# 第 A 章　補遺: 線形代数の復習

## 1　特異値分解

**定義 A.1** $n, p \geq \mathbb{N}, n \geq p$ とし, $V \subset \mathbb{R}^n$ をベクトル空間とする. $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p \in V$ とする.
(1) $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p$ はベクトル空間 $V$ の基底であるとは, 任意の $\boldsymbol{v} \in V$ に対して, 唯一の $a_1, a_2, \ldots, a_p \in \mathbb{R}$ があって,

$$\boldsymbol{v} = a_1\boldsymbol{v}_1 + a_2\boldsymbol{v}_2 + \cdots + a_p\boldsymbol{v}_p$$

とかけるときをいう. この $p$ をベクトル空間 $V$ の**次元**といい, $\dim(V)$ と書く.
(2) $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p$ は**線型独立** (1 次独立) であるとは,

$$a_1\boldsymbol{v}_1 + a_2\boldsymbol{v}_2 + \cdots + a_p\boldsymbol{v}_p = \boldsymbol{0}\,(a_1, a_2, \ldots, a_p \in \mathbb{R}) \Longrightarrow a_1 = a_2 = \cdots = a_p = 0$$

が成り立つときをいう. ただし, $\boldsymbol{0} = (0, 0, \ldots, 0)^\top \in \mathbb{R}^n$ である.

**定義 A.2** (1) $n, p \in \mathbb{N}, n \geq p$ とする. ベクトル $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_p \in \mathbb{R}^n$ で張られた $\mathbb{R}^n$ の部分空間 $\operatorname{span}\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_p\}$ を

$$\operatorname{span}\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_p\} = \left\{a_1\boldsymbol{x}_1 + a_2\boldsymbol{x}_2 + \cdots + a_p\boldsymbol{x}_p;\, a_1, a_2, \ldots, a_p \in \mathbb{R}\right\}$$

と定義する.
(2) $m, n \in \mathbb{N}$ とし, $\boldsymbol{A} \in \operatorname{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ とする. $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{A}^\top$ の像と核をそれぞれ

$$\begin{aligned}
\mathsf{R}\big(\boldsymbol{A}\big) &= \left\{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n\right\} \subset \mathbb{R}^m, \\
\ker\big(\boldsymbol{A}\big) &= \left\{\boldsymbol{x};\, \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \in \mathbb{R}^m\right\} \subset \mathbb{R}^n, \\
\mathsf{R}\big(\boldsymbol{A}^\top\big) &= \left\{\boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{y};\, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m\right\} \subset \mathbb{R}^n, \\
\ker\big(\boldsymbol{A}^\top\big) &= \left\{\boldsymbol{y};\, \boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0} \in \mathbb{R}^n\right\} \subset \mathbb{R}^m
\end{aligned}$$

で定める.

Bisgard
Analys
ear
Singula
Decom
Applica
の第 5
異値分
く. 行
の性質

**定義 A.3** $n \in \mathbb{N}$ とする. 行列式は関数 $\det : \mathrm{Mat}(n; \mathbb{R}) \longrightarrow \mathbb{R}$ で以下のように定義する.
(1) $1 \times 1$ の行列 $(a)$ の行列式を

$$\det(a) = a.$$

(2) $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$ とき, 行列

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \in \mathrm{Mat}(n; \mathbb{R})$$

の行列式を以下のように定める. $i, j = 1, 2, \ldots, n$ に対し $\boldsymbol{A}_{ij}$ を $\boldsymbol{A}$ から $i$ 行と $j$ 列をとった $(n-1) \times (n-1)$ 行列とする. $n \times n$ 行列 $\boldsymbol{A}$ の行列式を

$$\det(\boldsymbol{A}) = \sum_{k=1}^{n} (-1)^{k+1} a_{1k} \det(\boldsymbol{A}_{1k})$$

で定める.

**命題 A.4** $n \times n$ の行列 $\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n) \in \mathrm{Mat}(n; \mathbb{R})$ に対して, 行列式は以下の性質をみたす.

(1) $k = 1, 2, \ldots, n$ と $d \in \mathbb{R}$ に対し,

$$\det(\boldsymbol{a}_1, \ldots, \lambda \boldsymbol{a}_k, \ldots, \boldsymbol{a}_n) = \lambda \det(\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k, \ldots, \boldsymbol{a}_n).$$

(2) $j \neq k$ に対し,

$$\det(\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k + \lambda \boldsymbol{a}_j, \ldots, \boldsymbol{a}_n) = \lambda \det(\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k, \ldots, \boldsymbol{a}_n).$$

(3) $\det(\boldsymbol{I}_n) = 1$.
(4) $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathrm{Mat}(n; \mathbb{R})$ に対し

$$\det(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}) = \det(\boldsymbol{A}) \det(\boldsymbol{B}).$$

**定義 A.5** $\boldsymbol{A} \in \mathrm{Mat}(n; \mathbb{R})$ に対し，ある $\boldsymbol{B} \in \mathrm{Mat}(n; \mathbb{R})$ が存在し，

$$\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA} = \boldsymbol{I}_n$$

が成り立つとき，$\boldsymbol{A}$ は可逆であるといい，$\boldsymbol{B}$ を $\boldsymbol{A}$ の**逆行列**といい，これを $\boldsymbol{A}^{-1}$ と記す．

**命題 A.6** $\boldsymbol{A} \in \mathrm{Mat}(n; \mathbb{R})$ とする．このとき

$$\boldsymbol{A} \text{ は可逆} \iff \det(\boldsymbol{A}) \neq 0.$$

**定理 A.7** (特異値分解) $m, n \in \mathbb{N}$ とする．任意の $\boldsymbol{A} \in \mathrm{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ は次の分解をもつ．

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{UDV}^\top.$$

ただし $\boldsymbol{U} \in \mathrm{Mat}(m; \mathbb{R})$, $\boldsymbol{V} \in \mathrm{Mat}(n; \mathbb{R})$ は直交行列で，$\boldsymbol{D} \in \mathrm{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ は対角行列で，その対角成分は $d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_{\min(m,\, n)} \geq 0$ である．$d_j\,(j = 1, 2, \ldots, \min(m, n))$ を行列 $\boldsymbol{A}$ の**特異値**といい，$\{(d_j, \boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{v}_j); j = 1, 2, \ldots, \min(n, n)\}$ を**特異値系**[1]という．

**注意 A.8** $n \geq m$ のとき

$$\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_m & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

---

[1] $j = 1, 2, \ldots, \min(m, n)$ に対して

$$\boldsymbol{Av}_j = d_j \boldsymbol{u}_j$$

となっている．

である．$m \geq n$ のとき，

$$
\boldsymbol{D} = \begin{pmatrix}
d_1 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & d_2 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & d_n \\
0 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & & \vdots & \\
0 & 0 & \cdots & 0
\end{pmatrix}
$$

である． $\square$

**定理** A.7 **の証明** $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ に対し，

$$|\boldsymbol{y}|_2 = \sqrt{\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{y}}$$

とする．ただし，次元の異なる Euclid 空間のノルムも同じ記号を流用する．行列 $\boldsymbol{A}$ のノルム

$$\|\boldsymbol{A}\| := \sup_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \frac{\left|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\right|_2}{|\boldsymbol{x}|_2}$$

で定義すると

$$d_1 := \|\boldsymbol{A}\| := \sup_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n,\, |\boldsymbol{x}|_2 = 1} \left|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\right|_2$$

となる．$d_1 \neq 0$ と仮定する．そうでなければ，定理の証明は自明となる．あるベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ $(|\boldsymbol{x}|_2 = 1)$ が存在して

$$\left|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\right|_2 = d_1$$

をみたすとする．

$$\boldsymbol{y} = \frac{1}{d_1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$$

とおけば

$$|\boldsymbol{y}|_2^2 = \boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{y} = \frac{1}{d_1^2}\boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \frac{|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}|_2^2}{d_1^2} = 1$$

より $|\boldsymbol{y}|_2 = 1$ となる. $\boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3, \ldots, \boldsymbol{v}_n \in \mathbb{R}^n$ と $\boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3, \ldots, \boldsymbol{u}_m \in \mathbb{R}^m$ をうまく選んで, $\{\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ と $\{\boldsymbol{y}, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_m\}$ はそれぞれ $\mathbb{R}^n$ と $\mathbb{R}^m$ の正規直交基底となるようにする.

$$\boldsymbol{U}_1 = (\boldsymbol{y}, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_m) \in \mathrm{Mat}(m; \mathbb{R}), \quad \boldsymbol{V}_1 = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n) \in \mathrm{Mat}(n; \mathbb{R}),$$
$$\boldsymbol{A}_1 = \boldsymbol{U}_1^\top \boldsymbol{A} \boldsymbol{V}_1$$

とおけば,

$$\boldsymbol{A}_1 = \boldsymbol{U}_1^\top \boldsymbol{A} \boldsymbol{V}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}^\top \\ \boldsymbol{u}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_m^\top \end{bmatrix} \boldsymbol{A}[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n] = \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}^\top \\ \boldsymbol{u}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_m^\top \end{bmatrix} [\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_n]$$
$$= \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}^\top \\ \boldsymbol{u}_2^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_m^\top \end{bmatrix} [d_1\boldsymbol{y}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_n] = \begin{bmatrix} d_1\boldsymbol{y}^\top\boldsymbol{y} & \boldsymbol{y}^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \ldots & \boldsymbol{y}^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_n \\ 0 & \boldsymbol{u}_2^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \ldots & \boldsymbol{u}_2\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \boldsymbol{u}_m\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & & \ldots\boldsymbol{u}_m\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_n \end{bmatrix}$$
$$=: \begin{bmatrix} d_1 & \boldsymbol{w}^\top \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B} \end{bmatrix}$$

と書き直せる. ただし

$$\boldsymbol{w} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{y}^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 \\ \boldsymbol{y}^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_3 \\ \vdots \\ \boldsymbol{y}^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n-1},$$

$$\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_2^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{u}_2^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_3 & \ldots & \boldsymbol{u}_2^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_n \\ \boldsymbol{u}_3^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{u}_3^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}3 & \ldots & \boldsymbol{u}_3^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{u}_m^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{u}_m^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_3 & \ldots & \boldsymbol{u}_m^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_n \end{bmatrix} \in \mathrm{Mat}(m-1, n-1; \mathbb{R})$$

である. 上記の形に注意して計算すると

$$\boldsymbol{A}_1 \begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 & \boldsymbol{w}^\top \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1^2 + \boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{w} \\ \boldsymbol{B}\boldsymbol{w} \end{bmatrix}$$

となる．したがって

$$\left|\boldsymbol{A}_1\begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix}\right|_2^2 = \left|\begin{bmatrix} d_1^2+\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{w} \\ \boldsymbol{B}\boldsymbol{w} \end{bmatrix}\right|_2^2 = \{d_1^2+\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{w}\}^2+\boldsymbol{w}^\top\boldsymbol{B}^\top\boldsymbol{B}\boldsymbol{w} \geq \{d_1^2+|\boldsymbol{w}|_2^2\}^2$$

から

$$\left|\boldsymbol{A}_1\begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix}\right|_2 \geq d_1^2+|\boldsymbol{w}|_2^2, \quad \left|\frac{1}{\sqrt{d_1^2+|\boldsymbol{w}|_2}}\begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix}\right|_2 = 1$$

がわかる．よって

$$\|\boldsymbol{A}_1\| = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n,\,|\boldsymbol{x}|_2=1} \left|\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}\right|_2 \geq \frac{1}{\sqrt{d_1^2+|\boldsymbol{w}|_2^2}}\left|\boldsymbol{A}_1\begin{bmatrix} d_1 \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix}\right|_2 \geq \sqrt{d_1^2+|\boldsymbol{w}|_2^2}. \tag{A.1}$$

直交変換に関して $\|\cdot\|$ は不変[2]なので,

$$d_1 = \|\boldsymbol{A}\| = \|\boldsymbol{A}_1\|.$$

である．これと $(A.1)$ と合わせると

$$d_1 = \|\boldsymbol{A}\| = \|\boldsymbol{A}_1\| \geq \sqrt{d_1^2+|\boldsymbol{w}|_2^2} \geq d_1$$

となるので,

$$|\boldsymbol{w}|_2 = 0 \iff \boldsymbol{w} = \boldsymbol{0}.$$

よって

$$\boldsymbol{U}_1^\top\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{A}_1 = \begin{bmatrix} d_1 & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0}^\top & \boldsymbol{B} \end{bmatrix}$$

と書けることがわかった.

[2] $\forall\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ $(|\boldsymbol{x}|_2=1)$ に対して $|\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{x}|_2=1$ に注意すれば,

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{A}\| = \|\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{V}_1\| &= \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n;\,|\boldsymbol{x}|_2=1}|\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{x}|_2 = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n;\,|\boldsymbol{x}|_2=1}|\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}|_2 \\ &= \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n;\,|\boldsymbol{x}|_2=1}\sqrt{\boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{A}_1^\top\boldsymbol{U}_1^\top\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}} = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n;\,|\boldsymbol{x}|_2=1}\sqrt{\boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{A}_1^\top\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}} \\ &= \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n;\,|\boldsymbol{x}|_2=1}|\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}|_2 = \|\boldsymbol{A}_1\|\end{aligned}$$

からわかる.

次に, $d_2 = \|\boldsymbol{B}\|$ とおけば,

$$d_2 = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^{n-1};\,|\boldsymbol{x}|_2=1} |\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}|_2 = \sup_{\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^{n-1};\,|\boldsymbol{x}|_2=1} \left| \begin{bmatrix} d_1 & \boldsymbol{0}^\top \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{x} \end{bmatrix} \right|_2$$
$$\leq \sup_{\boldsymbol{z}\in\mathbb{R}^{n};\,|\boldsymbol{z}|_2=1} |\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{z}|_2 = \|\boldsymbol{A}_1\| = \|\boldsymbol{A}\| = d_1.$$

$d_2 = 0$ のとき, $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{0}$ より証明はおわり. $d_2 > 0$ と仮定して議論を進める. 前と同じようにすれば,

$$d_2 = \|\boldsymbol{B}\|$$

とおき,

$$|\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}|_2 = 1,\ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n-1}\ \mathrm{s.t.} |\boldsymbol{x}|_2 = 1,\ \boldsymbol{y} = \frac{1}{d_2}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{m-1}$$

と取り, さきほどの議論を繰り返すと $\widetilde{\boldsymbol{U}}_2 \in \mathrm{Mat}(m-1;\,\mathbb{R})$, $\widetilde{\boldsymbol{V}}_2 \in \mathrm{Mat}(n-1;\,\mathbb{R})$ で

$$\widetilde{\boldsymbol{U}}_2^\top \boldsymbol{B} \widetilde{\boldsymbol{V}}_2 = \begin{bmatrix} d_2 & \boldsymbol{0}^\top \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{C} \end{bmatrix},\ \boldsymbol{C} \in \mathrm{Mat}(m-2,\, n-2;\,\mathbb{R})$$

とできて,

$$\boldsymbol{U}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \boldsymbol{0}^\top \\ \boldsymbol{0} & \widetilde{\boldsymbol{U}}_2 \end{bmatrix},\ \boldsymbol{V}_2 = \begin{bmatrix} 1 & \boldsymbol{0}^\top \\ \boldsymbol{0} & \widetilde{\boldsymbol{V}}_2 \end{bmatrix}$$

とおけば, $\boldsymbol{U}_2$, $\boldsymbol{V}_2$ は直交行列で

$$\boldsymbol{U}_2^\top \boldsymbol{U}_1^\top \boldsymbol{A} \boldsymbol{V}_1 \boldsymbol{V}_2 = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 \\ 0 & 0 & \boldsymbol{C} \end{bmatrix}$$

となる. さらに $\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2 \in \mathrm{Mat}(m;\,\mathbb{R})$ と $\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{V}_2 \in \mathrm{Mat}(n;\,\mathbb{R})$ も直交行列であることに注意する.

以上の操作を繰り返せば, 定理は証明される. □

**定理 A.9** $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^\top$ と特異値分解されたとする. ただし, $p \leq \min(m,\, n)$ に対し

$$d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_p > d_{p+1} = d_{p+2} = \cdots = d_{\min(m,\,n)} = 0$$

とする.

$$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u}_1,\, \boldsymbol{u}_2,\, \ldots,\, \boldsymbol{u}_m),\ \boldsymbol{V} = (\boldsymbol{v}_1,\, \boldsymbol{v}_2,\, \ldots,\, \boldsymbol{v}_n)$$

としたとき,

$$\ker(\boldsymbol{A}) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{v}_{p+1},\, \boldsymbol{v}_{p+2},\, \ldots,\, \boldsymbol{v}_n\} = \mathsf{R}(\boldsymbol{A})^{\perp},$$
$$\ker(\boldsymbol{A}^\top) = \mathrm{span}\bigl\{\boldsymbol{u}_{p+1},\, \boldsymbol{u}_{p+2},\, \ldots,\, \boldsymbol{u}_m\bigr\} = \mathsf{R}\bigl(\boldsymbol{A}^\top\bigr)^{\perp}.$$

**証明**　$\boldsymbol{U}$ の直交性より

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}\,(\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n) \iff \boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^\top \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} d_1 \boldsymbol{v}_1^\top \boldsymbol{x} \\ d_2 \boldsymbol{v}_2^\top \boldsymbol{x} \\ \vdots \\ d_p \boldsymbol{v}_p^\top \boldsymbol{x} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{0}.$$

よって $\ker(\boldsymbol{A})$ の任意の元 $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{v}_1,\, \boldsymbol{v},\, \ldots,\, \boldsymbol{v}_p$ と直交するので,

$$\ker(\boldsymbol{A}) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{v}_{p+1},\, \boldsymbol{v}_{p+2},\, \ldots,\, \boldsymbol{v}_n\}.$$

さらに $\boldsymbol{A}^\top = \boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^\top \boldsymbol{U}^\top$ より

$$\ker\bigl(\boldsymbol{A}^\top\bigr) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{u}_{p+1},\, \boldsymbol{u}_{p+2},\, \ldots,\, \boldsymbol{u}_m\} = \mathsf{R}\bigl(\boldsymbol{A}\bigr)^{\perp}.$$

一方, $\forall \widetilde{\boldsymbol{x}} \in \mathsf{R}\bigl(\boldsymbol{A}^\top\bigr)$ とすれば, ある $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ があって, $\widetilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{y}$ とかける. このことより,

$$\boldsymbol{x} \in \ker\bigl(\boldsymbol{A}\bigr) \iff \boldsymbol{x}^\top \widetilde{\boldsymbol{x}} = \bigl(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\bigr)^\top \boldsymbol{y} = 0$$

より, $\boldsymbol{x}$ は $\mathsf{R}\bigl(\boldsymbol{A}^\top\bigr)$ と直交する. 同様に, $\forall \widetilde{\boldsymbol{y}} \in \mathsf{R}\bigl(\boldsymbol{A}\bigr)$ をとる. ある $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ があって, $\widetilde{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ とかける. このことより

$$\boldsymbol{y} \in \ker\bigl(\boldsymbol{A}^\top\bigr) \iff \boldsymbol{y}^\top \widetilde{\boldsymbol{y}} = \bigl(\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{y}\bigr)^\top \boldsymbol{x} = 0$$

より, $\boldsymbol{y}$ は $\mathsf{R}\bigl(\boldsymbol{A}\bigr)$ と直交することもわかる. □

**注意 A.10**

$$\boldsymbol{U}_1 = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_p], \boldsymbol{U}_2 = [\boldsymbol{u}_{p+1}, \boldsymbol{u}_{p+2}, \ldots, \boldsymbol{u}_m],$$
$$\boldsymbol{V}_1 = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_p], \boldsymbol{V}_2 = [\boldsymbol{v}_{p+1}, \boldsymbol{v}_{p+2}, \ldots, \boldsymbol{v}_n]$$

とおく．すなわち

$$\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{U}_2], \quad \boldsymbol{V} = [\boldsymbol{V}_1, \boldsymbol{V}_2]$$

である．このとき, $\mathbb{R}^n$ から $\ker\bigl(\boldsymbol{A}\bigr)$ への直交射影を $\boldsymbol{P}$, $\mathbb{R}^m$ から $\ker\bigl(\boldsymbol{A}^\top\bigr)$ への直交射影を $\boldsymbol{Q}$ とおくと

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{V}_2\boldsymbol{V}_2^\top, \quad \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{U}_2\boldsymbol{U}_2^\top$$

となる． □

## 2 Moore-Penrose の一般化逆行列

$\boldsymbol{A} \in \mathrm{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ で $\boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{0}$ とする．定理 $A.7$ から $1 \leq p \leq \min(m, n)$ があって

$$\boldsymbol{A} = \widetilde{\boldsymbol{U}}\widetilde{\boldsymbol{D}}\widetilde{\boldsymbol{V}}^\top,$$
$\widetilde{\boldsymbol{U}} \in \mathrm{Mat}(m; \mathbb{R})$, $\widetilde{\boldsymbol{V}} \in \mathrm{Mat}(n; \mathbb{R})$ は直交行列,
$\widetilde{\boldsymbol{D}} \in \mathrm{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ は対角行列 (非対角成分は 0) で
その正の対角成分は $d_1 \geq d_2 \geq \cdots \geq d_p > 0$

と書ける．ここで $\widetilde{\boldsymbol{U}}$, $\widetilde{\boldsymbol{D}}$, $\widetilde{\boldsymbol{V}}$ を分解し

$$\widetilde{\boldsymbol{U}} = [\boldsymbol{U}, \boldsymbol{U}^\perp], \boldsymbol{U} \in \mathrm{Mat}(m, p; \mathbb{R},$$
$$\widetilde{\boldsymbol{V}} = [\boldsymbol{V}, \boldsymbol{V}^\perp], \boldsymbol{V} \in \mathrm{Mat}(n, p; \mathbb{R}),$$
$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_p \end{bmatrix} \in \mathrm{Mat}(p; \mathbb{R})$$

とする．すると

$$\widetilde{\boldsymbol{U}}^\top \widetilde{\boldsymbol{U}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{U} & \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{U}^\perp \\ (\boldsymbol{U}^\perp)^\top \boldsymbol{U} & (\boldsymbol{U}^\perp)^\top \boldsymbol{U}^\perp \end{bmatrix} = \boldsymbol{I}_m,$$

$$\widetilde{\boldsymbol{V}}^\top \widetilde{\boldsymbol{V}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{V}^\top \boldsymbol{V} & \boldsymbol{V}^\top \boldsymbol{V}^\perp \\ (\boldsymbol{V}^\perp)^\top \boldsymbol{V} & (\boldsymbol{V}^\perp)^\top \boldsymbol{V}^\perp \end{bmatrix} = \boldsymbol{I}_n$$

から

$$\boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}_p,\ \boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{U}^\perp = \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{V}^\top \boldsymbol{V} = \boldsymbol{I}_p,\ \boldsymbol{V}^\top \boldsymbol{V}^\perp = \boldsymbol{0}$$

となる．よって

$$\boldsymbol{A} = \widetilde{\boldsymbol{U}} \widetilde{\boldsymbol{D}} \widetilde{\boldsymbol{V}}^\top = \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^\top \tag{A.2}$$

となる．ただし

$$\boldsymbol{U}^\top \boldsymbol{U} = \boldsymbol{V}^\top \boldsymbol{V} = \boldsymbol{I}_p,\ \boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_p \end{bmatrix}$$

となる．

$(A.2)$ を踏まえて，$\boldsymbol{A}^\dagger \in \mathrm{Mat}(n,\, m;\, \mathbb{R})$ を

$$\boldsymbol{A}^\dagger := \boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}^\top,\ \boldsymbol{D}^{-1} = \begin{bmatrix} d_1^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2^{-1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_p^{-1} \end{bmatrix} \tag{A.3}$$

と定める．$\boldsymbol{A}^\dagger$ を $\boldsymbol{A}$ の Moore-Penrose **の一般逆行列**と呼ぶことにする．

すると $\boldsymbol{A}^\dagger$ は下記の関係式をみたす $n \times m$ の行列となる．

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}, \tag{A.4}$$

$$\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger = \boldsymbol{A}^\dagger, \tag{A.5}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger = \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger\right)^\top, \tag{A.6}$$

$$\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A} = \left(\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A}\right)^\top \tag{A.7}$$

が成立する．上記 $(A.4)$ – $(A.7)$ は $(A.2)$ と $(A.3)$ よりわかる．実際

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A} &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^\top\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}^\top\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^\top = \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^\top = \boldsymbol{A},\\
\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger &= \boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}^\top\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^\top\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}^\top = \boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}^\top = \boldsymbol{A}^\dagger,\\
\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^\dagger\boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}^\dagger = \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^\top = \left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^\top\right)^\top = \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger\right)^\top,\\
\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A} &= \boldsymbol{V}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}^\top\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^\top = \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^\top = \left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^\top\right)^\top = \left(\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A}\right)^\top
\end{aligned}$$

からわかる．さらに

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{P} &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathrm{ran}(\boldsymbol{A} \subset \mathbb{R}^m,\\
\boldsymbol{Q} &= \boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A} : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathrm{ran}\left(\boldsymbol{A}^\top\right) \subset \mathbb{R}^n
\end{aligned}$$

は射影行列になっている．すなわち $\boldsymbol{P} \in \mathrm{Mat}(m;\mathbb{R})$ と $\boldsymbol{Q} \in \mathrm{Mat}(n;\mathbb{R})$

$$\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P},\ \boldsymbol{P}^\top = \boldsymbol{P},\ \boldsymbol{Q}^2 = \boldsymbol{Q},\ \boldsymbol{Q}^\top = \boldsymbol{Q}$$

をみたしている．

最後に $\boldsymbol{A}^\dagger$ の一意性を示す．$\boldsymbol{B}^\dagger$ も $\boldsymbol{A}$ の Moore-Penrose の一般逆行列とする．すると $\boldsymbol{A}^\dagger$ を $\boldsymbol{B}$ と替えた

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}, \tag{A.8}$$

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}, \tag{A.9}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} = \left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\right)^\top, \tag{A.10}$$

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{A} = \left(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\right)^\top \tag{A.11}$$

も成立する．すると

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{A}^{\dagger} &= \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger} && (\because (A.4)) \\
&= \boldsymbol{A}^{\dagger}\big(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\big)\boldsymbol{A}^{\dagger} && (\because (A.8)) \\
&= \boldsymbol{A}^{\dagger}\big(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\big)^{\top}\big(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\big)^{\top} && (\because (A.6) \text{ と } (A.10)) \\
&= \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{B}^{\top}\big(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\big)^{\top} \\
&= \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{B}^{\top}\boldsymbol{A}^{\top} && (\because (A.4)) \\
&= \boldsymbol{A}^{\dagger}\big(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\big)^{\top} \\
&= \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} && (\because (A.10)) \\
&= \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} && (\because (A.8) \\
&= \big(\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\big)^{\top}\big(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\big)^{\top}\boldsymbol{B} && (\because (A.7 \text{ と } (A.11)) \\
&= \big(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\big)^{\top}\boldsymbol{B}^{\top}\boldsymbol{B} \\
&= \boldsymbol{A}^{\top}\boldsymbol{B}^{\top}\boldsymbol{B} && (\because (A.4)) \\
&= \big(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\big)^{\top}\boldsymbol{B} \\
&= \boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} && (\because (A.11)) \\
&= \boldsymbol{B} && (\because (A.8))
\end{aligned}
$$

からわかる．よって一意性を証明できた．

**注意 A.11** 多くの本では，$\boldsymbol{A} \in \mathrm{Mat}(m, n; \mathbb{R})$ に対して $(A.4) - (A.7)$ をみたす $n \times m$ の行列 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ を $\boldsymbol{A}$ の Moore-Penrose の一般逆行列と定義している．□