特異値分解：Singular Value Decomposition

定理　**A**を、rankがRのMxN行列とする。このとき、以下の式を満たすMxMの直交行列**V**、NxNの直交行列**U**、および、MxNの対角行列**S**が存在する。

$$\mathbf{V}^T\mathbf{A}\mathbf{U} = \mathbf{S} \quad \text{または} \quad \mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{S}\mathbf{U}^T \qquad (1)$$

ただし、

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} v_{11} & \cdots & v_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{M1} & \cdots & v_{MM} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & \cdots & u_{NN} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{S} = \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \\ 0 & \cdots & \lambda_R & & \\ & & & 0 & \\ & & & & 0 \end{bmatrix}}_{N\text{列}} \left.\vphantom{\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}}\right\} M\text{行}$$

$\mathbf{A} = \mathbf{V}\mathbf{S}\mathbf{U}^T$ を、**A**の特異値分解Singular Value Decompositionとよぶ。

特異値分解の別の表現（個々のベクトルを用いた表現）

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} v_{11} & \cdots & v_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{M1} & \cdots & v_{MM} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \cdots & \mathbf{v}_M \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N1} & \cdots & u_{NN} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \cdots & \mathbf{u}_N \end{bmatrix}$$

として、特異値分解は次のようにも表現できる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{VSU}^T = \sum_{i=1}^{R} \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^{\ T} \qquad (2)$$

V,Sを求める

$$\mathbf{A} = \mathbf{VSU}^T = \sum_{i=1}^{R} \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^{\ T} \qquad (2)$$

Aを特異値分解で表現するための**U**、**V**、**S**は固有値問題を解くことにより求まる。すなわち、まず**V**については、**AA**^{T}を計算すると、

$$\mathbf{AA}^T = \mathbf{VSU}^T(\mathbf{VSU}^T)^T = \mathbf{VSU}^T\mathbf{US}^T\mathbf{V}^T = \mathbf{V}\underline{\mathbf{S}_M^2}\mathbf{V}^T \quad (3)$$

両辺に右からVを掛ければ、

$$\mathbf{AA}^T\mathbf{V} = \mathbf{VS}^2 \qquad (4)$$

式(1-7)を別の表現で書くと、

$$(\mathbf{AA}^T)\mathbf{v}_i = \lambda_i^2 \mathbf{v}_i \qquad (5)$$

ただし、

$$\mathbf{S}_M^2 \equiv \left.\overbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1^2 & \cdots & 0 & & \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \\ 0 & \cdots & \lambda_R^2 & & \\ & & & 0 & \\ & & & & 0 \end{bmatrix}}^{\text{M行}}\right\} \text{M行}$$

これは、**AA**^{T}の固有値（{λ_i}、固有ベクトル{**v**$_i$}を解くことに他ならない。

U, Sを求める

同様にして、**U**については、$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$を計算すると、

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A} = (\mathbf{VSU}^T)^T\mathbf{VSU}^T = \mathbf{US}_N^2\mathbf{U}^T \qquad (6)$$

両辺に右から**U**を掛ければ、

$$(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{U} = \mathbf{US}_N^2 \qquad (7)$$

別の表現で書くと、

$$(\mathbf{AA}^T)\mathbf{u}_i = \lambda_i^2\mathbf{u}_i \qquad (8)$$

これは、$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$の固有値（$\{\lambda_i\}$、固有ベクトル$\{\mathbf{u}_i\}$を解くことに他ならない。

u_i, v_i, λ_i 間の関係

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{R} \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^T \qquad (2)$$

両辺に右から$\mathbf{u}_k$, k=1,…,Rを掛ければ、 $\mathbf{u}_k$, k=1,…,Rの正規直交性より、

$$\mathbf{A}\mathbf{u}_k = \sum_{i=1}^{R} \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_k = \lambda_k \mathbf{v}_k \mathbf{u}_k^T \mathbf{u}_k = \lambda_k \mathbf{v}_k$$

すなわち

$$\mathbf{A}\mathbf{u}_k = \lambda_k \mathbf{v}_k \quad \text{または} \quad \mathbf{v}_k = \frac{1}{\lambda_k} \mathbf{A}\mathbf{u}_k \qquad (9)$$

上式により、$\mathbf{u}_k$, $\mathbf{v}_k$, $\boldsymbol{\lambda}_k$, k=1,…,Rが関係づけられる。
同様に、式(2)の両辺を転置した後に右から、 $\mathbf{v}_k$を掛ければ

$$\mathbf{A}^T \mathbf{v}_k = \lambda_k \mathbf{u}_k \quad \text{または} \quad \mathbf{u}_k = \frac{1}{\lambda_k} \mathbf{A}\mathbf{v}_k \qquad (10)$$

SVDの利用法１：主成分分析を効率よく計算

いま、画素数M=10,000の画像データを列ベクトルで表し、これがN=100枚分、100列のデータとしてAに入っているとする。
すなわち、Aは10,000x100の行列。
100枚の画像データの固有ベクトル（固有パターン）を算出する問題を考える。
この問題は、以下の式により固有ベクトルを求めることに相当する（実際には平均ベクトルを差し引く前処理は必要）

$$(\mathbf{A}\mathbf{A}^T)\mathbf{v}_i = \lambda_i^2 \mathbf{v}_i \qquad (5)$$

しかし$\mathbf{AA}^T$は10,000x10,000の行列であり、その固有値問題を解くことは困難。一方、

$$(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{u}_i = \lambda_i^2 \mathbf{u}_i \qquad (8)$$

は100x100の行列であり、その固有値問題を解くことは可能。
それができれば、前ページ式(9)に、得られた$\mathbf{u}_k$, $\boldsymbol{\lambda}_k$, k=1,…,Rを代入することで$\mathbf{v}_k$, k=1,…,Rが求まる。

SVDの利用法２：システムの伝達関数を評価

線形システムの行列による表現：たとえばCT再構成問題

$$\mathbf{g} = \mathbf{A}\mathbf{f} + \mathbf{n} \tag{12}$$

得られる画像

撮像システム

物体空間

ノイズ

$$\mathbf{g} = \mathbf{A}\mathbf{f} + \mathbf{n}$$

$$\begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{M1} & a_{M2} & \cdots & a_{MN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ \vdots \\ n_N \end{bmatrix}$$

物体空間と像空間、それぞれを張る基底

ここではM<Nの場合を考える

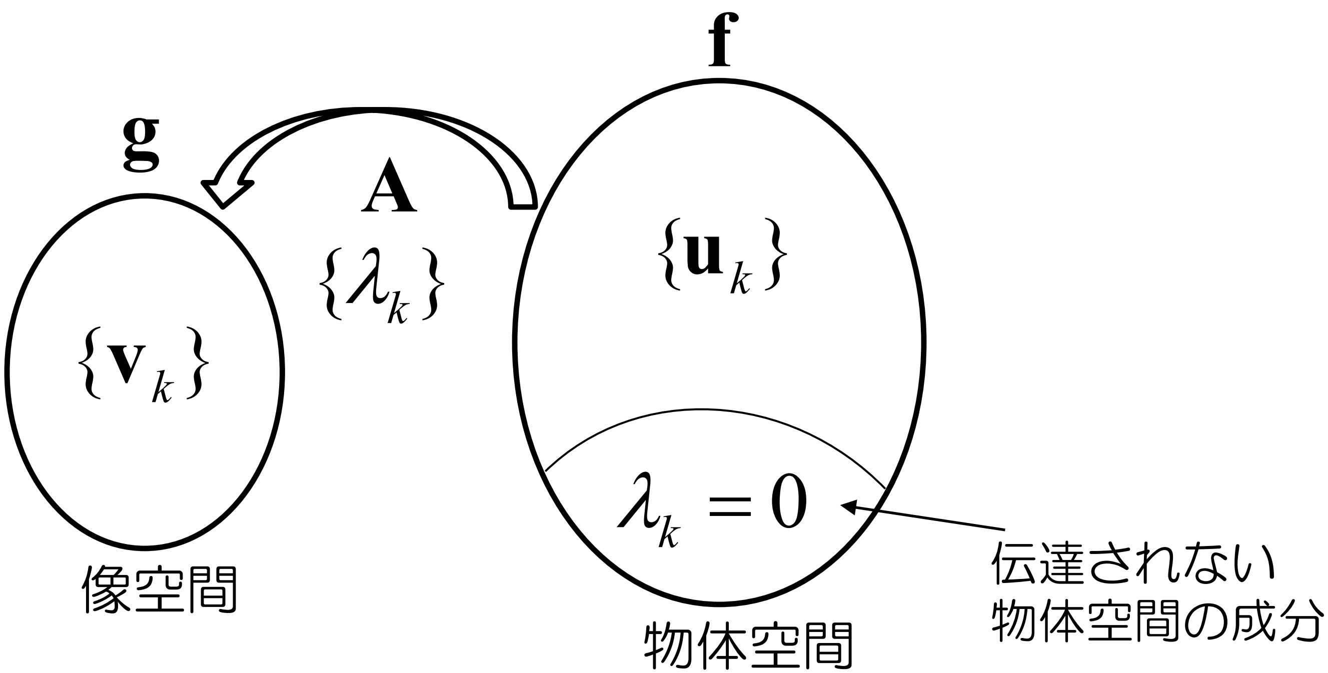
$$\underline{\mathbf{g}} = \mathbf{A}\underline{\mathbf{f}} + \mathbf{n} \qquad (12)$$

像空間　　物体空間

式(9)は $\lambda_k \underline{\mathbf{v}_k} = \mathbf{A}\underline{\mathbf{u}_k}$

$\mathbf{v}_k$, k=1,…,Rは像空間を張る基底ベクトルと考えられる。

$\mathbf{u}_k$, k=1,…,Rは物体空間を張る基底ベクトルと考えられる。



λはシステムの伝達関数

ここではM<Nの場合を考える

$$\mathbf{g} = \mathbf{A}\mathbf{f} + \mathbf{n} \qquad (12)$$

像空間　　物体空間

式(9)は $\lambda_k \mathbf{v}_k = \mathbf{A}\mathbf{u}_k$

$$\mathbf{f} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \mathbf{u}_i, \mathbf{g} = \sum_{i=1}^{M} \beta_i \mathbf{v}_i, \mathbf{n} = \sum_{i=1}^{M} \gamma_i \mathbf{v}_i$$

と展開すると、式(12)は

$$\sum_{i=1}^{M} \beta_i \mathbf{v}_i = \mathbf{A}\sum_{i=1}^{N} \alpha_i \mathbf{u}_i + \sum_{i=1}^{M} \gamma_i \mathbf{v}_i = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \alpha_i \mathbf{v}_i + \sum_{i=1}^{M} \gamma_i \mathbf{v}_i \qquad (13)$$

同じベクトルの項どうしを比較すると、式(13)は以下のようになる。

$$\beta_i = \lambda_i \alpha_i + \gamma_i$$

像側の成分　伝達特性　物体側の成分　ノイズ成分

こう考えればλはシステムの伝達関数を表していることがわかる、

問題の定式化ー線形方程式による記述ー

物体空間（吸収係数分布）と投影データとの関係を線形方程式で記述する。

$$\mathbf{g} = \mathbf{H}\mathbf{f} \iff \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{m1} & h_{m2} & \cdots & h_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} \tag{11}$$

１方向だけでなく、全方向の投影データを1列にしたもの。

システム行列

吸収係数分布を１列にしたもの

ある1方向の投影の模式図