

『AI・データサイエンスのための数学入門』学習補助資料

特異値と方向から、行列を理解する

入力と出力の軸・伸縮率・階数・低ランク近似

1 SVD を読む鍵は $Av_i = \sigma_i u_i$

行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ は、入力 $\mathbb{R}^n$ を出力 $\mathbb{R}^m$ に写します。特異値分解 $A = U\Sigma V^\top$ は、入力側と出力側にそれぞれ適した直交座標を選び、作用を軸方向の伸縮として表すものです。

行列	サイズ	役割
V	$n \times n$	列 v_i は入力側の正規直交基底
Σ	$m \times n$	対角の非負特異値で伸縮する
U	$m \times m$	列 u_i は出力側の正規直交基底

v_i を入力すると $V^\top v_i = e_i$ となるため、 $i \leq \min(m, n)$ について

$$Av_i = U\Sigma e_i = \boxed{\sigma_i u_i}.$$

v_i, u_i はどちらも長さ 1 なので、 $\|Av_i\| = \sigma_i$ です。特異値はこの方向の伸縮倍率を表します。

なぜ入力側に V ではなく $V^\top$ があるのか

入力を $x = \sum_{i=1}^n c_i v_i$ と展開すると、正規直交性から $c_i = v_i^\top x$ です。これらの係数を並べたベクトルが $V^\top x$ です。

$$x \mapsto V^\top x \mapsto \Sigma V^\top x \mapsto U\Sigma V^\top x.$$

入力方向と出力方向は、同じとは限らない

一般に $v_i \neq u_i$ です。特異ベクトルの関係は $Av_i = \sigma_i u_i$ であり、固有ベクトルの関係 $Av = \lambda v$ とは異なります。長方形行列では入力と出力の次元さえ異なります。

直交行列は長さ・角度を保ちますが、回転だけでなく反射を含むことがあります。また、長方形の Σ には、伸縮のほかに座標を落とす、あるいは零の座標を付ける役割もあります。

読み方：2～5 節で図・計算・証明、6 節で本文の問題、7～8 節で追加問題と解答を扱います。本ノートでは実数行列を扱い、ベクトルの長さはユークリッドノルムで測ります。

2 単位円の像は、楕円または退化した図形

2次元で、単位円上のベクトルを $\boldsymbol{x} = \cos t \boldsymbol{v}_1 + \sin t \boldsymbol{v}_2$ と書くと、

$$A\boldsymbol{x} = \sigma_1 \cos t \boldsymbol{u}_1 + \sigma_2 \sin t \boldsymbol{u}_2.$$

両特異値が正なら、これは $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2$ を軸とする楕円の式です。

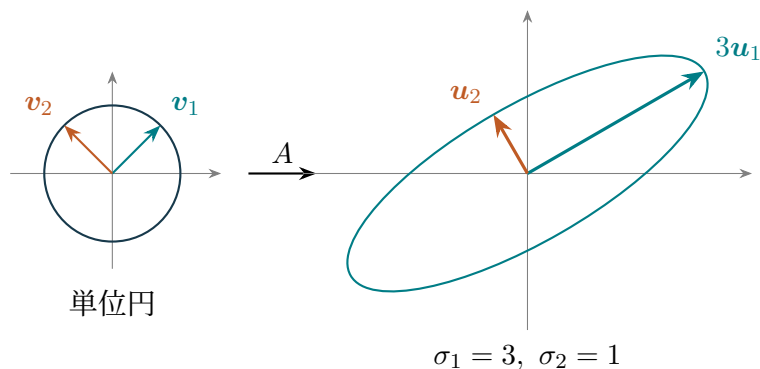


図 1：単位円から楕円へ。左右は同じ縮尺です。特異値が同じでも、 U が異なれば楕円の向きは変わります。

特異値は半軸長。軸全体の長さはその 2 倍

上の楕円の長半径は 3、短半径は 1 です。長軸全体は 6、短軸全体は 2 となります。本文の「主軸の長さ」は、原点から端点までの**半軸長**として読むと正確です。

零の特異値は、潰れる方向を表す

$\sigma_1 > 0, \sigma_2 = 0$ なら像は $-\sigma_1 \boldsymbol{u}_1$ と $\sigma_1 \boldsymbol{u}_1$ を結ぶ線分になります。両方 0 なら、単位円全体が原点に写ります。

最も大きく伸びる倍率が σ_1

2次元では、単位ベクトル $\boldsymbol{x} = c_1 \boldsymbol{v}_1 + c_2 \boldsymbol{v}_2$ に対し、

$$\|A\boldsymbol{x}\|^2 = \sigma_1^2 c_1^2 + \sigma_2^2 c_2^2 \leq \sigma_1^2, \quad c_1^2 + c_2^2 = 1.$$

$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{v}_1$ で等号になります。 $\sigma_1 > \sigma_2$ なら、最大を与える単位ベクトルは $\pm \boldsymbol{v}_1$ です。

3 特異値を計算する入口: $A^T A$

SVD の両辺を転置して掛け、 $U^T U = I$ を使うと

$$A^T A = V \Sigma^T U^T U \Sigma V^T = V (\Sigma^T \Sigma) V^T.$$

したがって、 $A^T A$ の固有値は**特異値の 2 乗**です。行列のサイズによっては、さらに零固有値が加わります。

なぜ固有値が非負なのか

任意の x に対して

$$x^T A^T A x = \|Ax\|^2 \geq 0.$$

$A^T A v = \lambda v$ 、 $\|v\| = 1$ なら、 $\lambda = \|Av\|^2 \geq 0$ 。よって平方根 $\sigma = \sqrt{\lambda}$ が取れます。

例: $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

$$A^T A = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}, \quad \det(A^T A - \lambda I) = (2 - \lambda)^2 - 4 = \lambda(\lambda - 4).$$

固有値は 4 と 0 なので、特異値は $\boxed{2, 0}$ です。対応する正規直交固有ベクトルは

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

正の特異値に対しては $u_1 = Av_1/2 = v_1$ と求まります。零特異値では 0 で割れないので、 u_2 は u_1 に直交する単位ベクトルとして補います。この例では $u_2 = v_2$ と選べます。

手計算の手順

(1) $A^T A$ を計算する。 (2) 固有値を求め、非負の平方根を取る。 (3) 固有ベクトルを正規直交化して V を作る。 (4) 正の特異値について $u_i = Av_i/\sigma_i$ とし、必要な基底を補う。最後に $U \Sigma V^T = A$ を確認します。

SVD が存在する理由の概略

実対称行列 $A^T A$ は、正規直交固有ベクトルをもつことが知られています。正の固有値について上の方法で u_i を定めると、

$$u_i^T u_j = \frac{v_i^T A^T A v_j}{\sigma_i \sigma_j} = \begin{cases} 1 & i = j, \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

となります。残りを正規直交基底に補うことで、 $Av_i = \sigma_i u_i$ を満たす分解が得られます。これは存在の説明であり、大規模な数値計算では専用の SVD アルゴリズムを使います。

4 固有値と特異値を混同しない

次の行列は、横方向を 3 倍してから 90 度回転する変換です。

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 3 & 0 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_U \underbrace{\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_\Sigma \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{V^\top}.$$

$A\mathbf{e}_1 = 3\mathbf{e}_2$ 、 $A\mathbf{e}_2 = -\mathbf{e}_1$ 。入力方向と出力方向が一致しない例です。

	固有値分解	特異値分解
対象	正方行列。対角化できない場合もある	すべての実行列。長方形も可
方向の関係	$A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$	$A\mathbf{v}_i = \sigma_i\mathbf{u}_i$
値	負や複素数になることもある	必ず非負の実数

この A の固有値は複素数 $\pm i\sqrt{3}$ ですが、 $A^\top A = \text{diag}(9, 1)$ なので、特異値は 3 と 1 です。複素数の計算を使わずに伸縮率を読めます。

負の符号は、直交行列が引き受ける

$D = \text{diag}(-3, 1)$ の特異値も 3 と 1 です。

$$D = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} I^\top.$$

負の符号は反射として U に入ります。特異値が負になることはありません。

特異値は決まるが、特異ベクトルは一意とは限らない

$(\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_i)$ の両方の符号を反転しても分解は同じです。同じ特異値が重なる場合、その部分空間内で基底を同時に取り替えることもできます。零特異値に対応する基底にも自由度があります。

面積倍率は読めるが、向きは特異値だけでは読めない

2 次正方行列では $|\det A| = \sigma_1\sigma_2$ です。しかし、行列式の符号は U, V の向きにも依存します。例えば $\text{diag}(3, 1)$ と $\text{diag}(-3, 1)$ は同じ特異値でも、前者は向きを保ち、後者は反転します。

5 階数と、少数の成分による近似

正の特異値の個数を r とすると、 A の階数は r です。 U, V は可逆なので、 $\text{rank } A = \text{rank } \Sigma$ だからです。

行列をランク 1 の成分の和に分ける

SVD は次の形にも書けます。

$$A = \sum_{i=1}^r \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top.$$

$\mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top$ は $m \times n$ 行列です。その作用は $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{u}_i (\mathbf{v}_i^\top \mathbf{x})$ 、すなわち入力方向 $\mathbf{v}_i$ の成分を取り出して、出力方向 $\mathbf{u}_i$ に送る操作です。

本文の全成分 1 の行列なら、

$$A = 2\mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^\top = 2 \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

1 つの成分だけで完全に表せます。 $\mathbf{v}_2$ 方向の情報は失われ、単位円の像は長さ 4 の線分です。

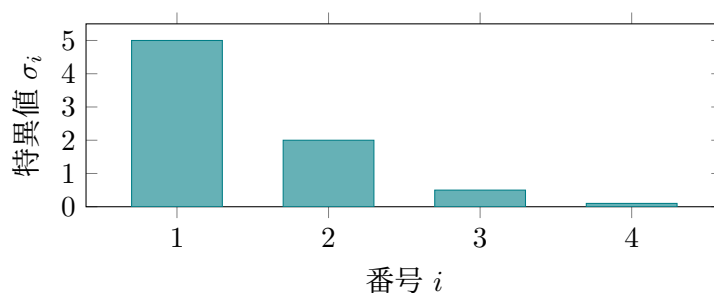
大きい特異値から k 個を残す

$$A_k = \sum_{i=1}^k \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top \quad (k \leq r)$$

は階数 k の近似です。フロベニウスノルムを $\|B\|_F^2 = \sum_{i,j} b_{ij}^2$ とすると、各成分の直交性から

$$\|A\|_F^2 = \sum_{i=1}^r \sigma_i^2, \quad \|A - A_k\|_F^2 = \sum_{i=k+1}^r \sigma_i^2.$$

例えば特異値が 5, 2, 0.5, 0.1 なら、上位 2 個が占める二乗和の割合は $29/29.26 \approx 99.1\%$ です。



「小さい特異値＝ノイズ」とは限らない

小さい成分を捨てると二乗誤差を小さく保てる場合がありますが、細い線や重要な細部も失われることがあります。画像の意味として重要かどうかは、特異値の大きさだけでは決まりません。

6 本文の練習問題を解く

問 1 : 行列サイズ・特異値・階数

A が 3×2 なので、完全な SVD のサイズは

$$\underbrace{A}_{3 \times 2} = \underbrace{U}_{3 \times 3} \underbrace{\Sigma}_{3 \times 2} \underbrace{V^{\top}}_{2 \times 2}.$$

$\Sigma = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ の特異値は $\boxed{4, 1}$ 、両方正なので階数は $\boxed{2}$ です。特異値の個数は $\min(3, 2) = 2$ で、

第 3 行の 0 を「第 3 の特異値」と数えるわけではありません。

この写像の入力は 2 次元、出力は 3 次元ですが、像は 2 次元の平面内にあります。入力方向は潰れず、単射ですが、 $\mathbb{R}^3$ 全体への全射ではありません。

問 2 : 入力方向と楕円の形

$\mathbf{v}_1 = (1, 1)^{\top} / \sqrt{2}$ 方向は $\boxed{5}$ 倍、 $\mathbf{v}_2 = (1, -1)^{\top} / \sqrt{2}$ 方向は $\boxed{2}$ 倍です。単位円は、半軸長 5 と 2 の楕円に写ります。長軸全体は 10、短軸全体は 4 です。

最も強く伸ばされる方向は $\mathbf{v}_1$ の張る直線、すなわち $y = x$ 方向です。逆向きの $-\mathbf{v}_1$ も同じ倍率で伸びます。

この設問の情報だけでは、楕円の向きは決まらない

与えられているのは V と特異値です。出力側の主軸は U の列であり、 U は指定されていません。よって楕円の半軸長はわかりますが、出力平面でどちらを向くか、行列 A 自体は一意に決まりません。

問 3 : SVD から行列を復元する

$V = I$ なので $V^{\top} = I$ 。したがって

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

特異値は中央の行列から $\boxed{3, 1}$ です。作用は $(x, y)^{\top} \mapsto (3x, y)^{\top} \mapsto (-y, 3x)^{\top}$ となります。

検算 : 列の長さだけで読めるのは、この例の性質

この行列の列は直交しているため、その長さ 3 と 1 が特異値になっています。一般の行列では列の長さがそのまま特異値になるわけではなく、 $A^{\top}A$ などから調べる必要があります。

7 追加の練習問題

特異値は大きい順に並べ、零特異値も必要な個数だけ含めなさい。

問 4 : 長方形のサイズ

$A \in \mathbb{R}^{2 \times 4}$ の完全な SVD で、 U, Σ, V のサイズを求めよ。特異値が 3 と 0 なら、階数と核の次元はそれぞれいくつか。

問 5 : 対角行列の符号

$D = \begin{pmatrix} -4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ の特異値を求め、SVD を 1 つ示せ。単位円の像の半軸長と、向きが保たれるかどうかも答えよ。

問 6 : $A^T A$ からの計算

$A = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ の特異値を求めよ。最大の伸縮倍率と、それを与える入力方向を答えよ。

問 7 : ランク 1 の行列

$B = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$ の特異値、階数、単位円の像を求めよ。像の線分全体の長さはいくらか。

問 8 : 方向と出力の計算

$\mathbf{v}_1 = (1, 1)^T / \sqrt{2}, \mathbf{v}_2 = (-1, 1)^T / \sqrt{2}, \mathbf{u}_1 = (1, 0)^T, \mathbf{u}_2 = (0, 1)^T, \sigma_1 = 3, \sigma_2 = 1$ とする。 $\mathbf{x} = 2\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ に対する $A\mathbf{x}$ と、その長さを求めよ。

問 9 : 特異値だけではわからないこと

$A = \text{diag}(3, 1), B = \text{diag}(-3, 1)$ の特異値と行列式を比較せよ。特異値だけから、面積倍率と向きの反転の有無の両方が決まるか。

問 10 : 打ち切りによる誤差

特異値が 6, 2, 1 の行列について、上位 1 個だけを残した近似 A_1 と上位 2 個を残した近似 A_2 のフロベニウス誤差を求めよ。上位 2 個の二乗和は、全体の何% か。

発展 : 問 11

$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ は零行列でないとする。SVD を使って、任意の単位ベクトル $\mathbf{x}$ に対し $\|A\mathbf{x}\| \leq \sigma_1$ を示せ。また、等号を満たす単位ベクトルを 1 つ挙げよ。

8 追加問題の解答と考え方

問 4

U は 2×2 、 Σ は 2×4 、 V は 4×4 。正の特異値は 1 個なので階数は 1。入力空間は 4 次元なので、核の次元は $4 - 1 = \boxed{3}$ です。

問 5

特異値は 4 と 2 で、例えば

$$D = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} I^\top.$$

楕円の半軸長は 4 と 2。 $\det D = -8$ なので、面積は 8 倍で向きは反転します。

問 6

$A^\top A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}$ の固有値は 4 と 1 なので、特異値は $\boxed{2, 1}$ 。最大倍率は 2、入力方向は e_2 (縦軸方向) です。実際、 $Ae_2 = 2e_1$ 。

問 7

$B^\top B = \begin{pmatrix} 8 & 8 \\ 8 & 8 \end{pmatrix}$ の固有値は 16 と 0 なので、特異値は 4 と 0、階数は 1 です。 $\mathbf{u} = (1, 1)^\top / \sqrt{2}$ とすれば、像は $-4\mathbf{u}$ と $4\mathbf{u}$ を結ぶ線分で、全体の長さは $\boxed{8}$ です。

問 8

線形性と $Av_i = \sigma_i \mathbf{u}_i$ を使い、

$$A\mathbf{x} = 2 \cdot 3\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2 = (6, -1)^\top, \quad \|A\mathbf{x}\| = \boxed{\sqrt{37}}.$$

問 9

両方の特異値は 3 と 1 ですが、 $\det A = 3$ 、 $\det B = -3$ です。面積倍率はどちらも 3 と決まりますが、向きの反転の有無は特異値だけでは決まりません。

問 10

$\|A - A_1\|_F = \sqrt{2^2 + 1^2} = \boxed{\sqrt{5}}$ 、 $\|A - A_2\|_F = \boxed{1}$ 。上位 2 個の二乗和の割合は $(36+4)/(36+4+1) = 40/41 \approx \boxed{97.6\%}$ です。

問 11

$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n c_i \mathbf{v}_i$ と書けば、 $\sum_i c_i^2 = 1$ 。階数を r とすると、

$$\|A\mathbf{x}\|^2 = \left\| \sum_{i=1}^r \sigma_i c_i \mathbf{u}_i \right\|^2 = \sum_{i=1}^r \sigma_i^2 c_i^2 \leq \sigma_1^2 \sum_{i=1}^n c_i^2 = \sigma_1^2.$$

平方根を取って結論を得ます。 $\mathbf{x} = \mathbf{v}_1$ なら $A\mathbf{x} = \sigma_1 \mathbf{u}_1$ なので等号が成り立ちます。