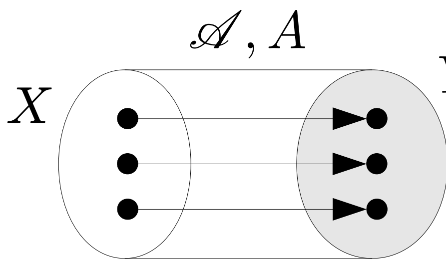
8. 逆行列

線形全単射

$\mathscr{A}$: 線形全単射,　A: $\mathscr{A}$ の行列表現

A は正方行列



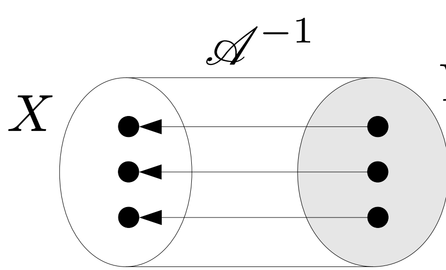
$Y=\mathscr{A}(X)=\mathscr{R}(A)$

$\forall \boldsymbol{x} \in X$ に対して, $\boldsymbol{y}{=}A\boldsymbol{x}$満たす$\boldsymbol{y} \in Y$ がただ一つ存在する

$\forall \boldsymbol{y} \in Y$ に対して, $\boldsymbol{y}{=}A\boldsymbol{x}$ を満たす$\boldsymbol{x} \in X$ がただ一つ存在する

$$\Downarrow$$

$\boldsymbol{y}$ を $\boldsymbol{x}$ に戻す逆写像$\mathscr{A}^{-1}$が存在する



$Y=\mathscr{A}(X)=\mathscr{R}(A)$

8. 逆行列

$\mathscr{A}^{-1}$:線形全単射 $\mathscr{A}$ の逆写像とする

$\mathscr{A}^{-1}$ の行列表現 A^{-1} ？

$\forall \boldsymbol{x} \in X$ に対して以下が成り立つ

$\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$

$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{y}$ （まだ A^{-1} がどんなものであるか不明であることに注意）

$\Downarrow$

$\boldsymbol{x} = A^{-1}(A\boldsymbol{x}) = A^{-1}A\boldsymbol{x}$

$\Downarrow$

$A^{-1}A = I$ （A^{-1} は A の逆行列）

$\mathscr{A}$ が全単射のとき，その逆写像 $\mathscr{A}^{-1}$ が存在する

$\Updownarrow$

$\underbrace{A \text{ が最大階数}}_{\det A \neq 0}$ のとき，その逆行列 A^{-1} が存在する

8. 逆行列

行列 対 スカラー

x, y : スカラー，　a : スカラー

y の値が与えられたとき，$y{=}ax$ を満たす x は次で与えられる

$$x = \frac{1}{a}y = a^{-1}y,$$

ただし $a \neq 0$ でなければならない

$\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$: ベクトル，　A : 行列

$\boldsymbol{y}$ の値が与えられたとき，$\boldsymbol{y}{=}A\boldsymbol{x}$ を満たす $\boldsymbol{x}$ は次で与えられる

$$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{y}$$

ただし $\det A \neq 0$ でなければならない

8. 逆行列

行列 対 スカラー

スカラー a は 1×1 行列とみなすことができ，その階数は次のように定められる

$$\operatorname{rank} a (\leq 1) = \begin{cases} 1 & a \neq 0 \text{, } a \text{ の逆数が存在する. 与えられた } y \text{ に対して } y{=}ax \text{ を満たす } x \text{ を定めることができる} \\ 0 & a{=}0\text{, } a \text{ の逆数は存在しない 与えられた } y \text{ に対して } y{=}ax \text{ を満たす } x \text{ を定めることができない} \end{cases}$$

$n \times n$ 行列 A の階数

$$\operatorname{rank} A (\leq n) = \begin{cases} n \\ n-1 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \end{cases}$$

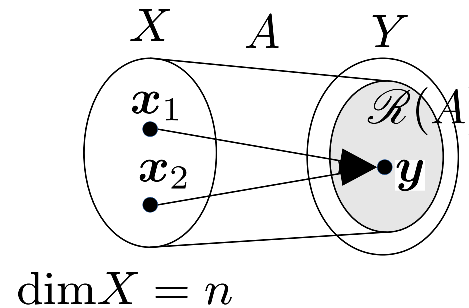
n：$\det A \neq 0$, A の逆行列が存在する.
与えられた $\boldsymbol{y}$ に対して $\boldsymbol{y}{=}A\boldsymbol{x}$ を満たす $\boldsymbol{x}$ を定めることができる

$n-1, \ldots, 1, 0$：$\det A = 0$, A の逆行列が存在しない.
与えられた $\boldsymbol{y}$ に対して $\boldsymbol{y}{=}A\boldsymbol{x}$ を満たす $\boldsymbol{x}$ を定めることができない

rank A が 0, 1, ..., n–1のとき，どのような違いがあるか？

8. 逆行列

$\mathrm{rank}\, A = r \leq n-1$ のときはどうなっている？



この場合，写像 $\mathscr{A}$ は単射ではない

与えられた $\boldsymbol{y} \in \mathscr{R}(A)$ に対して $\boldsymbol{y}{=}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ を満たす複数の $\boldsymbol{x}$ が存在する．
$\boldsymbol{x}$ を一意に定めることはできない．

もう少し詳しく言うと，$\boldsymbol{x}$ の一部は一意に定めることができるが，残りについては自由度がある

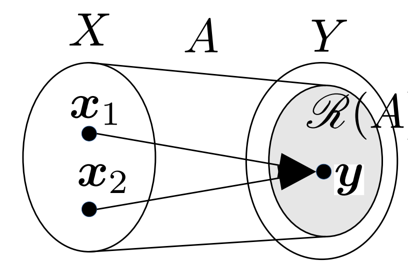
では，$\boldsymbol{x}$ のうちのどの程度までを一意に定めることができるだろうか？

8. 逆行列

では，$\boldsymbol{x}$ のうちのどの程度までを一意に定めることができるだろうか？

唯一に定めることができない部分は，右図では，
$\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2$ であり，これは$\mathscr{N}(A)$に属している

つまり，$\boldsymbol{x}$ のうち A の零空間に属している部分
は一意に定めることができない



$\mathrm{dim}X = n$

$\boldsymbol{y}$=$A\boldsymbol{x}$ を満たす $\boldsymbol{x}$ を一つ見つけたとし，それを $\bar{\boldsymbol{x}}$ と表すことにする.
すなわち $\boldsymbol{y} = A\bar{\boldsymbol{x}}$ がなりたつとする.

$\forall \boldsymbol{x}_0 \in \mathscr{N}(A)$ に対して $\boldsymbol{x}' = \bar{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{x}_0$ と定義すると, $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}'$ も成り立つ

$$\because A\boldsymbol{x}' = A(\bar{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{x}_0) = A\bar{\boldsymbol{x}} + A\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{y} + \boldsymbol{0} = \boldsymbol{y}$$

$$\underbrace{\mathrm{dim}\mathscr{N}(A)}_{\text{$\boldsymbol{y}$ からは一意に定めることができない部分}} + \underbrace{\mathrm{dim}\mathscr{R}(A)}_{\text{$\boldsymbol{y}$ から一意に定めることができる部分}} = n = \mathrm{dim}X$$

8. 逆行列

例：線形微分方程式

$$\frac{dx}{dt}+x=y$$

$x(t)$ から $y(t)$ への写像を$\mathscr{A}$ とすると，これは線形写像．$\mathscr{A}=\left(\frac{d}{dt}+1\right)$，$\mathscr{A}x=y$

$$\left(\begin{aligned}\mathscr{A}(ax_1+bx_2)&=\frac{d}{dt}(ax_1+bx_2)+(ax_1+bx_2)=\frac{d}{dt}(ax_1)+\frac{d}{dt}(bx_2)+ax_1+bx_2\\&=a\frac{dx_1}{dt}+b\frac{dx_2}{dt}+ax_1+bx_2=a\left(\frac{dx_1}{dt}+x_1\right)+\left(\frac{dx_2}{dt}+x_2\right)=a\mathscr{A}x_1+b\mathscr{A}x_2\end{aligned}\right)$$

$\frac{dx}{dt}+x=y$ の一般解

$\frac{dx}{dt}+x=y$ を満たすある解 と $\frac{dx}{dt}+x=0$ の一般解 の和

（特殊解，特解）

$y=\mathscr{A}x$を満たすある x
（ $\bar{x}$に相当する）

$\mathscr{A}x=0$ を満たすある x
（$\mathscr{N}(\mathscr{A})$に属する）

8. 逆行列

例

$$\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\\ 6\end{bmatrix}$$

$$A \qquad \boldsymbol{x} \qquad \boldsymbol{y}$$

$$n=2,\ r=\operatorname{rank}A=1<2,\ n-r=1$$

$$\left(-2\cdot\begin{bmatrix}1\\ 2\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}2\\ 4\end{bmatrix}=\mathbf{0},\ 0\cdot\begin{bmatrix}1\\ 2\end{bmatrix}=\mathbf{0},\ \det\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 4\end{bmatrix}=1\cdot 4-2\cdot 2=0,\ \det\begin{bmatrix}1\end{bmatrix}=1\right)$$

$\bar{\boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$ は$A\bar{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{y}$ を満たす

$x_1+2x_2=0$ が満たされるとき$A\boldsymbol{x}=\mathbf{0}$ がなりたつ

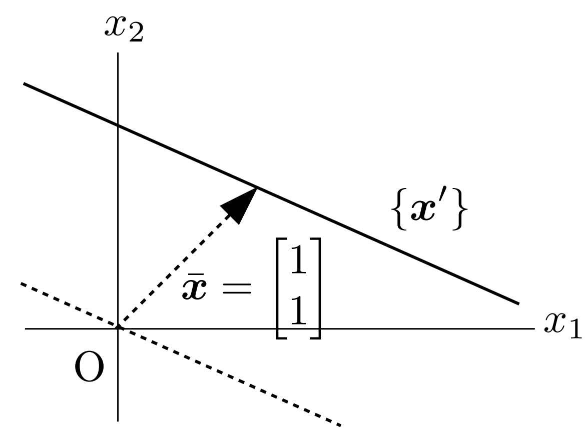
したがって$\forall\boldsymbol{x}_0\in\mathcal{N}(A)$ は $\boldsymbol{x}_0=\begin{bmatrix}-2\alpha\\ \alpha\end{bmatrix}$ と表される

ここで α は任意の実数である

$\boldsymbol{x}'=\bar{\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{x}_0=\begin{bmatrix}1-2\alpha\\ 1+\alpha\end{bmatrix}$ と定義すると,

$$A\boldsymbol{x}'=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1-2\alpha\\ 1+\alpha\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}(1-2\alpha)+2(1+\alpha)\\ 2(1-2\alpha)+4(1+\alpha)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\\ 6\end{bmatrix}=\boldsymbol{y}.$$



$\mathcal{N}(A)=\{\boldsymbol{x}_n\}\ :\ x_1+2x_2=0$

次元は n−r=1

8. 逆行列

$n \times n$ 行列 A が最大階数を持たない$(\mathrm{rank}\ A{<}n)$とき，与えられた $\boldsymbol{y}$ に対して $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$ を満たす $\boldsymbol{x}$ を一意に定めることはできない(無限個の $\boldsymbol{x}$ が存在する)

どうすれば一意に定めることができるだろうか？

線形微分方程式 $\dfrac{dx}{dt} + x = y$ では，解を一意に定めるために初期条件を与える.

$\boldsymbol{y}$ の値以外の条件を与えることにしてみよう

8. 逆行列

例

$\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$ に加えて，別の条件として，$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} {x_i}^2}$ を最小にする，

という条件を付加してみよう.

90ページの例では

$$\|\boldsymbol{x}'\| = \left\| \begin{bmatrix} 1-2\alpha \\ 1+\alpha \end{bmatrix} \right\| = \sqrt{(1-2\alpha)^2 + (1+\alpha)^2} = \sqrt{5\alpha^2 - 2\alpha + 2} = \sqrt{5\left(\alpha - \frac{1}{5}\right)^2 + \frac{9}{5}}$$

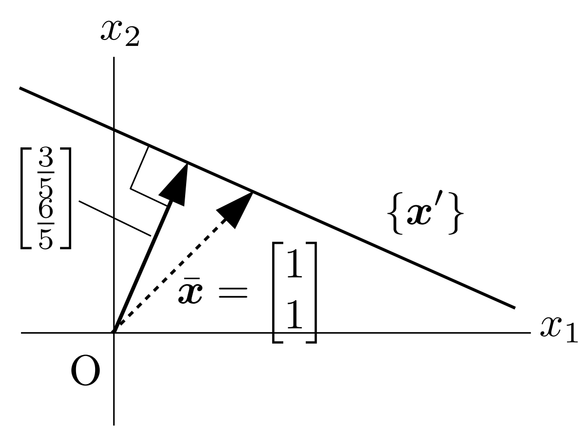
であった. これは

$$\alpha = \frac{1}{5}$$

のとき最小値をとり，$\boldsymbol{x}'$ の値を

$$\boldsymbol{x}' = \begin{bmatrix} \frac{3}{5} \\ \frac{6}{5} \end{bmatrix}$$

と一意に定めることができる.



8. 逆行列

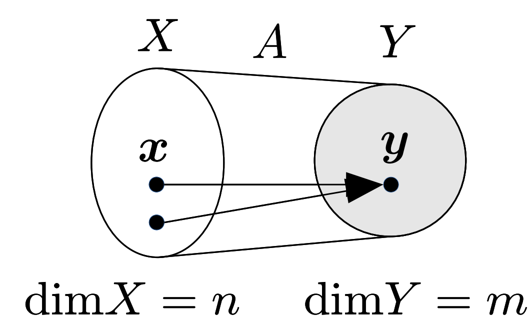
行列 A が正方行列ではないとき，逆行列に近いものを定義することができるであろうか？

非正方行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \neq n$ を考えてみよう.

8. 逆行列

A が最大行階数をもつと仮定しよう．すなわち $\mathrm{rank} A = m < n$.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{mn} & \cdots & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$



この行列で表現される写像は全射ではあるが単射ではない．

与えられた任意の $\boldsymbol{y} \in Y$ に対して，$\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$ となる $\boldsymbol{x}$ は無限個存在する．

$\boldsymbol{x}$ を一意に定めるには，91，92ページの議論と全く同様に，付加的な条件が必要である．

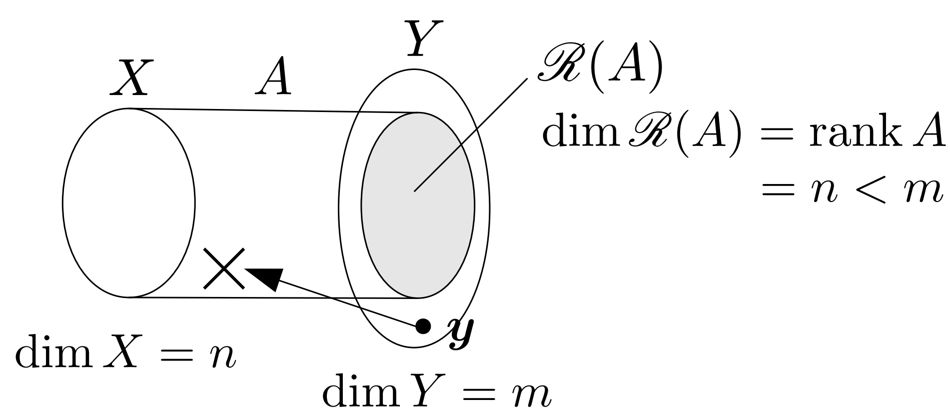
8. 逆行列

- A が最大列階数をもつと仮定しよう. すなわち $\mathrm{rank} A = n < m$.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ a_{mn} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

A は行最大階数をもたないので, A で表現される写像は全射ではない

したがって, Y には属しているが $\mathscr{R}(A)$ には属していない $\boldsymbol{y}$ に対して, $\boldsymbol{y}=A\boldsymbol{x}$ を満たす $\boldsymbol{x}$ は存在しない.



では, どのようなものならば存在するだろうか？

8. 逆行列

- A が列最大階数を持つとして, $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$ の関係からスタートしよう

$$\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$$

両辺に左から A^T を掛けると次が得られる

$$A^T\boldsymbol{y} = A^T A\boldsymbol{x}$$

A が最大列階数を持つとき, $A^T A$ の逆行列が存在するので,
（一般に $\mathrm{rank}A = \mathrm{rank}A^T A = \mathrm{rank}AA^T$ ）

$$(A^T A)^{-1}A^T\boldsymbol{y} = (A^T A)^{-1}A^T A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$$

行列 $A^\dagger = (A^T A)^{-1}A^T$ は逆行列と似た性質を持っている:

$$A^\dagger A = (A^T A)^{-1}A^T A = I,$$

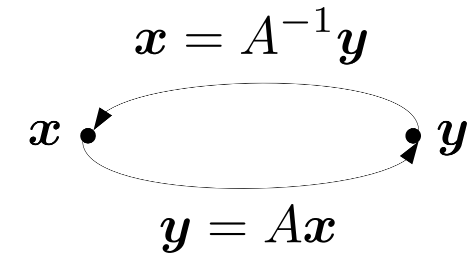
しかし

$$AA^\dagger = A(A^T A)^{-1}A^T \neq I.$$

$A^\dagger$ は A の疑似逆行列と呼ばれる

8. 逆行列

- 疑似逆行列



A は逆行列 A^{-1} を持つとしよう
$\boldsymbol{x}$ を $\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{y}$ によって定義すると，次がなりたつ

$$A\boldsymbol{x} = A(A^{-1}\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{y}.$$

A は逆行列 A^{-1} は持たないが疑似逆行列 $A^{\dagger}$ は持つとしよう

$\hat{\boldsymbol{x}}$ を $\hat{\boldsymbol{x}} = A^{\dagger}\boldsymbol{y} = (A^T A)^{-1}A^T\boldsymbol{y}$ によって定義する．このとき

$$\hat{\boldsymbol{y}} = A\hat{\boldsymbol{x}} = A(A^T A)^{-1}A^T\boldsymbol{y}$$

は $\boldsymbol{y}$ と等しいだろうか？　もし等しくないとすると，$\hat{\boldsymbol{y}}$ と $\boldsymbol{y}$ の違いは何だろうか

答え：

$$\hat{\boldsymbol{y}} \neq \boldsymbol{y},$$

であり，$\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}$ は $\hat{\boldsymbol{y}}$ と直交している

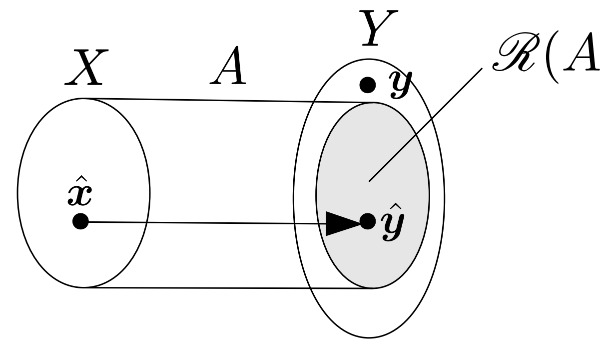
8. 逆行列

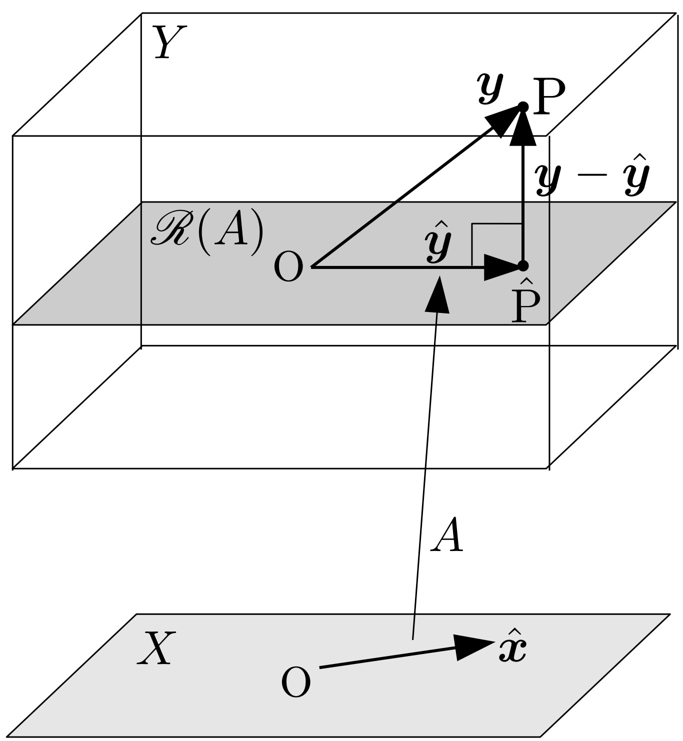
$\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}}$と$\hat{\boldsymbol{y}}$ の内積

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{y}-\hat{\boldsymbol{y}})^T\hat{\boldsymbol{y}} &= \left[\boldsymbol{y}-\{A(A^TA)^{-1}A^T\boldsymbol{y}\}\right]^T\{A(A^TA)^{-1}A^T\boldsymbol{y}\} \\
&= \left[\{I-A(A^TA)^{-1}A^T\}\boldsymbol{y}\right]^T A(A^TA)^{-1}A^T\boldsymbol{y} \\
&= \boldsymbol{y}^T\{I-A(A^TA)^{-1}A^T\}^T A(A^TA)^{-1}A^T\boldsymbol{y} \\
&= \boldsymbol{y}^T\{I-A(A^TA)^{-1}A^T\}A(A^TA)^{-1}A^T\boldsymbol{y} \\
&= \boldsymbol{y}^T\{A(A^TA)^{-1}A^T-A(A^TA)^{-1}A^TA(A^TA)^{-1}A^T\}\boldsymbol{y} \\
&= \boldsymbol{y}^T\{A(A^TA)^{-1}A^T-A(A^TA)^{-1}A^T\}\boldsymbol{y} \\
&= \boldsymbol{y}^T\,0\,\boldsymbol{y} \\
&= 0
\end{aligned}
$$

8. 逆行列

$\hat{\boldsymbol{y}} = A\hat{\boldsymbol{x}} \in \mathscr{R}(A)$ ではあるが，$\boldsymbol{y} \in \mathscr{R}(A)$ とは限らない





$\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}$ is orthogonal to $\hat{\boldsymbol{y}}$.

左の図で，点 $\hat{\mathrm{P}}$ は点Pから$\mathscr{R}(A)$ に下した垂線の足

点 $\hat{\mathrm{P}}$ は$\mathscr{R}(A)$上でPに最も近い点

ベクトル $\hat{\boldsymbol{y}}$ は$\mathscr{R}(A)$ 上でベクトル $\boldsymbol{y}$ に最も近いベクトル（$\boldsymbol{y}$ の最良近似）

$\hat{\boldsymbol{x}}$ は次式を最小にする $\boldsymbol{x}$ である

$$(\boldsymbol{y} - A\boldsymbol{x})^T(\boldsymbol{y} - A\boldsymbol{x}).$$

$\cdots$ 最小2乗法