Linear Algebra for Statistics

Chapter 15

Instructor: Seokho Lee (이석호)

Hankuk University of Foreign Studies

Chapter 15 일반화역행렬

15.1 무어-펜로즈 역행렬(Moore-Penrose Inverse)

Figure 15.1: 무어(좌) 및 펜로즈(우)

아래의 선형방정식을 고려하자.

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}. \tag{15.1}$$

A 가 크기 $n \times n$ 인 정방행렬이고 정칙행렬이면 역행렬 A^{-1} 가 존재하므로, $\mathbf{x}$ 의 해로서

$$\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b} \tag{15.2}$$

라는 유일해를 얻는다.

만일 A 의 크기가 $m \times n$ $(m > n)$ 인 행렬이라면, 식의 개수가 추정대상의 개수보다 많으므로 이를 만족하는 해는 존재하지 않는다.

$$\mathbf{x} - A\mathbf{b} = \mathbf{0} \tag{15.3}$$

을 만족하는 $\mathbf{x}$ 의 해는 없지만, 회귀분석에서는 $\mathbf{b}$ 와 $A\mathbf{x}$ 사이의 거리의 제곱인

$$\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|^2 \tag{15.4}$$

를 최소로 하는 $\mathbf{x}$ 를 찾는다. 이러한 방법을 최소제곱법이라 한다.

최소제곱법에 의한 $\mathbf{x}$ 값의 추정값을 $\hat{\mathbf{x}}$ 라 표현하면, 단원 8.5에 의해 아래와 같이 주어진다.

$$\hat{\mathbf{x}} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}. \tag{15.5}$$

여기서

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T \tag{15.6}$$

라고 정의하면

$$\hat{\mathbf{x}} = A^+ \mathbf{b} \tag{15.7}$$

로 표현 가능하며, 여기서 A^+ 는 A 의 일반화역행렬의 일종이다.

$A_{m\times n}$ 행렬에 대해 $m < n$ 인 경우 선형방정식의 해는 식의 개수가 모수의 수보다 적으므로, 방정식을 만족하는 해 $\mathbf{x}$ 는 무수히 많다. 무수히 많은 해 중에서

$$\mathbf{x} = A^T (A A^T)^{-1} \mathbf{b} = A^+ \mathbf{b} \tag{15.8}$$

은 일반화역행렬로 표현된다.

Definition

임의의 행렬 $A_{m\times n}$ 에 대하여,

1. $AA^{-}A = A$
2. $A^{-}AA^{-} = A^{-}$

를 만족하면 A^{-} 는 A 의 일반화역행렬(generalized inverse)이라고 한다.

Theorem (정리 15.1)

정방행렬 A 가 정칙행렬일 때, A^{-1} 는 A 의 일반화역행렬이다.

Proof.

$AA^{-1}A = A$ 이고 $A^{-1}AA^{-1} = A^{-1}$ 이므로 A^{-1} 는 일반화역행렬이다. □

Definition

임의의 행렬 $A_{m \times n}$ 에 대하여, A^+가 다음을 만족하면 이를 A 의 무어-펜로즈 역행렬 (Moore-Penrose inverse)이라 한다.

1. $AA^+A = A$
2. $A^+AA^+ = A^+$
3. $(AA^+)^T = AA^+$
4. $(A^+A)^T = A^+A$

Proposition (15.2)

$A_{m\times n}$에 대하여, 다음을 증명하라.

(1) $(A^TA)^{-1}$가 존재할 때, $(A^TA)^{-1}A^T$ A 의 무어-펜로즈 역행렬이다.

(2) $(AA^T)^{-1}$가 존재할 때, $A^T(AA^T)^{-1}$는 A 의 무어-펜로즈 역행렬이다.

Proof.

(1) $A^+ = (A^TA)^{-1}A^T$ 라고 하면,

$$AA^+A = A(A^TA)^{-1}A^TA = A,$$

$$A^+AA^+ = (A^TA)^{-1}A^TA(A^TA)^{-1}A^T = (A^TA)^{-1}A^T = A^+,$$

$$(AA^+)^T = (A(A^TA)^{-1}A^T)^T = A(A^TA)^{-1}A^T = AA^+,$$

$$(A^+A)^T = ((A^TA)^{-1}A^TA)^T = I_n = (A^TA)^{-1}A^TA = A^+A.$$

Proof.

(2) $A^+ = A^T(AA^T)^{-1}$ 라고 하면,

$$AA^+A = AA^T(AA^T)^{-1}A = A,$$

$$A^+AA^+ = A^T(AA^T)^{-1}AA^T(AA^T)^{-1} = A^T(AA^T)^{-1} = A^+,$$

$$(AA^+)^T = (AA^T(AA^T)^{-1})^T = I_m = AA^T(AA^T)^{-1} = AA^+,$$

$$(A^+A)^T = (A^T(AA^T)^{-1}A)^T = A^T(AA^T)^{-1}A = A^+A.$$

□

Remark $(A^TA)^{-1}$ 과 $(AA^T)^{-1}$ 이 모두 존재한다면, A 는 정칙인 정방행렬이므로
$A^+ = (A^TA)^{-1}A^T = A^{-1}(A^T)^{-1}A^T = A^{-1}$ 이고
$A^+ = A^T(AA^T)^{-1} = A^T(A^T)^{-1}A^{-1} = A^{-1}$ 이 되어 무어-펜로즈 역행렬은 역행렬이 된다.

Example

아래 방정식의 해를 무어-펜로즈 역행렬을 사용하여 구하라.

$$\begin{cases} 2x = 3 \\ 2x = 4. \end{cases} \tag{15.9}$$

(풀이) 하나의 항에 대해 두개의 다른 식을 만족해야 하므로 수학적으로 해는 존재하지 않는다. 무어-펜로즈 역행렬에 의한 값을 구하기 위해 행렬로 표현하면 다음과 같다.

$$A\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \mathbf{b}. \tag{15.10}$$

따라서 무어-펜로즈 역행렬에 의한 추정값은 다음과 같이 계산된다.

$$\hat{\mathbf{x}} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b} = (4)^{-1}(2, 2) \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \frac{7}{4}. \tag{15.11}$$

추정값 $x = 1.75$는 1.5 와 2 의 사이값으로 주어짐을 알 수 있다.

Example

다음 방정식의 해를 무어-펜로즈 역행렬을 이용하여 구하라.

$$\begin{cases} x + 2y + z = 0 \\ 2x + y = 7. \end{cases} \tag{15.12}$$

(풀이) 3개 항에 2개의 식만 있으므로 만족하는 해는 무수히 많다. 무어-펜로즈 역행렬을 이용한 해를 구하기 위해 방정식을 행렬로 표현하면 아래와 같다.

$$A\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 7 \end{pmatrix} = \mathbf{b}. \tag{15.13}$$

여기서

$$AA^T = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 4 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \tag{15.14}$$

이므로

Example (continue)

(풀이)

$$(AA^T)^{-1} = \frac{1}{14}\begin{pmatrix} 5 & -4 \\ -4 & 6 \end{pmatrix} \tag{15.15}$$

이다. 따라서

$$\mathbf{x} = A^{+}\mathbf{b} = A^T(AA^T)^{-1}\mathbf{b} = \frac{1}{14}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & -4 \\ -4 & 6 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

이다. 즉, $x = 4, y = -1, z = -2$ 이고 이는 방정식을 만족하는 해 중의 하나이다.

Example

다음 방정식의 해를 무어-펜로즈 역행렬을 이용하여 구하라. 해가 많으면 그 중의 하나를 구하고, 해가 존재하지 않으면 최소제곱법에 의한 추정값을 구하라.

$$\begin{cases} x + 2y = 0 \\ x + 2y = 2 \\ x - 2y = -2 \\ x - 2y = 2. \end{cases} \tag{15.16}$$

15.2 무어-펜로즈 역행렬의 성질

Theorem (정리 15.3 무어-펜로즈 역행렬의 성질)

행렬 $A_{m\times n}$ 의 무어-펜로즈 역행렬을 A^+ 라 할 때, 다음이 성립한다.

(1) $(\alpha A)^+ = \frac{1}{\alpha}A^+, \quad (\alpha \neq 0)$

(2) $(A^+)^T = (A^T)^+$

(3) $(A^+)^+ = A$

(4) A *가 정칙인 정방행렬일 때,* $A^+ = A^{-1}$

(5) $(A^TA)^+ = A^+(A^T)^+$

(6) $(AA^T)^+ = (A^T)^+A^+$

(7) $(A^+A)^+ = A^+A$

(8) $(AA^+)^+ = AA^+$

Proof.

(1)

$$(\alpha A)\left(\frac{1}{\alpha}A^{+}\right)(\alpha A) = \alpha A, \tag{15.17}$$

$$\left(\frac{1}{\alpha}A^{+}\right)(\alpha A)\left(\frac{1}{\alpha}A^{+}\right) = \frac{1}{\alpha}A^{+}, \tag{15.18}$$

$$\left((\alpha A)\left(\frac{1}{\alpha}A^{+}\right)\right)^{T} = (AA^{+})^{T} = AA^{+} = (\alpha A)\left(\frac{1}{\alpha}A^{+}\right), \tag{15.19}$$

$$\left(\left(\frac{1}{\alpha}A^{+}\right)(\alpha A)\right)^{T} = (A^{+}A)^{T} = A^{+}A = \left(\frac{1}{\alpha}A^{+}\right)(\alpha A). \tag{15.20}$$

(2)

$$A^{T}(A^{+})^{T}A^{T} = (AA^{+}A)^{T} = A^{T}, \tag{15.21}$$

$$(A^{+})^{T}A^{T}(A^{+})^{T} = (A^{+}AA^{+})^{T} = (A^{+})^{T}, \tag{15.22}$$

$$(A^{T}(A^{+})^{T})^{T} = A^{+}A = (A^{+}A)^{T} = A^{T}(A^{+})^{T}, \tag{15.23}$$

$$((A^{+})^{T}A^{T})^{T} = AA^{+} = (AA^{+})^{T} = (A^{+})^{T}A^{T}. \tag{15.24}$$

Proof.

(5)

$$
\begin{aligned}
A^TA(A^+(A^+)^T)A^TA &= A^TA(A^+(A^+)^TA^T)A \\
&= A^TA(A^+(AA^+)^T)A \quad ((2) \text{ 와 } (6) \text{ 에 의해}) \\
&= A^TA(A^+AA^+)A \quad (A^+\text{의 성질에 의해}) \\
&= A^TAA^+A \quad (A^+\text{의 성질에 의해}) \\
&= A^TA, \quad (A^+\text{의 성질에 의해}) \qquad (15.25)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(A^+(A^+)^T)A^TA(A^+(A^+)^T) &= A^+((A^+)^TA^T)AA^+(A^+)^T \\
&= A^+A(A^+AA^+)(A^+)^T \quad ((2) \text{ 와 } (6) \text{ 에 의해}) \\
&= A^+AA^+(A^+)^T \quad (A^+\text{의 성질에 의해}) \\
&= A^+(A^+)^T, \quad (A^+\text{의 성질에 의해}) \qquad (15.26)
\end{aligned}
$$

Proof.

(5) (continue)

$$
\begin{aligned}
((A^TA)(A^+(A^+)^T))^T &= A^+(A^+)^TA^TA \quad (\text{행렬의 성질에 의해}) \\
&= A^+(AA^+)^TA \quad (\text{행렬의 성질에 의해}) \\
&= (A^+A)(A^+A) \quad (A^+\text{의 성질에 의해}) \\
&= (A^+A)^T(A^+A)^T \quad (A^+\text{의 성질에 의해}) \\
&= A^T(A^+)^TA^T(A^+)^T \quad (\text{행렬의 성질에 의해}) \\
&= A^T(AA^+)^T(A^+)^T \quad (\text{행렬의 성질에 의해}) \\
&= (A^TA)(A^+(A^+)^T), \quad (A^+\text{의 성질에 의해}) \quad (15.27)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
((A^+(A^+)^T)(A^TA))^T &= A^TAA^+(A^+)^T = A^T(AA^+)^T(A^+)^T = A^T(A^+)^TA^T(A^+)^T \\
&= A^T(A^+AA^+)^T = A^T(A^+)^T = (A^+A)^T = A^+A \quad (15.28) \\
&= A^+AA^+A = A^+(AA^+)^TA = A^+(A^+)^TA^TA. \quad (15.29)
\end{aligned}
$$

나머지 부분은 연습문제에서 다룬다. □

Theorem (정리 15.4 직교정규벡터와 무어-펜로즈 역행렬)

행렬 $A_{m\times n}$*에서 열벡터가 직교정규벡터라고 하자. 즉,* $A^TA = I_n$ *이라고 하면 다음이 성립한다.*

$$A^+ = A^T. \tag{15.30}$$

Proof.

$$\begin{aligned}
AA^TA &= AI_n = A,\\
A^TAA^T &= I_nA^T = A^T,\\
(AA^T)^T &= AA^T,\\
(A^TA)^T &= A^TA
\end{aligned}$$

이므로 A^T는 A의 무어-펜로즈 역행렬이다. □

Example

다음 행렬의 무어-펜로즈 역행렬을 구하라.

$$A = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}. \tag{15.31}$$

15.3 대칭행렬의 무어-펜로즈 역행렬

대칭행렬인 경우

$$A = P\Lambda P^T \tag{15.32}$$

를 만족하는 직교행렬 P가 존재한다.

Theorem (정리 15.5 대칭행렬의 무어-펜로즈 역행렬)

계수가 r $(r \leq n)$ 인 대칭행렬 $A_{n\times n}$의 고유값 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$으로 이루어진 대각행렬 Λ와 직교정규고유벡터로 이루어진 행렬 P에 대해 대각화

$$A = P\Lambda P^T \tag{15.33}$$

를 이룬다면 A의 무어-펜로즈 역행렬 A^+은 아래와 같다. 여기서 $\Lambda^+ = diag(\phi_{ii})$이다.

$$A^+ = P\Lambda^+ P^T, \tag{15.34}$$

$$\phi_{ii} = \begin{cases} \frac{1}{\lambda_{ii}}, & if\ \lambda_{ii} \neq 0, \\ 0, & if\ \lambda_{ii} = 0. \end{cases} \tag{15.35}$$

Proof.

계수가 r 이므로 0 이 아닌 고유값이 r 개 존재한다. 따라서 $\Lambda_1 = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_r)$ 이라고 정의하면

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \Lambda_1 & 0_{r\times(n-r)} \\ 0_{(n-r)\times r} & 0_{(n-r)\times(n-r)} \end{pmatrix} \tag{15.36}$$

이다. 0 이 아닌 고유값에 대응하는 고유벡터와 0 에 대응하는 고유벡터를 나누어 $P = (P_1, P_2)$ 로 표현한다면

$$A = P\Lambda P^T = (P_1, P_2) \begin{pmatrix} \Lambda_1 & 0_{r\times(n-r)} \\ 0_{(n-r)\times r} & 0_{(n-r)\times(n-r)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_1^T \\ P_2^T \end{pmatrix} = P_1 \Lambda_1 P_1^T \tag{15.37}$$

이다. 여기서 $\Lambda^+ = \begin{pmatrix} \Lambda_1^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ 이므로

$$A^+ = P\Lambda^+ P^T = P_1 \Lambda_1^{-1} P_1^T \tag{15.38}$$

로 정의하고 A^+이 A의 무어-펜로즈 역행렬이 됨을 보이자.

Proof.

먼저 $P^T P = I_n$ 이므로

$$P^T P = \begin{pmatrix} P_1^T \\ P_2^T \end{pmatrix} (P_1, P_2) = \begin{pmatrix} P_1^T P_1 & P_1^T P_2 \\ P_2^T P_1 & P_2^T P_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_r & 0_{r\times(n-r)} \\ 0_{(n-r)\times r} & I_{n-r} \end{pmatrix}$$

로부터 $P_1^T P_1 = I_r$ 임을 알 수 있다. 이 사실을 이용하여

$$AA^+A = (P_1\Lambda_1 P_1^T)(P_1\Lambda_1^{-1}P_1^T)(P_1\Lambda_1 P_1^T) = P_1\Lambda_1 P_1^T = A, \tag{15.39}$$

$$A^+AA^+ = (P_1\Lambda_1^{-1}P_1^T)(P_1\Lambda_1 P_1^T)(P_1\Lambda_1^{-1}P_1^T) = P_1\Lambda_1^{-1}P_1^T = A^+ \tag{15.40}$$

을 만족한다.

Proof.

또한

$$\Lambda\Lambda^{+} = \begin{pmatrix} \Lambda_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_1^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

이고 같은 방식으로 $\Lambda^{+}\Lambda = \begin{pmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ 이므로,

$$AA^{+} = (P\Lambda P)(P\Lambda^{+}P^{T}) = P\Lambda\Lambda^{+}P^{T} = (P_1, P_2)\begin{pmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} P_1^{T} \\ P_2^{T} \end{pmatrix} = P_1P_1^{T},$$

$$A^{+}A = (P\Lambda^{+}P)(P\Lambda P^{T}) = P\Lambda^{+}\Lambda P^{T} = (P_1, P_2)\begin{pmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} P_1^{T} \\ P_2^{T} \end{pmatrix} = P_1P_1^{T}$$

(교재에서 위의 계산이 틀림에 유의)

이므로 $AA^{+}, A^{+}A$ 모두 대칭행렬임을 알 수 있다. 따라서 위에서 정의한 A^{+}는 A의 무어-펜로즈 역행렬의 성질을 모두 만족한다. □

Example

아래 행렬의 무어-펜로즈 역행렬을 구하라.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{15.41}$$

(풀이) 행렬 A에 원소가 모두 0인 행이 존재하므로, A의 역행렬은 존재하지 않는다. 또한 A^TA, AA^T 모두 비정칙이므로 Proposition 15.2를 사용하지 못한다. 따라서 Proposition 15.5를 이용한다.

먼저 A에 대한 대각화를 실행하면,

$$\det(A - \lambda I_3) = \det \begin{pmatrix} 2-\lambda & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 3-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda \end{pmatrix} = -\lambda(\lambda-1)(\lambda-4) = 0$$

으로부터 $\lambda = 4, 1, 0$ 이 되고, 대응하는 직교정규고유벡터는 아래와 같이 얻을 수 있다.

Example (continue)

(풀이)

$$\mathbf{v}_1 = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}, 0\right)^T, \quad \mathbf{v}_2 = \left(-\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right)^T, \quad \mathbf{v}_3 = (0, 0, 1)^T. \tag{15.42}$$

따라서 Proposition 15.5에 의해

$$A^+ = P\Lambda^+ P^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

혹은

$$A^+ = P_1\Lambda_1^+ P_1^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \end{pmatrix}$$

을 이용하면, 다음을 얻는다.

$$A^+ = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{15.43}$$

Example

이전 예제의 A와 계산한 A^+를 가지고 $AA^+A = A$임을 계산하여 확인하라.

15.5 특이값 분해를 이용한 무어-펜로즈 역행렬

Theorem (정리 15.6 특이값 분해와 무어-펜로즈 역행렬)

행렬 $A_{m\times n}$의 계수가 r ($r \le \min(m,n)$) 일때, 특이값 분해(SVD)에 의해

$$A = U_{m\times m}D_{m\times n}V^T_{m\times n} = U \begin{pmatrix} \Delta_{r\times r} & 0_{r\times(n-r)} \\ 0_{(m-r)\times r} & 0_{(m-r)\times(n-r)} \end{pmatrix} V^T \tag{15.44}$$

로 분해되며, 무어-펜로즈 역행렬은 다음과 같이 주어진다.

$$A^+ = VD^+U^T = V \begin{pmatrix} \Delta^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U^T. \tag{15.45}$$

여기서, Δ는 $r \times r$ 크기의 대각행렬이며 대각원소는 0이 아닌 특이값으로 구성된다.

Proof.

$$AA^+A = U\begin{pmatrix}\Delta & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}V^TV\begin{pmatrix}\Delta^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}U^TU\begin{pmatrix}\Delta & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}V^T = U\begin{pmatrix}\Delta & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}V^T = A, \tag{15.46}$$

$$A^+AA^+ = U\begin{pmatrix}\Delta^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}V^TV\begin{pmatrix}\Delta & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}U^TU\begin{pmatrix}\Delta^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}V^T = U\begin{pmatrix}\Delta^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}V^T = A^+ \tag{15.47}$$

임을 알 수 있다. 또한 0 이 아닌 특이값과 0 인 특이값에 대응하도록 왼쪽특이벡터와 오른쪽특이벡터를 정리하여 표현하면 $U = (U_1, U_2), V = (V_1, V_2)$로 둘 수 있다. 따라서

$$\begin{aligned} AA^+ &= U\begin{pmatrix}\Delta & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}V^TV\begin{pmatrix}\Delta^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}U^T = U\begin{pmatrix}I_r & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}U^T \\ &= (U_1, U_2)\begin{pmatrix}I_r & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}U_1^T\\ U_2^T\end{pmatrix} = U_1U_1^T \end{aligned}$$

이므로 AA^+는 대칭행렬이다. 또한 비슷한 방식으로 $A^+A = V_1V_1^T$ 이므로 대칭이다. □

Example

행렬 A가 아래와 같이 특이값 분해(SVD)를 이룰 때, A의 무어-펜로즈 역행렬인 A^+를 구하고 $AA^+A = A$가 성립함을 보여라.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0.5 \\ 1 & 0 & 0.5 \\ 0 & -1 & 0.5 \\ 0 & -1 & 0.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}.$$

임의의 행렬 A에 대하여 무어-펜로즈 역행렬을 구하는 방법을 요약하면 아래와 같다.

1. $(A^TA)^{-1}$의 역행렬이 존재하는 경우, $A^+ = (A^TA)^{-1}A^T$
2. $(AA^T)^{-1}$의 역행렬이 존재하는 경우, $A^+ =^T (AA^T)^{-1}$
3. A^{-1}이 존재하는 경우, $A^+ = A^{-1}$
4. $A^TA = I_n$인 경우, $A^+ = A^T$
5. $A^T = A$인 경우, $A^+ = P\Lambda^+P^T$
6. $A_{m\times n}$의 계수가 r $(r \leq \min(m,n))$ 인 경우, $A^+ = VD^+U^T$