第 1 章

一般化逆行列

ムーア・ペンローズの擬似逆行列

正方行列は、それが正則であれば逆行列を持つ。

これを O でない任意の長方行列に拡張するのが一般逆行列（擬似逆行列）である。

擬似逆行列の存在と一意性　O でない任意の $m \times n$ 型行列 A に対して、以下の 4 つの条件を満たす $n \times m$ 型行列 A^+ がただ一つ存在する。

i. $AA^+A = A$
ii. $A^+AA^+ = A^+$
iii. $(AA^+)^\top = AA^+$
iv. $(A^+A)^\top = A^+A$

この A^+ をムーア・ペンローズの擬似逆行列という。

存在性の証明

A の特異値分解を考える。

$$\Sigma_r = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{pmatrix}, \quad \Sigma_r^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \frac{1}{\sigma_r} \end{pmatrix}$$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_r & O \\ O & O \end{pmatrix}, \quad \Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} \Sigma_r^{-1} & O \\ O & O \end{pmatrix}$$

とおくと、A は次のように特異値分解できる。

$$A = U\Sigma V^\top$$

ここで、

$$B = V\Sigma^{-1}U^\top$$

とおくと、B は次のように 4 つの条件を満たす。

(i) $AA^+A = A$

U, V はユニタリ行列であるから、$V^\top V = E$ および $U^\top U = E$ が成り立つ。

$$\begin{aligned} ABA &= (U\Sigma V^\top)(V\Sigma^{-1}U^\top)(U\Sigma V^\top) \\ &= U\Sigma(V^\top V)\Sigma^{-1}(U^\top U)\Sigma V^\top \\ &= U(\Sigma\Sigma^{-1})\Sigma V^\top \end{aligned}$$

ここで、

$$\Sigma\Sigma^{-1} = \begin{pmatrix} E_r & O \\ O & O \end{pmatrix}$$

であり、これに Σ をかけると、単位行列 E_r の部分が Σ_r に置き換わるだけとなるので、

$$(\Sigma\Sigma^{-1})\Sigma = \Sigma$$

が成り立つ。

この関係を用いると、

$$\begin{aligned} ABA &= U(\Sigma\Sigma^{-1})\Sigma V^\top \\ &= U\Sigma V^\top \\ &= A \end{aligned}$$

となり、条件 (i) が成り立つ。 ■

(ii) $A^+AA^+ = A^+$

同様に、

$$\begin{aligned} BAB &= (V\Sigma^{-1}U^\top)(U\Sigma V^\top)(V\Sigma^{-1}U^\top) \\ &= V\Sigma^{-1}(U^\top U)\Sigma(V^\top V)\Sigma^{-1}U^\top \\ &= V(\Sigma^{-1}\Sigma)\Sigma^{-1}U^\top \\ &= V\Sigma^{-1}U^\top \\ &= B \end{aligned}$$

となり、条件 (ii) が成り立つ。 ■

(iii) $(AA^+)^\top = AA^+$

まず AB を計算すると、

$$\begin{aligned} AB &= (U\Sigma V^\top)(V\Sigma^{-1}U^\top) \\ &= U\Sigma(V^\top V)\Sigma^{-1}U^\top \\ &= U(\Sigma\Sigma^{-1})U^\top \end{aligned}$$

よって、$(AB)^\top$ は、

$$\begin{aligned} (AB)^\top &= (U(\Sigma\Sigma^{-1})U^\top)^\top \\ &= U(\Sigma\Sigma^{-1})U^\top \\ &= AB \end{aligned}$$

となり、条件 (iii) が成り立つ。 ■

(iv) $(A^+A)^\top = A^+A$

まず BA を計算すると、

$$\begin{aligned} BA &= (V\Sigma^{-1}U^\top)(U\Sigma V^\top) \\ &= V\Sigma^{-1}(U^\top U)\Sigma(V^\top V) \\ &= V(\Sigma^{-1}\Sigma)V^\top \end{aligned}$$

よって、$(BA)^\top$ は、

$$\begin{aligned} (BA)^\top &= (V(\Sigma^{-1}\Sigma)V^\top)^\top \\ &= V(\Sigma^{-1}\Sigma)V^\top \\ &= BA \end{aligned}$$

となり、条件 (iv) が成り立つ。 ■

ムーア・ペンローズの擬似逆行列の構成

存在性の証明過程から、ムーア・ペンローズの擬似逆行列は次のように構成すればよいことがわかる。

ムーア・ペンローズの擬似逆行列　行列 A のムーア・ペンローズの擬似逆行列 A^+ は、次のように定義される。

$$A^+ = V\Sigma^{-1}U^\top = V\begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \frac{1}{\sigma_r} \end{pmatrix}U^\top$$

ムーア・ペンローズの擬似逆行列の一意性

行列 A に対して A^+ が一意的に定まることは、次のように示される。

一意性の証明

B_1, B_2 がいずれもムーア・ペンローズの擬似逆行列の 4 つの条件

i. $ABA = A$
ii. $BAB = B$

iii. $(AB)^\top = AB$

iv. $(BA)^\top = BA$

を満たすとすると、

$$
\begin{aligned}
B_1 &\overset{\text{ii}}{=} B_1AB_1 \\
&\overset{\text{iv}}{=} (B_1A)^\top B_1 && B_1A = B_1 \\
&\overset{\text{ii}}{=} (B_1AB_2A)^\top B_1 && AB_2A = A \\
&\overset{\text{iii}}{=} (B_2A)^\top (B_1A)^\top B_1 && \text{積の転置の性質} \\
&\overset{\text{iv}}{=} (B_2A)(B_1A)B_1 \\
&\overset{\text{i}}{=} B_2AB_1 && AB_1A = A
\end{aligned}
$$

同様の計算により、$B_2 = B_2AB_1$ も得られる。

よって、$B_1 = B_2$ である。 ■

特異値分解の展開式による表記

O でない $m \times n$ 型行列 A が次のように特異値分解されているとする。

$$A = \sigma_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^\top + \cdots + \sigma_r \boldsymbol{u}_r \boldsymbol{v}_r^\top$$

このとき、ムーア・ペンローズの擬似逆行列 A^+ は次のように表される。

$$A^+ = \frac{\boldsymbol{v}_1 \boldsymbol{u}_1^\top}{\sigma_1} + \cdots + \frac{\boldsymbol{v}_r \boldsymbol{u}_r^\top}{\sigma_r}$$

σ_i が逆数に、$\boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^\top$ が $\boldsymbol{v}_i \boldsymbol{u}_i^\top$ に置き換わっていることに注意しよう。

擬似逆行列と行空間・列空間への射影

逆行列は、もとの行列との積が単位行列となるものとして定義された。

$$A^{-1}A = AA^{-1} = E$$

一方、ムーア・ペンローズの擬似逆行列ともとの行列との積は、列および行の張る空間への射影行列となる。

$$A^+A = P_{\mathcal{V}}, \quad AA^+ = P_{\mathcal{U}}$$

ムーア・ペンローズ逆による行空間・列空間への射影　A^+ をムーア・ペンローズの擬似逆行列とするとき、A^+A は行空間 $\mathcal{V}$ への射影行列、AA^+ は列空間 $\mathcal{U}$ への射影行列となる。

証明

$A^+A = P_{\mathcal{V}}$

A と A^+ を正規直交化された特異ベクトルによる特異値分解で表すと、その積は、

$$
\begin{aligned}
A^+A &= \left(\sum_{i=1}^{r} \frac{\boldsymbol{v}_i \boldsymbol{u}_i^\top}{\sigma_i}\right)\left(\sum_{j=1}^{r} \sigma_j \boldsymbol{u}_j \boldsymbol{v}_j^\top\right) \\
&= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{r} \frac{\sigma_j}{\sigma_i} \boldsymbol{v}_i (\boldsymbol{u}_i^\top \boldsymbol{u}_j) \boldsymbol{v}_j^\top \\
&= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{r} \frac{\sigma_j}{\sigma_i} \delta_{ij} \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_j^\top \\
&= \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^\top = P_{\mathcal{V}}
\end{aligned}
$$

となり、行空間 $\mathcal{V}$ への射影行列となる。 ■

$AA^+ = P_{\mathcal{U}}$

同様に、AA^+ を計算すると、

$$
\begin{aligned}
AA^+ &= \left(\sum_{i=1}^{r} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^\top\right)\left(\sum_{j=1}^{r} \frac{\boldsymbol{v}_j \boldsymbol{u}_j^\top}{\sigma_j}\right) \\
&= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{r} \frac{\sigma_i}{\sigma_j} (\boldsymbol{u}_i^\top \boldsymbol{u}_j) \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_j^\top \\
&= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{r} \frac{\sigma_i}{\sigma_j} \delta_{ij} \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_j^\top \\
&= \sum_{i=1}^{r} \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^\top = P_{\mathcal{U}}
\end{aligned}
$$

となり、列空間 $\mathcal{U}$ への射影行列となる。 ■

A が正則行列の場合

A が正則行列の場合、A のムーア・ペンローズの擬似逆行列は、A の逆行列に一致する。すなわち、A が正則の場合は、次が成り立つ。

$$A^{+}A = AA^{+} = E$$

この意味で、ムーア・ペンローズの擬似逆行列は逆行列の一般化とみなせる。

また、単位行列は全空間への射影行列であるので、ムーア・ペンローズの擬似逆行列ともとの行列との積が射影行列になることの特別な場合といえる。

正則行列に対するムーア・ペンローズ逆　A が正則行列であれば、ムーア・ペンローズの擬似逆行列 A^{+} は逆行列 A^{-1} に一致する。

証明

正則行列 A の逆行列を A^{-1} とすると、

$$\begin{aligned} A^{+}A = A^{-1}A = E \\ AA^{+} = AA^{-1} = E \end{aligned}$$

また、$AA^{-1} = E$ と $A^{-1}A = E$ より、

$$\begin{aligned} (AA^{-1})^{\top} = E^{\top} = AA^{-1} \\ (A^{-1}A)^{\top} = E^{\top} = A^{-1}A \end{aligned}$$

以上より、A^{-1} はムーア・ペンローズの擬似逆行列 A^{+} の定義を満たす。 ■

逆変換としての擬似逆行列

ムーア・ペンローズの擬似逆行列は、線形変換の逆変換という視点でも、逆行列の一般化となっている。

逆変換と恒等変換

逆行列 A^{-1} は、線形変換 A の逆変換を表すものだった。

逆変換は「元に戻す」操作である。

変換 A と逆変換 A^{-1} を合成すると、「なにもしない」という変換（恒等変換）が得られる。

A してからそれを A^{-1} で打ち消すのだから、結局なにもしなかったことになるのである。

このことを数式で表したものが、逆行列 A^{-1} の定義式である。

$$A^{-1}A = AA^{-1} = E$$

単位行列 E は、恒等変換を表す行列である。

列空間上の逆変換

$\boldsymbol{x}$ が列空間 $\mathcal{U}$ の元である場合は、列空間へ射影しても変わらないので、

$$P_{\mathcal{U}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$$

が成り立つ。

つまり、列空間 $\mathcal{U}$ においては、$P_{\mathcal{U}}$ は「なにもしない」恒等変換を表す。

このことから、

$$AA^{+} = P_{\mathcal{U}}$$

という式は、

列空間 $\mathcal{U}$ において、A^{+} は A の逆変換を表す

と解釈できる。

行空間上の逆変換

同様に、$\boldsymbol{x}$ が行空間 $\mathcal{V}$ の元である場合は、行空間へ射影しても変わらないので、

$$P_{\mathcal{V}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$$

が成り立つ。

つまり、行空間 $\mathcal{V}$ においては、$P_{\mathcal{V}}$ は「なにもしない」恒等変換を表す。

このことから、

$$A^+A = P_{\mathcal{V}}$$

という式は、

行空間 $\mathcal{V}$ において、A^+ は A の**逆変換**を表す

と解釈できる。