第A章　補遺: 線形代数の復習

Bisgard (2021): Analysis and Linear Algebra: The Singular Value Decomposition and Application, AMS の第 5 章に従い特異値分解の証明を書く. 行列式やランクの性質もまとめる.

A.1　特異値分解

定義 A.1. $n, p \in \mathbb{N}, n \geq p$ 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 $\mathrm{span}\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_p\}$ を

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

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

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

で定める.

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) 1×1 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

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

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.

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

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

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

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. □

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

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

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

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j = d_j \boldsymbol{u}_j$$

となっている.

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,

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

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

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

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,

$$|\boldsymbol{w}|_2 = 0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{w} = \mathbf{0}.$$

よって

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

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,

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

$d_2 = 0$ 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, $p \le \min(m,\,n)$ に対し

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

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,

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

Proof. $\boldsymbol{U}$ の直交性より

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

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,

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

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

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

一方, $\forall \widetilde{\boldsymbol{x}} \in \mathsf{R}\big(\boldsymbol{A}^\top\big)$ 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,

$$\boldsymbol{x} \in \ker\big(\boldsymbol{A}\big) \Longleftrightarrow \boldsymbol{x}^\top \widetilde{\boldsymbol{x}} = \big(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\big)^\top \boldsymbol{y} = 0$$

より, $\boldsymbol{x}$ は $\mathsf{R}\big(\boldsymbol{A}^\top\big)$ と直交する. 同様に, $\forall \widetilde{\boldsymbol{y}} \in \mathsf{R}\big(\boldsymbol{A}\big)$ 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

$$\boldsymbol{y} \in \ker\big(\boldsymbol{A}^\top\big) \Longleftrightarrow \boldsymbol{y}^\top \widetilde{\boldsymbol{y}} = \big(\boldsymbol{A}^\top \boldsymbol{y}\big)^\top \boldsymbol{x} = 0$$

より, $\boldsymbol{y}$ は $\mathsf{R}\big(\boldsymbol{A}\big)$ 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 $\ker\big(\boldsymbol{A}\big)$ への直交射影を $\boldsymbol{P}$, $\mathbb{R}^m$ から $\ker\big(\boldsymbol{A}^\top\big)$ 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. □

A.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

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

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

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

とする．すると

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

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.

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

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

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

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

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

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

からわかる. さらに

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

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

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

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

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

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

も成立する. すると

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

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. □