V-3-5. 特異値分解

スペクトル分解では、行列を直交する固有ベクトルと固有値の積に分解することができます。これは行列が二次形式だからです。二次形式の行列は逆行列が作れますし、正則な行列は逆行列が作れることが多いでしょうが、非正則行列では無理です。ですから逆行列を使って対角化できません。そこで、非正則な行列についての対角化を考えます。対角化のすべての実数行列への拡張です。結論を先に述べると、これを特異値分解と言い、特異値分解は次の式で表すことが出来ます。

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{U\Sigma V}^T$$

$$\boldsymbol{M}: p \times n \text{ 行列}$$

$$p \le n$$

$$\boldsymbol{\Sigma}: \text{行列の大きさを表す対角行列}$$

$$\boldsymbol{U}: \text{左特異射影演算子}$$

$$\boldsymbol{V}: \text{右特異射影演算子}$$

$$\boldsymbol{U}^T = \boldsymbol{U}^{-1}$$

$$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}$$

$$\boldsymbol{V}^T = \boldsymbol{V}^{-1}$$

$$\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I}$$

$$\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{p1} & m_{p2} & \cdots & m_{pn} \end{pmatrix}_{p\times n}$$

$$\boldsymbol{M}^T = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{21} & \cdots & m_{p1} \\ m_{12} & m_{22} & \cdots & m_{p2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{1n} & m_{2n} & \cdots & m_{pn} \end{pmatrix}_{n\times p}$$

今のところ私たちは$\boldsymbol{\Sigma}$について情報を持ちませんが, 次のように$\boldsymbol{M}$ を対角化する行列$\boldsymbol{U}$と$\boldsymbol{V}$があると仮定します。

$$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{MV} = \boldsymbol{\Sigma}$$

$\boldsymbol{\Sigma}$の転置行列$\boldsymbol{\Sigma^T}$を $\boldsymbol{\Sigma}$にかけます。

$$\boldsymbol{\Sigma\Sigma^T} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{MV}(\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{MV})^T == \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{MVV}^T\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{U} == \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{MM}^T\boldsymbol{U} \qquad \text{i}$$

行列の掛け算の順序を入れ替えると次のようになります。

$$\boldsymbol{\Sigma^T\Sigma} = (\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{MV})^T\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{MV} == \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{M^T}\boldsymbol{UU}^T\boldsymbol{M}\boldsymbol{U} == \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{MV} \qquad \text{ii}$$

$$\boldsymbol{MM^T}=\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{p1} & m_{p2} & \cdots & m_{pn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_{11} & m_{21} & \cdots & m_{p1} \\ m_{12} & m_{22} & \cdots & m_{p2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{1n} & m_{2n} & \cdots & m_{pn} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} {m_{1i}}^2 & \sum_{i=1}^{n} m_{1i}m_{2i} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} m_{1i}m_{pi} \\ \sum_{i=1}^{n} m_{2i}m_{1i} & \sum_{i=1}^{n} {m_{2i}}^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{n} m_{2i}m_{pi} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} m_{pi}m_{1i} & \sum_{i=1}^{n} m_{pi}m_{2i} & \cdots & \sum_{i=1}^{n} {m_{pi}}^2 \end{pmatrix}_{p\times p}$$

$$\boldsymbol{M^TM}=\begin{pmatrix} m_{11} & m_{21} & \cdots & m_{p1} \\ m_{12} & m_{22} & \cdots & m_{p2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{1n} & m_{2n} & \cdots & m_{pn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{p1} & m_{p2} & \cdots & m_{pn} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{p} {m_{i1}}^2 & \sum_{i=1}^{p} m_{i1}m_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^{p} m_{i1}m_{in} \\ \sum_{i=1}^{p} m_{i2}m_{i1} & \sum_{i=1}^{p} {m_{i2}}^2 & \cdots & \sum_{i=1}^{p} m_{i2}m_{in} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{p} m_{in}m_{i1} & \sum_{i=1}^{p} m_{in}m_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^{p} {m_{in}}^2 \end{pmatrix}_{n\times n}$$

$\boldsymbol{MM}^T$も$\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M}$どちらも対称行列です。これらを一つの対象行列と考えると、式 i と式 ii の右辺は対称行列の対角化になっています。この結果は、それぞれの対角化行列が、左右の特異射影演算子の候補になることを予想させます。その仮説を受け入れてみます。

$$\boldsymbol{\Sigma\Sigma}^T=\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{MM}^T\boldsymbol{U}=\boldsymbol{\lambda}=\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_p \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{\lambda_p} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{\lambda_p} \end{pmatrix}^T$$

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p \geq$$

$$\boldsymbol{\Sigma\Sigma^T}=\boldsymbol{\lambda}$$

数学的にはこれは正しいのですが、記述法としては問題があります。$\boldsymbol{U}$を左特異射影演算子とすると、$\boldsymbol{U}^T$ $p\times p$行列、$\boldsymbol{V}$は$n\times n$行列で$\boldsymbol{M}$は$p\times n$行列です。

$$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{MV}=\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1p} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{p1} & u_{p2} & \cdots & u_{pp} \end{pmatrix}^{\boldsymbol{T}}\begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{p1} & m_{p2} & \cdots & m_{pn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \cdots & v_{1n} \\ v_{21} & v_{22} & \cdots & v_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n1} & v_{n2} & \cdots & v_{nn} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} u_{11} & u_{21} & \cdots & u_{p1} \\ u_{12} & u_{22} & \cdots & u_{p2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{1p} & u_{2p} & \cdots & u_{pp} \end{pmatrix}_{p\times p} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{p1} & m_{p2} & \cdots & m_{pn} \end{pmatrix}_{p\times n} \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \cdots & v_{1n} \\ v_{21} & v_{22} & \cdots & v_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n1} & v_{n2} & \cdots & v_{nn} \end{pmatrix}_{n\times n}$$

$$=\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{p} u_{i1}\, m_{i1} & \sum_{i=1}^{p} u_{i1}\, m_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^{p} u_{i1}\, m_{in} \\ \sum_{i=1}^{p} u_{i2}\, m_{i1} & \sum_{i=1}^{p} u_{i2}\, m_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^{p} u_{i2}\, m_{in} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^{p} u_{ip}\, m_{i1} & \sum_{i=1}^{p} u_{ip}\, m_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^{p} u_{ip}\, m_{in} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \cdots & v_{1n} \\ v_{21} & v_{22} & \cdots & v_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n1} & v_{n2} & \cdots & v_{nn} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} \sum_{j=}^{n} v_{j1} \sum_{i=1}^{p} u_{i1}\, m_{ij} & \sum_{j=}^{n} v_{j2} \sum_{i=1}^{p} u_{i1}\, m_{ij} & \cdots & \sum_{j=}^{n} v_{jn} \sum_{i=1}^{p} u_{i1}\, m_{ij} \\ \sum_{j=}^{n} v_{j1} \sum_{i=1}^{p} u_{i2}\, m_{ij} & \sum_{j=}^{n} v_{j2} \sum_{i=1}^{p} u_{i2}\, m_{ij} & \cdots & \sum_{j=}^{n} v_{jn} \sum_{i=1}^{p} u_{i2}\, m_{ij} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{j=}^{n} v_{j1} \sum_{i=1}^{p} u_{ip}\, m_{ij} & \sum_{j=}^{n} v_{j2} \sum_{i=1}^{p} u_{ip}\, m_{ij} & \cdots & \sum_{j=}^{n} v_{jn} \sum_{i=1}^{p} u_{ip}\, m_{ij} \end{pmatrix}_{p\times n}$$

$$=\begin{pmatrix} \sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{j1} u_{i1}\, m_{ij} & \sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{j2} u_{i1}\, m_{ij} & \cdots & \sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{jn} u_{i1}\, m_{ij} \\ \sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{j1} u_{i2}\, m_{ij} & \sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{j2} u_{i2}\, m_{ij} & \cdots & \sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{jn} u_{i2}\, m_{ij} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{j1} u_{ip}\, m_{ij} & \sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{j2} u_{ip}\, m_{ij} & \cdots & \sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{jn} u_{ip}\, m_{ij} \end{pmatrix}_{p\times n}$$

実際にこの行列の成分である次の式を計算するのは大変です。

$$\sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{jk} u_{ih}\, m_{ij}$$

しかし、ここから$\boldsymbol{\Sigma}$が$p\times n$であり、次の関係があることがわかります

$$\sum_{j=}^{n} \sum_{i=1}^{p} v_{jk} u_{ih}\, m_{ij} = \gamma_i \delta_{ij}$$

ここで、関数δ_{ij}はクロネッカーのデルタといわれるもので、これネッカーのデルタとは次

の二値変数です。

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 \ (i = j) \\ 0 \ (i \neq j) \end{cases}$$

例をあげます。
各因子が次のようになっているとします。.

$$\boldsymbol{u_i}^T \boldsymbol{u_j} = \delta_{ij}$$

クロネッカーのデルタを使わないで行列を書いてみます。

$$\boldsymbol{U_1}^T \boldsymbol{U_1} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{u_1}^T \\ \boldsymbol{u_2}^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{u_p}^T \end{pmatrix} (\boldsymbol{u_1} \quad \boldsymbol{u_2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{u_p}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{u_1}^T \boldsymbol{u_1} & \boldsymbol{u_1}^T \boldsymbol{u_2} & \cdots & \boldsymbol{u_1}^T \boldsymbol{u_p} \\ \boldsymbol{u_2}^T \boldsymbol{u_1} & \boldsymbol{u_2}^T \boldsymbol{u_2} & \cdots & \boldsymbol{u_2}^T \boldsymbol{u_p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{u_p}^T \boldsymbol{u_1} & \boldsymbol{u_p}^T \boldsymbol{u_2} & \cdots & \boldsymbol{u_p}^T \boldsymbol{u_p} \end{pmatrix}$$

これは、$\begin{pmatrix} \delta_{11} & \delta_{12} & \cdots & \delta_{1p} \\ \delta_{21} & \delta_{22} & \cdots & \delta_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_{p1} & \delta_{p2} & \cdots & \delta_{pp} \end{pmatrix}$とかけるので

$$\boldsymbol{U_1}^T \boldsymbol{U_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}_{p \times p}$$

です。

クロネッカーのデルタを使うと、次のように書けます

$$\boldsymbol{U}^T \boldsymbol{M} \boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} \gamma_1 \delta_{11} & \delta_{12} & \cdots & \delta_{1p} & \delta_{1p+1} & \cdots & \delta_{1n} \\ \delta_{21} & \gamma_2 \delta_{22} & \cdots & \delta_{2p} & \delta_{2p+1} & \cdots & \delta_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \delta_{p1} & \delta_{p2} & \cdots & \gamma_p \delta_{pp} & \delta_{pp+1} & \cdots & \delta_{pn} \end{pmatrix}_{p \times n} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_p & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{p \times n}$$

γを特異値と言います。
個の両辺に左右から、$\boldsymbol{U}$と$\boldsymbol{V}^T$をかけます

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T \boldsymbol{M} \boldsymbol{V} \boldsymbol{V}^T = \boldsymbol{U} \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_p & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{p \times n} \boldsymbol{V}^T = \boldsymbol{U} \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{V}^T$$

$$\gamma_i = \sqrt{\lambda_1}$$

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T \boldsymbol{M} \boldsymbol{V} \boldsymbol{V}^T = \boldsymbol{I}\boldsymbol{M}\boldsymbol{I} = \boldsymbol{M}$$

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{U} \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{V}^T$$

これが特異値分解です。つまり、左特異射影演算子は、$\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^T$の直交投影演算子、右特異射影演算子は$\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M}$の直交投影演算子です。これがこの項の結論なのですが、$\boldsymbol{U}$ と $\boldsymbol{V}$が存在するという仮説の妥当性はまだ証明はしていません。

証明

第一段階

$$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u_1} \quad \boldsymbol{u_2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{u_p})$$

$$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{U}=\boldsymbol{\Lambda}$$

$\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^T$は対称行列ですから、その直交投影演算子$\boldsymbol{U}$は存在します。

左から$\boldsymbol{U}$をかけます。

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{U}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}$$

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^T=\boldsymbol{I}\text{だから}$$

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{U}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}=(\boldsymbol{u_1}\quad \boldsymbol{u_2}\quad \cdots\quad \boldsymbol{u_p})\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_p\end{pmatrix}=(\lambda_1\boldsymbol{u_1}\quad \lambda_2\boldsymbol{u_2}\quad \cdots\quad \lambda_p\boldsymbol{u_p})$$

$$\therefore\quad \boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{u_i}=\lambda_i\boldsymbol{u_i}=\gamma_i{}^2\boldsymbol{u_i}$$

同様に

$$\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{v_1}\quad \boldsymbol{v_2}\quad \cdots\quad \boldsymbol{v_n})$$

$$\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{L^2}$$

$$\boldsymbol{L^2}=\begin{pmatrix}l_1{}^2 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & l_2{}^2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & l_n{}^2\end{pmatrix}$$

左から$\boldsymbol{V}$をかけます。

$$\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M}\boldsymbol{V}=\mathbf{V}\boldsymbol{L^2}$$

$$\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M}\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{v_1}\quad \boldsymbol{v_2}\quad \cdots\quad \boldsymbol{v_n})\begin{pmatrix}l_1{}^2 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & l_2{}^2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & l_n{}^2\end{pmatrix}=\left(l_1{}^2\boldsymbol{v_1}\quad l_2{}^2\boldsymbol{v_2}\quad \cdots\quad l_n{}^2\boldsymbol{v_n}\right)$$

$$\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M}\boldsymbol{v_j}=l_2{}^2\boldsymbol{v_j}$$

l_i=γ_iとすると

$$\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M}\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{v_1}\quad \boldsymbol{v_2}\quad \cdots\quad \boldsymbol{v_n})\begin{pmatrix}\gamma_1{}^2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \gamma_2{}^2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_p{}^2 & 0 & \cdots & 0\end{pmatrix}=\left(\gamma_1{}^2\boldsymbol{v_1}\quad \gamma_2{}^2\boldsymbol{v_2}\quad \cdots\quad \gamma_p{}^2\boldsymbol{v_p}\quad 0\boldsymbol{v_{p+1}}\quad \cdots\quad 0\boldsymbol{v_n}\right)$$

$$\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M}\boldsymbol{v_j}=\gamma_j{}^2\boldsymbol{v_j}\quad \text{for j} = 1\sim\text{p}$$

$$\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M}\boldsymbol{v_j}=0\boldsymbol{v_j}=0\quad \text{for j} = p+1\sim\text{n}$$

$\boldsymbol{U}$ と$\boldsymbol{V}$の存在を証明します。

対象行列の直交射影演算子だから$\boldsymbol{U}$ 、$\boldsymbol{V}$どちらかが存在することは自明。$\boldsymbol{V}$が存在することにして

$$\boldsymbol{w_j}=\frac{1}{\gamma_j}\boldsymbol{v_j}$$

$$\boldsymbol{v_i}\boldsymbol{v_j}=\delta_{ij}$$

$$\boldsymbol{w_i}\boldsymbol{w_j} = \frac{1}{\gamma_i\gamma_j}\boldsymbol{v_i}\boldsymbol{v_j} = \frac{1}{\gamma_i\gamma_j}\delta_{ij}$$

$$\boldsymbol{w_i} \perp \boldsymbol{w_j}\ (i \neq j)$$

$$\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{v_1} \quad \boldsymbol{v_2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{v_p} \quad \boldsymbol{v_{p+1}} \quad \cdots \quad \boldsymbol{v_n})$$

$$\boldsymbol{W} = (\boldsymbol{w_1} \quad \boldsymbol{w_2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{w_p})$$

$$\boldsymbol{W^T} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{w_1}^T \\ \boldsymbol{w_2}^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{w_p}^{\boldsymbol{T}} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_p \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{W}^T\boldsymbol{LV} = \boldsymbol{W}^T\boldsymbol{L}(\boldsymbol{v_1} \quad \boldsymbol{v_2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{v_p} \quad \boldsymbol{v_{p+1}} \quad \cdots \quad \boldsymbol{v_n})$$

$$= \boldsymbol{W}^T(\gamma_1\boldsymbol{w_1} \quad \gamma_2\boldsymbol{w_2} \quad \cdots \quad \gamma_p\boldsymbol{w_p} \quad 0 \quad \cdots \quad 0)$$

$$= \begin{pmatrix} \boldsymbol{w_1}^T \\ \boldsymbol{w_2}^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{w_p}^{\boldsymbol{T}} \end{pmatrix} (\gamma_1\boldsymbol{w_1} \quad \gamma_2\boldsymbol{w_2} \quad \cdots \quad \gamma_p\boldsymbol{w_p} \quad 0 \quad \cdots \quad 0)$$

$$= \begin{pmatrix} \gamma_1\boldsymbol{w_1}^T\boldsymbol{w_1} & \gamma_2\boldsymbol{w_1}^T\boldsymbol{w_2} & \cdots & \gamma_p\boldsymbol{w_1}^T\boldsymbol{w_p} & 0\boldsymbol{w_1}^T & \cdots & 0\boldsymbol{w_1}^T \\ \gamma_1\boldsymbol{w_2}^T\boldsymbol{w_1} & \gamma_2\boldsymbol{w_2}^T\boldsymbol{w_2} & \cdots & \gamma_p\boldsymbol{w_2}^T\boldsymbol{w_p} & 0\boldsymbol{w_2}^T & \cdots & 0\boldsymbol{w_2}^T \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \gamma_1\boldsymbol{w_p}^T\boldsymbol{w_1} & \gamma_2\boldsymbol{w_p}^T\boldsymbol{w_2} & \cdots & \gamma_p\boldsymbol{w_2}^T\boldsymbol{w_p} & 0\boldsymbol{w_p}^T & \cdots & 0\boldsymbol{w_p}^T \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_p & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

$$\because \quad \boldsymbol{w_i}^T\boldsymbol{w_j} = \delta_{ij} \quad \boldsymbol{w_i} \perp \boldsymbol{w_j} \qquad\qquad \text{iii}$$

証明終わり

以上ですべての実行列に左特異射影演算子が存在することがわかりました。これを$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{W}$として、結論は

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{U\Sigma V}^T$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_p & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{p\times n}$$

これは、$p < n$の場合で、$p > n$の場合は次のようになります。

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_n \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{p\times n}$$

式 72

場合によっては$\boldsymbol{MM}^T$が半正定値（固有値に０を含む）ということもあります。０でない固有値の数をランク(r)と言います。

$r < p$または n の時は

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{p\times n}$$

もう少し一般化すると、 $\boldsymbol{\Sigma}$は次のように書けます。

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{S}_{r,r} & \boldsymbol{O}_{r.n-r} \\ \boldsymbol{O}_{m-r,r} & \boldsymbol{O}_{m-r,n-r} \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{S}_{r,r}$: 対角行列, $diag(\gamma_1 \quad \cdots \quad \gamma_r)$

$diag(\quad)$は対角行列を表します。

$$\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \cdots \geq \gamma_r > 0$$

$$\boldsymbol{O}_{i,j} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{i\times j}$$

特異値分解の応用

$$\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

この行列は形式的には正方行列ですが、線形従属です。第３行が第２行の実数倍になっているからです。したがって線形独立な行は例えば１列目と２列目の組み合わせです。この行列のランクは２ということになります。線形独立の行や列が２つだからです。この場合は簡単ですが、実際にはランクの数を数えるのは結構難しいのです。一つの行が他のいくつかの行の線形結合で出来ている場合にはなかなかわかりません。また、似たようなデータがデータセットの中に含まれていることは珍しくありません。近似的に近いデーターの存在を考えると、難しいことになります。また、近似的に０に近い固有は０だと考えるのが現実的かもしれません。

$\boldsymbol{\Sigma}$が次のようになっているときには

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_p & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{p\times n}$$

$$diag(\gamma_1 \quad \cdots \quad \gamma_p)$$

$$\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \cdots \geq \gamma_p \geq 0$$

分析者は分析目的を考えて、他の固有値に比べて小さな固有値を実質的に 0 とする判断もあります。つまり、分析者は経験や過去の研究を参考に、以下の不等式にあるデータを固有値を採用する閾値 S を決めます。

$$\gamma_1 \geq \gamma_2 \geq \cdots \geq \gamma_r \geq S \geq \gamma_{r+1} \geq \cdots \geq \gamma_{r'} > 0$$

その上で次のように対角行列$\boldsymbol{\Sigma}$を作ります。

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{p\times n}$$

例として取り上げた次の行列で実際にやってみます。

$$\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{M^T} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{MM^T} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}$$

固有方程式

$$\begin{vmatrix} 16-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 2-\lambda & -2 \\ 0 & -2 & 2-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(16-\lambda)(2-\lambda)(2-\lambda) - 4(16-\lambda) = 0$$

$$(\lambda-16)(\lambda-4)\lambda = 0$$

固有値の一つが 0 なので、ランクは３－1=2 だとわかります。

固有値 16 に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 16\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 16x_1 \\ 2x_2 - 2x_3 \\ -2x_2 + 2x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16x_1 \\ 16x_2 \\ 16x_3 \end{pmatrix}$$

$$14x_2 + 2x_3 = 0$$

$$2x_2 + 14x_3 = 0$$

これが成立つのは、$x_2 = x_3 = 0$

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

固有値 4 に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 4 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 16x_1 \\ 2x_2 - 2x_3 \\ -2x_2 + 2x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4x_1 \\ 4x_2 \\ 4x_3 \end{pmatrix}$$

$$12x_1 = 0$$

$$-2x_2 - 2x_3 = 0$$

$$-2x_2 - 2x_3 = 0$$

これが成立つのは、$x_1 = 0,\ x_2 = -x_3$

$$\boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

固有値 0 に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 16x_1 \\ 2x_2 - 2x_3 \\ -2x_2 + 2x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = 0$$

$$2x_2 - 2x_3 = 0$$

$$-2x_2 + 2x_3 = 0$$

これが成立つのは、$x_1 = 0,\ x_2 = x_3$

$$\boldsymbol{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

左特異射影演算子は

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{-\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

この場合はもともと対称行列だから右射影演算子は

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{-\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}^T$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

結果が正しいことを確認します。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{-\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

この結果は右特異射影演算子が左特異射影演算子と一致しています。この結果は対称行列の 2 乗を考えると納得できます。対称行列では次の関係が成立っています。

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^T = \boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}^2$$

この行列 $\boldsymbol{M}$は対称行列ですから、次のように対角化できます。

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{U}^T$$

これを二乗すると

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^T = \boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}^2 = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}^2\boldsymbol{U}^T$$

このことから、対称行列の対角化は右特異射影演算子が左射影演算子と一致する特別の場合の特異値分解なのだと理解できます。

$$\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{M}^T = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^T = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

固有値 16、固有ベクトル$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

固有値 2、固有ベクトル$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

左特異射影演算子

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{M}^T\boldsymbol{M} = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

固有方程式

$$\begin{vmatrix} 16-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1-\lambda & -1 \\ 0 & -1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(16-\lambda)(1-\lambda)(1-\lambda) - (16-\lambda) = 0$$

$$(16-\lambda)(\lambda^2 - 2\lambda + 1 - 1) = 0$$

$$(\lambda - 16)(\lambda - 2)\lambda = 0$$

固有値 16 に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 16\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 16x_1 \\ x_2 - x_3 \\ -x_2 + x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16x_1 \\ 16x_2 \\ 16x_3 \end{pmatrix}$$

$$-15x_2 - x_3 = 0$$

$$-x_2 - 15x_3 = 0$$

これが成立つのは、$x_2 = x_3 = 0$

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

固有値 2 に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 16x_1 \\ x_2 - x_3 \\ -x_2 + x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x_1 \\ 2x_2 \\ 2x_3 \end{pmatrix}$$

$$14x_1 = 0$$

$$-x_2 - x_3 = 0$$

$$-x_2 - x_3 = 0$$

これが成立つのは、$x_1 = 0,\ x_2 = -x_3$

$$\boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

固有値 0 に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 0\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 16x_1 \\ x_2 - x_3 \\ -x_2 + x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = 0$$
$$x_2 - x_3 = 0$$
$$-x_2 + x_3 = 0$$

これが成立つのは、$x_1 = 0,\ x_2 = x_3$

$$\boldsymbol{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

右射影演算子は

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

結果が正しいことを確認します。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

図 62 に特異値分解の作業と逆行列を掛ける作業を示しました。この図では行列$\boldsymbol{M}$は単位円を斜めになった楕円に黄色い矢印で示したベクトルをDの楕円中の黄色い矢印に変換する行列です。その逆の作業が$\boldsymbol{M^{-1}}$を掛ける作業です。しかし、逆行列が存在するためにはいくつかの条件が必要です。特に、正方行列でなければ逆行列が存在しません。特異値分解はこの逆行列に代わる逆計算の方法を提供します。つまり、行列 $\boldsymbol{V}^T$によって 直交系に回転したものを $\boldsymbol{\Sigma}$ で拡大変形し、$\boldsymbol{U}$でそれを回転しているということです。

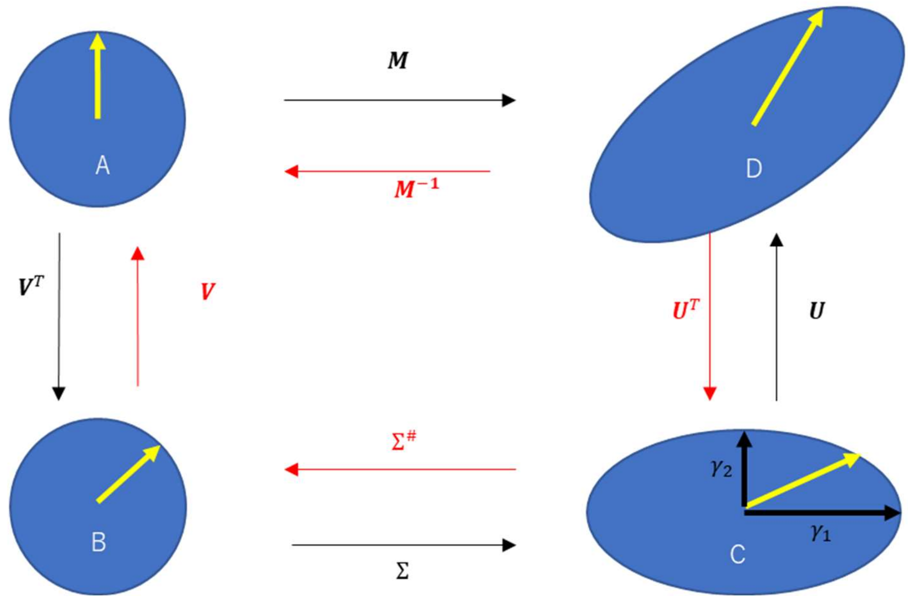

図 62 特異値分解と逆計算

A → Dの変換は次のように表せます。

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D}$$

その逆演算 D → Aは次の式で表せます。

$$\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{M}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{D}$$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{D}$$

しかし $\boldsymbol{M}^{-1}$がない場合には、$\boldsymbol{M}$の代替の経路 $\boldsymbol{V}^T \to \boldsymbol{\Sigma} \to \boldsymbol{U}$を考えるので、

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \gamma_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \gamma_r & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{p\times n}$$

とかけるので、逆ルート$\boldsymbol{U}^T \to \boldsymbol{\Sigma} \to \boldsymbol{V}$は次の式で表せます。

$$\boldsymbol{M}^* = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\#}\boldsymbol{U}^T$$

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\#} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\gamma_1} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\gamma_2} & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{\gamma_r} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}_{n\times p}$$

$\boldsymbol{M}^*$: 逆行列の代替の行列 (疑似的な逆行列)

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{M}^{*}\boldsymbol{D}$$

同じような機能を持つ行列としてV-3-4で疑似逆行列について説明しました。そこで、疑似逆行列と特異値分解の関係について考えます。

疑似逆行列の定義は次の式です。

$$\boldsymbol{M}^{\#} = (\boldsymbol{M}^{T}\boldsymbol{M})^{-1}\boldsymbol{M}^{T}$$

対称行列の対角化を使うと次のように変形できます

$$\boldsymbol{M}^{T}\boldsymbol{M} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{2}\boldsymbol{V}^{T}$$

$$(\boldsymbol{M}^{T}\boldsymbol{M})^{-1} = \boldsymbol{V}^{T^{-1}}\boldsymbol{\Sigma}^{-2}\boldsymbol{V}^{-1} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{-2}\boldsymbol{V}^{T}$$

$$\boldsymbol{M}^{T} = (\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{T})^{T} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^{T}$$

$$\boldsymbol{M}^{\#} = (\boldsymbol{M}^{T}\boldsymbol{M})^{-1}\boldsymbol{M}^{T} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{-2}\boldsymbol{V}^{T}\,\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^{T} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{U}^{T}$$

$$\boldsymbol{M}^{*} = \boldsymbol{M}^{\#}$$

つまり、疑似逆行列と特異値分解の式は同じです。その応用として小さな値の特異値を０と近似して行列のランクを下げることが考えられます。この考え方が主成分分析の基礎です。

練習

練習Ｉ．２次正方行列の特異値分解の例

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

左特異射影演算子の計算

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}} = \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

　固有値と固有ベクトル

$$\begin{vmatrix} 4-\lambda & 0 \\ 0 & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(4-\lambda)(1-\lambda) = 0$$

$$\lambda = 4, 1$$

　固有値$\lambda = 4$に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 4\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = x_1$$

$$x_2 = 4x_2$$

$$x_1 = t,\ x_2 = 0、$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

固有値$\lambda = 1$に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$4x_1 = x_1$$

$$x_2 = x_2$$

$$x_1 = 0\ ,\ x_2 = t$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

左特異射影演算子

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{U^{-1}} = \ \boldsymbol{U}^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

右特異射影演算子の計算

$$\boldsymbol{A^T A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$$

固有方程式

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 \\ 0 & 4-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(4-\lambda)(1-\lambda) = 0$$

$$\lambda = 4, 1$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 4\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = 4x_1$$

$$x_2 = x_2$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = x_1$$

$$4x_2 = x_2$$

$$x_1 = \mathrm{t}x_1$$

$$x_2 = 0$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

右特異射影演算子

$$\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \boldsymbol{V^{-1}} = \ \boldsymbol{V}^T = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma_1 = \sqrt{\lambda_1} = \sqrt{4} = 2$$

$$\gamma_2 = \sqrt{\lambda_2} = \sqrt{1} = 1$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

確認

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{U\Sigma V}^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

練習 II. 2×3行列の例

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

この行列のランクは 2

$$\boldsymbol{A}^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

左特異射影演算子

$$\boldsymbol{AA}^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

固有値 $\lambda = 2, 1$ 、特異値 $\gamma_1 = \sqrt{2},\ \gamma_1 = 1.$

固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = 2x_1$$

$$2x_2 = 2x_2$$

$$x_1 = 0, x_2 = t$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = x_1$$

$$2x_2 = x_2$$

$$x_1 = 1, x_2 = 0$$

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \boldsymbol{U^{-1}} = \ \boldsymbol{U}^T = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

右特異射影演算子

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

固有値と固有ベクトル

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(1-\lambda)^3 - (1-\lambda) = 0$$

$$(1-\lambda)\{(1-\lambda)^2 - 1\} = 0$$

$$\lambda(1-\lambda)(2-\lambda) = 0$$

$$\lambda = 2, 1, 0$$

固有値$\lambda = 2$に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = 2x_1$$

$$x_2 + x_3 = 2x_2$$

$$x_2 + x_3 = 2x_3$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ t \\ t \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{t} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

固有値$\lambda = 1$に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = x_1$$

$$x_2 + x_3 = x_2$$

$$x_2 + x_3 = x_3$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

固有ベクトル$\lambda = 0$に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 0\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = x_1$$

$$x_2 + x_3 = 0$$

$$x_2 + x_3 = 0$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ t \\ -t \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{t} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

したがって右特異射影演算子は

$$\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{V}^T = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

確認

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{U\Sigma}\mathbf{V}^{\boldsymbol{T}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

練習 III. 特異値分解の実用的な意味の一つを理解するために、上の2×3 行列の疑似逆行列を求めることを考えます。初めに以下の式で直接疑似逆行列を求めます。

$$\boldsymbol{A}^{\#} = (\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A})^{-\mathbf{1}} \boldsymbol{A}^T$$

$$\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 0$$

$\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A}$上の行列式が 0 だから$(\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A})^{-\mathbf{1}}$が計算できません。

そこで、特異値分解の逆演算の形で逆行列を求めます。

$$\boldsymbol{A}^{\#}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\#}\boldsymbol{U}^{T}$$

$$\boldsymbol{V}=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\#}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{U}^{T}=\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}^{\#}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\#}\boldsymbol{U}^{T}=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

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

確かめてみます。

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\#}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}^{\#}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 1\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

３行目三列目を除けば確かに単位行列です。

練習 IV. 3×4 行列の特異値分解

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & 2 & 2 & 2\\ 1 & -1 & 1 & -1\\ -1 & 1 & -1 & 1\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{T}=\begin{pmatrix}2 & 2 & 2 & 2\\ 1 & -1 & 1 & -1\\ -1 & 1 & -1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 1 & -1\\ 2 & -1 & 1\\ 2 & 1 & -1\\ 2 & -1 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}16 & 0 & 0\\ 0 & 4 & -4\\ 0 & -4 & 4\end{pmatrix}=4\begin{pmatrix}4 & 0 & 0\\ 0 & 1 & -1\\ 0 & -1 & 1\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & 1 & -1\\ 2 & -1 & 1\\ 2 & 1 & -1\\ 2 & -1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 2 & 2 & 2\\ 1 & -1 & 1 & -1\\ -1 & 1 & -1 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}6 & 0 & 6 & 0\\ 0 & 6 & 0 & 6\\ 6 & 0 & 6 & 0\\ 0 & 6 & 0 & 6\end{pmatrix}$$

左特異射影演算子

固有値・特異値

$$\begin{vmatrix} 4-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1-\lambda & -1 \\ 0 & -1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(4-\lambda)(1-\lambda)^2 - (4-\lambda) = 0$$

$$(4-\lambda)((1-\lambda)^2 - 1) = 0$$

$$\lambda(4-\lambda)(2-\lambda) = 0$$

$$\lambda_1 = 4 \times 4, \lambda_2 = 4 \times 2, \lambda_3 = 0$$

したがって　Rank r=2

特異値

$$\gamma_1 = 4, \gamma_2 = 2\sqrt{2}$$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

固有値４に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 4\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$4x_1 = 4x_1$$

$$x_2 - x_3 = 4x_2$$

$$-x_2 + x_3 = 4x_3$$

$$-x_3 = 3x_2$$

$$-x_2 = 3x_3$$

$$\boldsymbol{e}_1\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$4x_1 = 2x_1$$

$$x_2 - x_3 = 2x_2$$

$$-x_2 + x_3 = 2x_3$$

$$-x_3 = x_2$$

$$-x_2 = x_3$$

$$\boldsymbol{e}_2\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

固有値０に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 0\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

$$4x_1 = 0$$

$$x_2 - x_3 = 0$$

$$-x_2 + x_3 = 0$$

$$x_2 = x_3$$

$$x_3 = x_2$$

$$\boldsymbol{e_3}\begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

左特異射影演算子は

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

右特異射影演算子を求める

$$\begin{vmatrix} 6-\lambda & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 6-\lambda & 0 & 6 \\ 6 & 0 & 6-\lambda & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 6-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(6-\lambda)^4 + 6^4 - 2\times 6^2(6-\lambda)^2 = 0$$

$$((6-\lambda)^2)^2 - 2\times 6^2(6-\lambda)^2 + (6^2)^2 = 0$$

$$((6-\lambda)^2 - 6^2)^2 = 0$$

$$(\lambda^2 - 12\lambda)^2 = 0$$

$$\lambda = 12, 0$$

固有値１２に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 6 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 6 \\ 6 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = 12\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$$

$$6x_1 + 6x_3 = 12x_1$$

$$6x_2 + 6x_4 = 12x_4$$

$$x_1 = x_3$$

$$x_2 = x_4$$

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \boldsymbol{e}_2 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

固有値 0 に属する固有ベクトル

$$\begin{pmatrix} 6 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 6 \\ 6 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = 0$$

$$6x_1 + 6x_3 = 0$$

$$6x_2 + 6x_4 = 0$$

$$x_1 = -x_3$$

$$x_2 = -x_4$$

$$\boldsymbol{e}_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \boldsymbol{e}_4 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

右特異射影演算子

$$\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

確認

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{U\Sigma}\mathbf{V}^{\boldsymbol{T}}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^T$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$