

『AI・データサイエンスのための数学入門』学習補助資料

少数の成分で、どこまで再現できるか

ランク 1 の和・近似誤差・画像圧縮・PCA

1 ランク 1 の成分を、実際に足してみる

列ベクトル $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ と $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ の外積 $\mathbf{u}\mathbf{v}^\top$ は、成分が $u_i v_j$ の $m \times n$ 行列です。両ベクトルが非零なら、どの列も $\mathbf{u}$ の定数倍なので階数は 1 です。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 5 \\ 6 & 8 & 10 \end{pmatrix}.$$

SVD では、このような単純な行列を、大きさ σ_i を付けて重ね合わせます。

例：2 つの成分でできた行列

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_1 = \mathbf{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \mathbf{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

特異値は 4 と 2 なので、

$$A = 4\mathbf{u}_1\mathbf{v}_1^\top + 2\mathbf{u}_2\mathbf{v}_2^\top = \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}}_{A_1} + \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}}_{A-A_1}.$$

第 1 項は全体に共通する成分、第 2 項は成分間の違いを表しています。ランク 1 近似では、後者を捨てます。

低ランク近似でも、行列の縦横のサイズは同じ

A も A_1 も 2×2 行列です。小さくなるのは階数であり、行数・列数ではありません。保存量を減らすには、再構成した行列全体ではなく、少数のベクトルと特異値を保存します。

打ち切り SVD の階数

正の特異値を大きい順に $\sigma_1, \dots, \sigma_r$ とすれば、

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

の階数は、正確な計算ではちょうど k です。本文の「 k 以下」は正しい記述ですが、この条件下では等号まで成り立ちます。

読み方：2 節で誤差、3 節で最良性の証明、4～5 節で画像と次元圧縮、6 節で本文の問題、7～8 節で追加問題と解答を扱います。

2 保持率と誤差は、同じ二乗和から計算する

行列を成分ごとに掛けて足す内積を $\langle B, C \rangle_F = \sum_{i,j} b_{ij}c_{ij}$ とします。SVD の成分には

$$\langle \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\top, \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^\top \rangle_F = (\mathbf{u}_i^\top \mathbf{u}_j)(\mathbf{v}_i^\top \mathbf{v}_j) = \begin{cases} 1 & i = j, \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

という直交性があります。したがって、ピタゴラスの定理と同様に

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

誤差そのものと、誤差の 2 乗を区別する

1 節の例では、捨てた特異値は 2 です。よって二乗誤差は 4、誤差は 2。実際、残差行列の成分からも $\sqrt{1+1+1+1} = 2$ です。

エネルギー保持率と相対誤差の関係

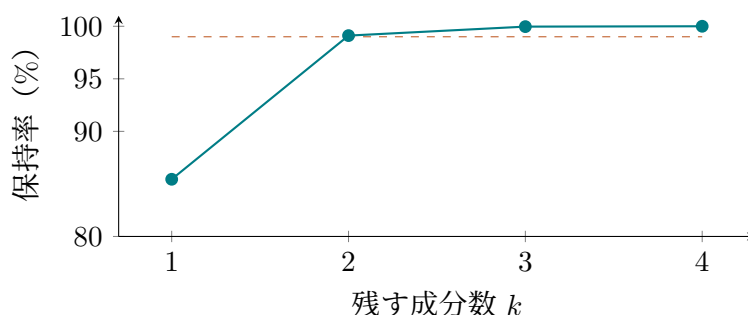
$A \neq 0$ とし、保持率を $\eta_k = \sum_{i \leq k} \sigma_i^2 / \sum_i \sigma_i^2$ とすると、

$$\frac{\|A - A_k\|_F}{\|A\|_F} = \sqrt{1 - \eta_k}.$$

例えば保持率 99% なら、相対フロベニウス誤差は 10% です。「保持率 99% だから、誤差は 1%」とはいえません。

本文の特異値 50, 20, 5, 1 の場合

全二乗和は 2926。上位 2 個を残せば、保持率 $2900/2926 \approx 99.11\%$ 、誤差 $\sqrt{26} \approx 5.10$ 、相対誤差 $\sqrt{26}/2926 \approx 9.43\%$ です。



図の破線は保持率 99% です。99% 以上を目標にするなら、この例では最小の k は 2 です。ただし、この率は**数値の二乗和の保持率**であり、画像の意味や見た目の重要度を直接測る割合ではありません。

3 なぜ打ち切り SVD が最良なのか【発展】

近似行列が表せる空間へ射影する

階数が高々 k の任意の近似行列を B とし、その列空間への直交射影行列を P とします。 $PB = B$ なので、

$$A - B = (I - P)A + (PA - B).$$

右辺の 2 項は各列で直交しています。よって

$$\|A - B\|_F^2 = \|(I - P)A\|_F^2 + \|PA - B\|_F^2 \geq \|(I - P)A\|_F^2.$$

つまり、選んだ列空間からはみ出す部分の誤差は、どのような B でも避けられません。

高々 k 次元で、取り込める二乗和の上限

$\lambda_i = \sigma_i^2$ ($i > r$ は 0)、 $w_i = \|P\mathbf{u}_i\|^2$ と置きます。 U の全 m 列を使うと

$$0 \leq w_i \leq 1, \quad \sum_{i=1}^m w_i = \text{rank } P \leq k, \quad \|PA\|_F^2 = \sum_{i=1}^m \lambda_i w_i.$$

重みの合計が高々 k 、1 項あたり高々 1 なので、二乗和を最大にするには大きい λ_i から重みを割り当てればよく、

$$\sum_i \lambda_i w_i \leq \lambda_1 + \cdots + \lambda_k.$$

厳密には $\lambda_i \leq \lambda_k$ ($i > k$) を使い、

$$\sum_i \lambda_i w_i \leq \sum_{i \leq k} \lambda_i w_i + \lambda_k \left(k - \sum_{i \leq k} w_i \right) \leq \sum_{i \leq k} \lambda_i$$

と確認できます。したがって

$$\|A - B\|_F^2 \geq \|A\|_F^2 - \|PA\|_F^2 \geq \sum_{i > k} \sigma_i^2.$$

打ち切り SVD は、この下限を達成する

2 節で $\|A - A_k\|_F^2 = \sum_{i > k} \sigma_i^2$ と示しました。よって、 A_k は階数が高々 k の行列の中で最良です。

最良でも、1 つに決まらない場合がある

例えば $A = I_2$ は特異値が 1 と 1 です。 $\text{diag}(1, 0)$ と $\text{diag}(0, 1)$ は、どちらも最良のランク 1 近似で、誤差は 1 です。切り捨てる境界で特異値が等しいと、最良近似が複数あり得ます。

この証明の「最良」は、元の行列に対するフロベニウス誤差を最小にするという意味です。真の信号への近さや、画像認識の正答率を最大にするという主張ではありません。

4 画像で確かめる、圧縮と細部の喪失

次の人工画像に SVD を適用し、同じ表示範囲でランク 1・5・15 の近似を比較します。小さい k でも大まかな濃淡は残りますが、円の境界や斜めの細線にはより多くの成分が必要です。

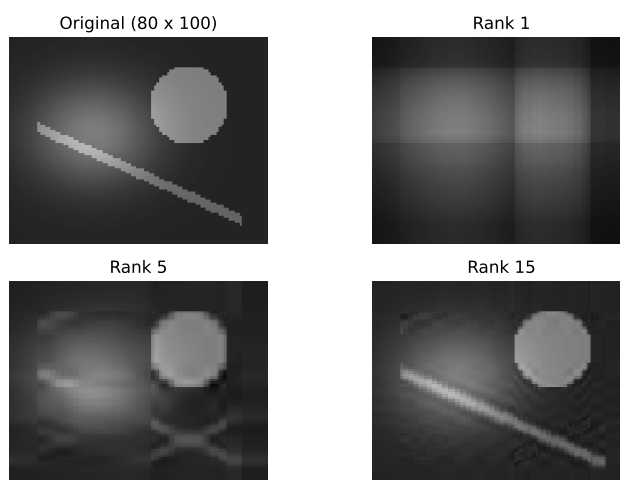


図 1：元画像は 80×100 。表示時のみ 0～255 へクリップしています。下表の保持率は、クリップ前の SVD 近似から計算したものです。

k	二乗和の保持率	保存する数	元の 8000 個に対する割合
1	91.01%	181	2.26%
5	97.76%	905	11.31%
15	99.47%	2715	33.94%

保存するのは、近似画像全体ではなく因子

U_k に Hk 個、 Σ_k の対角に k 個、 V_k に Wk 個、合計 $k(H + W + 1)$ 個を保存します。再構成した A_k を全成分保存すると、再び HW 個になります。

数の個数と、ファイルのバイト数は別

元画像を 1 画素 8 ビット、SVD の因子を 1 数 32 ビットで保存するなら、バイト数の比較は HW 対 $4k(H + W + 1)$ です。例えばランク 15 では $4 \cdot 2715 = 10860$ バイトで、元の 8000 バイトより多くなります。付加情報や圧縮形式も別に考える必要があります。

数値的な最良近似は、画素値の非負性や 0～255 の範囲を保証しません。表示用のクリッピング後には、階数が k 以下という性質も一般には保たれません。

5 低ランク近似と、低次元の座標

データ行列 $X \in \mathbb{R}^{N \times d}$ では、1 行を 1 観測、1 列を 1 変数とします。各列の平均を引いた中心化行列を X_c とし、その SVD を $X_c = U \Sigma V^\top$ とします。

圧縮した座標と、復元したデータは別の行列

$V_k = (v_1, \dots, v_k)$ を使うと、圧縮座標は

$$Z = X_c V_k = U_k \Sigma_k \quad (N \times k)$$

です。元の変数の空間へ戻すと、

$$\hat{X}_c = Z V_k^\top = X_c V_k V_k^\top \quad (N \times d).$$

Z は列数そのものが減ったデータ、 $\hat{X}_c$ は元のサイズの低ランク近似です。元の水準に戻すには、最後に各列の平均を加えます。

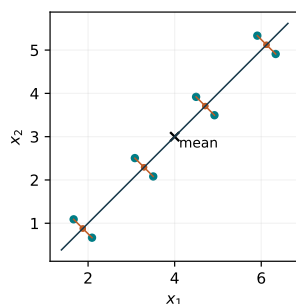


図 2：2 変数のデータ（青緑）を平均を通る直線へ射影（橙色）。直線上の位置を 1 個の座標で表せば、2 次元から 1 次元に圧縮できます。

PCA との関係

$N \geq 2$ のとき、標本共分散行列は

$$S = \frac{1}{N-1} X_c^\top X_c = V \frac{\Sigma^\top \Sigma}{N-1} V^\top.$$

したがって主成分方向は右特異ベクトル v_i 、対応する分散は $\sigma_i^2/(N-1)$ です。中心化したデータでは、二乗和の保持率が PCA の累積寄与率に一致します。

前処理と、残す次元数を目的に合わせる

未中心化の SVD では、大きい平均値が第 1 成分を支配することがあります。また、単位や尺度が異なる変数では、標準化の有無によって結果が変わります。保持率だけでなく、復元誤差、細部、後の解析の目的も確認して k を選びます。

小さい特異値を捨てるとノイズが減る場合がありますが、強いノイズが大きい成分に入ることもあります。SVD だけで信号とノイズを確実に分離できるわけではありません。

6 本文の練習問題を解く

問 1：低ランク近似と誤差

特異値は 6, 2, 1 です。ランク 1 近似では 6、ランク 2 近似では 6 と 2 を残します。

$$\|A - A_1\|_F^2 = 2^2 + 1^2 = \boxed{5}, \quad \|A - A_2\|_F^2 = 1^2 = \boxed{1}.$$

問題が尋ねているのは誤差の 2 乗です。ノルムそのものなら、それぞれ $\sqrt{5}$ と 1 になります。

問 2：保持率と採用するランク

全エネルギーは $6^2 + 2^2 + 1^2 = \boxed{41}$ です。

$$\eta_1 = \frac{36}{41} \approx \boxed{87.8\%}, \quad \eta_2 = \frac{40}{41} \approx \boxed{97.6\%}.$$

保持率を高くしたいならランク 2 の方がよい選択です。例えば 95% 以上が条件ならランク 2 が必要です。一方、保持率 85% で十分で、圧縮を優先するならランク 1 も選べます。目的や許容誤差がないまま、唯一の正解としてランクを決めることはできません。

問 3：保存数の比較

元画像は $100 \times 80 = \boxed{8000}$ 個の画素値です。ランク 5 の因子表現なら

$$5(100 + 80 + 1) = \boxed{905} \text{ 個}.$$

保存する数は $8000 - 905 = 7095$ 個少なくなります。元に対する割合と削減率は

$$\frac{905}{8000} = 11.3125\%, \quad 1 - \frac{905}{8000} = \boxed{88.6875\%}.$$

約 11.3% の個数、すなわち約 88.7% の削減です。約 8.84 分の 1 の個数で表せますが、これはファイルサイズの圧縮率ではありません。

小さい特異値を捨てると、なぜノイズが減ることがあるか

信号が少数の方向に集中し、ノイズが残りの小さい成分に多く含まれるなら、打ち切りによって主要な構造を残しつつ揺らぎを減らせます。ただし、細部も失われ得ます。

観測データへの誤差と、真の信号への誤差

観測行列を $A = S + E$ (信号 S 、ノイズ E) とすると、定理が最小化するのは $\|A - B\|_F$ です。 $\|S - B\|_F$ を最小化するとは限りません。ノイズ除去の良し悪しには、信号・ノイズに関する別の仮定や評価が必要です。

7 追加の練習問題

問 4：ランク 1 行列の計算

$u = (1, 2)^\top$ 、 $v = (3, -1)^\top$ とする。 $uv^\top$ を求め、階数が 1 である理由を述べよ。

問 5：誤差と保持率

特異値が 8, 3, 1 の行列について、ランク 1 近似とランク 2 近似の二乗誤差、誤差、保持率をそれぞれ求めよ。

問 6：目標保持率から k を決める

特異値が 4, 2, 1, 1 の行列について、保持率 90% 以上に必要な最小の k を求めよ。また、相対フロベニウス誤差を 10% 以下にしたい場合の最小の k を求めよ。

問 7：保存する数とバイト数

200×100 のグレースケール画像をランク 10 で表す。元の画素数と因子表現の数の個数を求めよ。さらに元は 8 ビット整数、因子は 32 ビット実数で、付加情報を無視するとき、バイト数の比を求めよ。

問 8：最良近似の非一意性

$A = \text{diag}(2, 2)$ とする。 $B_1 = \text{diag}(2, 0)$ と $B_2 = \text{diag}(0, 2)$ が、いずれも最良のランク 1 近似であることを誤差の計算から確認せよ。

問 9：圧縮座標と復元

中心化データ行列が $X_c = \begin{pmatrix} -2 & -2 \\ 0 & 0 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$ 、残す方向が $v_1 = (1, 1)^\top / \sqrt{2}$ である。 $Z = X_c v_1$ と復元行列 $Z v_1^\top$ を求めよ。

問 10：保持率の読み違い

「エネルギー保持率が 96% なので、相対フロベニウス誤差は 4% である」という説明を訂正せよ。また、相対誤差を 5% 以下にするには、保持率が何% 以上必要か。

発展：問 11

A_k がランク k でも、各成分を 0~255 へクリップした行列のランクは増えることがある。

$B = \begin{pmatrix} 100 & 200 \\ 200 & 400 \end{pmatrix}$ の階数を求め、クリップ後の階数と比較せよ。

8 追加問題の解答と考え方

問 4

$uv^\top = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 6 & -2 \end{pmatrix}$ 。第 2 行は第 1 行の 2 倍で、零行列ではないので階数は 1 です。

問 5

全二乗和は $64 + 9 + 1 = 74$ 。ランク 1 では二乗誤差 10、誤差 $\sqrt{10}$ 、保持率 $64/74 \approx 86.49\%$ 。ランク 2 では二乗誤差 1、誤差 1、保持率 $73/74 \approx 98.65\%$ です。

問 6

全二乗和は 22。 $k = 1$ の保持率は $16/22$ 、 $k = 2$ では $20/22 \approx 90.91\%$ なので、90% 以上には $k = 2$ が最小です。

相対誤差 10% 以下には保持率 99% 以上が必要です。 $k = 3$ でも $21/22 \approx 95.45\%$ にとどまるため、 $k = 4$ 、すなわち全成分が必要です。

問 7

元は 20000 個、因子表現は $10(200 + 100 + 1) = 3010$ 個です。バイト数は元が 20000、因子が $4 \cdot 3010 = 12040$ なので、比は $12040/20000 = 60.2\%$ 。個数の比 15.05% とは異なります。

問 8

両方の特異値が 2 なので、最小のランク 1 近似誤差は 2 です。実際、 $A - B_1 = \text{diag}(0, 2)$ 、 $A - B_2 = \text{diag}(2, 0)$ で、ともにフロベニウスノルムは 2。どちらも下限を達成します。

問 9

$$Z = \begin{pmatrix} -2\sqrt{2} \\ 0 \\ 2\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad Zv_1^\top = \begin{pmatrix} -2 & -2 \\ 0 & 0 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = X_c.$$

元データが既に 1 次元の方向だけに載っているので、1 個の座標で完全に表せます。

問 10

相対誤差は $\sqrt{1 - 0.96} = 20\%$ 。相対誤差 5% 以下なら $1 - \eta \leq 0.05^2$ 、すなわち保持率 99.75% 以上が必要です。

問 11

元の行列は第 2 行が第 1 行の 2 倍なので階数 1 です。クリップ後は

$$\tilde{B} = \begin{pmatrix} 100 & 200 \\ 200 & 255 \end{pmatrix}, \quad \det \tilde{B} = 25500 - 40000 = -14500 \neq 0.$$

よって階数は 2 になります。範囲制限は非線形な成分ごとの操作であり、低ランク性を保存するとは限りません。