

第 5 回

固有値分解 eigen decomposition
特異値分解 singular value decomposition
応用例

固有値と固有ベクトル

a 次の正方行列 A に関して

$$A p = \lambda p$$

$$(A - \lambda I) p = 0$$

斉次方程式だからフルランクではいけない。
行列式が 0 となる。

固有方程式

$$|A - \lambda I| = 0$$

根は重根も含めて最大 a 個(実数とは限らない)
固有ベクトルは定数倍を除いて一意に定まる

$$|A - \lambda I| = \lambda^2 - (a_{11} + a_{22})\lambda + a_{11}a_{22} - a_{12} * a_{21} = 0$$

A は対称行列

固有値は実数、固有ベクトルは直交

$$AP_q = P_q \Lambda_q$$

Λ は固有値を対角要素として持つ対角行列
 P は各固有値に対応する固有ベクトルを横に並べたもの
 $q \leq a$

固有ベクトルは直交する。

$$P_q' P_q = I$$

行列の対角化

$$AP_q = P_q \Lambda_q$$

この左から P' を掛ける、。

$$P_q' AP_q = \Lambda_q$$

3

固有値分解 全ての固有値と固有ベクトル

A は対称行列

(スペクトル分解)

$$A = P \Lambda P'$$

Λ は固有値を対角要素として持つ対角行列
 P は各固有値に対応する固有ベクトルを横に並べたもの

$$P' P = I \quad \text{and} \quad P P' = I$$

$$A^{-1} = P \Lambda^{-1} P'$$

$$A^n = P \Lambda^n P'$$

$$\text{tr}(A) = \text{tr}(P \Lambda P') = \text{tr}(\Lambda P' P) = \text{tr}(\Lambda) = \sum_{i=1}^a \lambda_i$$

4

正定値行列

正定値行列

全ての x に関して

$$x' A x > 0 \quad (264)$$

を満たす行列を正定値行列と呼ぶ。 A の固有値分解を使うと

$$x' A x = x' P \Lambda P' x = y' \Lambda y > 0 \quad (265)$$

y の要素を順に $y = (1, 0, 0, \dots)$, $y = (0, 1, 0, \dots)$ とすることにより、全ての固有値が正であることと同値であることが示せる。すなわち、正定値行列の固有値は全て正、半正定値行列の固有値は全て非負である。

5

応用例

4:

A が $n \times r$, $n \geq r$ の行列、 D が $r \times r$ の対称行列の時

$$B = AT \quad (266)$$

で作られる行列 B が

$$B'B = D \quad (267)$$

となるような $r \times r$ の T 行列を求めよ。

解

$A'A$ は半正定値の対称行列であるのでその固有値分解を

$$A'A = P \Lambda P', \quad P'P = I_r$$

また、 D の固有値分解を

$$D = Q \Delta Q', \quad Q'Q = I_r$$

とすると、 R を任意の $r \times r$ の直交行列として

$$T = P \Lambda^{-\frac{1}{2}} R \Delta^{\frac{1}{2}} Q'$$

が求める解である。(一意には定まらない。)

6

$$T = P \Lambda^{-\frac{1}{2}} R \Delta^{\frac{1}{2}} Q'$$

$$A'A = P \Lambda P', \quad P'P = I_r \qquad R'R = I$$

$$D = Q \Delta Q', \quad Q'Q = I_r$$

$$\begin{aligned} B'B &= T'A'AT = T'P\Lambda P'T \\ &= Q\Delta^{\frac{1}{2}}R'\Lambda^{-\frac{1}{2}}P'P\Lambda P'P\Lambda^{-\frac{1}{2}}R\Delta^{\frac{1}{2}}Q' \\ &= Q\Delta^{\frac{1}{2}}R'\Lambda^{-\frac{1}{2}}\Lambda\Lambda^{-\frac{1}{2}}R\Delta^{\frac{1}{2}}Q' \\ &= Q\Delta^{\frac{1}{2}}R'R\Delta^{\frac{1}{2}}Q' \\ &= Q\Delta^{\frac{1}{2}}\Delta^{\frac{1}{2}}Q = Q\Delta Q = D \end{aligned}$$

7

制約の個数

直交行列の自由な要素

R を $r \times r$ として

$$R'R = I \tag{276}$$

は対角要素が全て 1、非対角要素が全て 0 という制約であるが、 $R'R$ は対称であるため、実質的に 0 の制約は $r(r-1)/2$ 個である。したがって制約の数は $r + r(r-1)/2 = r(r+1)/2$ であり、自由に決められる要素の数は $r(r-1)/2$ である。

$B'B = D$ という制約条件は対称であるため実質的に $r(r+1)/2$ 個の制約である。しかし T は $r \times r$ の行列であるため $r^2 - r(r+1)/2 = r(r-1)/2$ 個の自由な要素があると考えられるが、これが R の自由な要素に対応している。

$B'B =$ 対角行列 という制約

制約条件の数は $r(r-1)/2$ である。したがって、 R としては $R'R =$ 対角行列 となるものを用いれば良い。

T が直交行列の場合

T の自由な要素の数は $r(r-1)/2$ である。したがって、制約条件 $B'B =$ 対角行列 の数は $r(r-1)/2$ であるため、この条件で直交行列 T が一意に定まる。

8

特異値分解 Singular Value Decomposition

5: 特異値分解 SVD

X が $a \times b$ の階数 r の行列の時

$$X = U_r D_r V_r' \quad (277)$$

を行列 X の (縮小された compact) 特異値分解と呼ぶ。ただし、 $X'X$ ならびに XX' の縮小された固有値分解を

$$X'X = V_r D_r^2 V_r', \quad XX' = U_r D_r^2 U_r' \quad (278)$$

ただし、 V_r は $b \times r$ の行列、 U_r は $a \times r$ の行列、 D_r は $r \times r$ の対角行列で

$$V_r' V_r = I_r, \quad \text{and} \quad U_r' U_r = I_r \quad (279)$$

満たすものとする。

特異値分解

また、 D_r をさらに分解したものをうければ

$$X = U_r D_r V_r' = U_r D_r^{\frac{1}{2}} D_r^{\frac{1}{2}} V_r' = U^* (V^*)'$$

ただし、

$$U^* = U_r D_r^{\frac{1}{2}}, \quad \text{and} \quad V^* = V_r D_r^{\frac{1}{2}}$$

と書ける。

行列の最小2乗近似

なお、 P 等として、階数が $q, q \leq r$ のものを用いた場合、

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{U}_q \mathbf{D}_q \mathbf{V}'_q \quad (260)$$

は

$$\text{RSS} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (x_{ij} - \hat{x}_{ij})^2 \quad (261)$$

を最小とする階数 q の行列となることが知られている。これを行列 \mathbf{X} の Eckart-Young Decomposition と呼ぶ。

また、これを

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{F} \mathbf{A}' \quad (262)$$

ただし、

$$\mathbf{F} = a \mathbf{U}_q \quad \text{and} \quad \mathbf{A} = \frac{1}{a} \mathbf{V}_q \mathbf{D}_q \quad (263)$$

と書くことも可能であるが、これは主成分分析に他ならない。