の最小特異値**という。特に、式(1)で行列 $\mathbf{A}$ が実数行列の場合、$\mathbf{U}, \mathbf{V}$ は直交行列となる。

次に、式(1)両辺の共役転置を採ると $\mathbf{A}^* = \mathbf{VS}^T\mathbf{U}^*$ となり、式(1)とで行列積を採ると、

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{A}^*\mathbf{A} = \mathbf{VS}^T\mathbf{U}^*\mathbf{USV}^* = \mathbf{VS}^T\mathbf{SV}^* &\quad &\mathbf{AA}^* = \mathbf{USV}^*\mathbf{VS}^T\mathbf{U}^* = \mathbf{USS}^T\mathbf{U}^* \\ &= \mathbf{V}\begin{bmatrix} \mathbf{\Sigma}^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\mathbf{V}^* \quad (m \times m) &\quad &= \mathbf{U}\begin{bmatrix} \mathbf{\Sigma}^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}\mathbf{U}^* \quad (n \times n) \end{aligned}\right\} \cdots(3)$$

となる。ここでは、ユニタリ行列の性質 $\mathbf{U}^*\mathbf{U} = \mathbf{I}_n$ 及び $\mathbf{V}^*\mathbf{V} = \mathbf{I}_m$ を用いている。$\mathbf{A}^*\mathbf{A}$ と $\mathbf{AA}^*$ は共にエルミート行列であり、ユニタリ行列で対角化でき、この行列の固有値 λ_i は全て正値となる。

$$\sigma_i[\mathbf{A}] = \sqrt{\lambda_i\left[\mathbf{A}^*\mathbf{A}\right]} = \sqrt{\lambda_i\left[\mathbf{AA}^*\right]} \qquad \cdots\cdots\cdots(4)$$

ただし、ここでの $\lambda_i[\cdot]$ はゼロ以外の固有値を意味する。

特異値に関する等式・不等式の公式をここに示す。ここで扱う行列は、実数行列でも複素行列でも適応可能である。

１）行列 $\mathbf{A}$ が $n \times n$ 次元で、正則の場合

$$\underline{\sigma}\left[\mathbf{A}^{-1}\right] = \frac{1}{\bar{\sigma}[\mathbf{A}]}; \quad \bar{\sigma}\left[\mathbf{A}^{-1}\right] = \frac{1}{\underline{\sigma}[\mathbf{A}]} \qquad \cdots\cdots\cdots(5)$$

２）$n \times m$ 次元の行列 $\mathbf{A}$、$m \times p$ 次元の行列 $\mathbf{B}$ であるとき

$$\underline{\sigma}[\mathbf{A}]\underline{\sigma}[\mathbf{B}] \le \underline{\sigma}[\mathbf{AB}]; \quad \bar{\sigma}[\mathbf{AB}] \le \bar{\sigma}[\mathbf{A}] \cdot \bar{\sigma}[\mathbf{B}] \qquad \cdots\cdots\cdots(6)$$

３）行列 $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ が $n \times m$ 次元であるとき

$$\left.\begin{aligned}&\bar{\sigma}[\mathbf{A}+\mathbf{B}]\le\bar{\sigma}[\mathbf{A}]+\bar{\sigma}[\mathbf{B}];\\&\underline{\sigma}[\mathbf{A}]-\bar{\sigma}[\mathbf{B}]\le\underline{\sigma}[\mathbf{A}+\mathbf{B}]\le\underline{\sigma}[\mathbf{A}]+\bar{\sigma}[\mathbf{B}]\end{aligned}\right\}\cdots\cdots\cdots(7)$$

４） $n\times n$ 次元の行列 $\mathbf{A}$ が $\underline{\sigma}[\mathbf{A}]\gg 1$ であるとき

$$\underline{\sigma}[\mathbf{I}_n+\mathbf{A}]\simeq\bar{\sigma}[\mathbf{A}];\quad \underline{\sigma}\left[\mathbf{A}(\mathbf{I}_n+\mathbf{A})^{-1}\right]\simeq 1 \qquad\cdots\cdots\cdots(8)$$

５） $n\times n$ 次元の行列 $\mathbf{A}$ が $\bar{\sigma}[\mathbf{A}]\ll 1$ であるとき

$$\bar{\sigma}[\mathbf{I}_n+\mathbf{A}]\simeq 1;\quad \bar{\sigma}\left[\mathbf{A}(\mathbf{I}_n+\mathbf{A})^{-1}\right]\simeq\bar{\sigma}[\mathbf{A}] \qquad\cdots\cdots\cdots(9)$$

特異値分解について、その特徴をまとめる。行列 $\mathbf{A}$ が $n\times m$ 次元で、ランクが $rank\ \mathbf{A}=r$ であるとする。この行列 $\mathbf{A}$ は次のように分解できる。

$$\mathbf{A}=\mathbf{USV}^* \qquad\cdots\cdots\cdots(10)$$

ここで、$\mathbf{U,V}$ は各々 $n\times n$ 次元、$m\times m$ 次元のユニタリ行列である。また、$\mathbf{V}^*$ は行列 $\mathbf{V}$ の複素共役の転置を表す。従って、以下の性質を有する。

$$\mathbf{U}^*\mathbf{U}=\mathbf{I}_n;\quad \mathbf{V}^*\mathbf{V}=\mathbf{I}_m \qquad\cdots\cdots\cdots(11)$$

行列 $\mathbf{S}$ は、$n\times m$ 次元で、次のように表される。

$$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}\mathbf{\Sigma}&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\mathbf{0}\end{bmatrix};\quad \mathbf{\Sigma}=diag(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3,\cdots,\sigma_r) \qquad\cdots\cdots\cdots(12)$$

$$\sigma_1\ge\sigma_2\ge\sigma_3,\cdots\ge\sigma_r>0 \qquad\cdots\cdots\cdots(13)$$

ここで、$\sigma_j\,(j=1,\cdots,r)$ を行列 $\mathbf{A}$ の特異値(singular value)といい、式(13)より、$\sigma_1=\bar{\sigma}[\mathbf{A}]$ **を最大特異値**、$\sigma_r=\underline{\sigma}[\mathbf{A}]$ **をゼロ以外の最小特異値**という。

行列 $\mathbf{A}$ の複素共役の転置 $\mathbf{A}^*$ は次式で表され、

$$\mathbf{A}^*=(\mathbf{USV}^*)^*=\mathbf{VS}^T\mathbf{U}^* \qquad\cdots\cdots\cdots(14)$$

両者の積を採り、式(11)を考慮すると、

$$\left.\begin{aligned}&\mathbf{A}^*\mathbf{A}=\mathbf{VS}^T\mathbf{U}^*\mathbf{USV}^*=\mathbf{VS}^T\mathbf{SV}^*\\&\mathbf{AA}^*=\mathbf{USV}^*\mathbf{VS}^T\mathbf{U}^*=\mathbf{USS}^T\mathbf{U}^*\end{aligned}\right\}\cdots\cdots\cdots(15)$$

となる。さらに、上式の両辺右より、各々 $\mathbf{V}$ と $\mathbf{U}$ を掛けると次の関係式が得られる。

$$\left.\begin{aligned}&\mathbf{A}^*\mathbf{AV}=\mathbf{VS}^T\mathbf{SV}^*\mathbf{V}=\mathbf{VS}^T\mathbf{S}\\&\mathbf{AA}^*\mathbf{U}=\mathbf{USS}^T\mathbf{U}^*\mathbf{U}=\mathbf{USS}^T\end{aligned}\right\}\cdots\cdots\cdots(16)$$

ここで、

$$\left.\begin{aligned}&\mathbf{S}^T\mathbf{S}=\begin{bmatrix}\mathbf{\Sigma}^2&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\mathbf{0}\end{bmatrix};m\times m;\quad \mathbf{\Sigma}^2=diag(\sigma_1^2,\sigma_2^2,\sigma_3^2,\cdots,\sigma_r^2)\\&\mathbf{SS}^T=\begin{bmatrix}\mathbf{\Sigma}^2&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\mathbf{0}\end{bmatrix};n\times n;\quad \mathbf{\Sigma}^2=diag(\sigma_1^2,\sigma_2^2,\sigma_3^2,\cdots,\sigma_r^2)\end{aligned}\right\}\cdot(17)$$