証明：

$\boldsymbol{A}^*\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^T\boldsymbol{U}^*\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^* = (\boldsymbol{V})\boldsymbol{\Sigma}^T\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{V}^*)$ となるので，$\boldsymbol{A}^*\boldsymbol{A}$ の固有値は $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \ldots, \sigma_r^2, 0, \ldots, 0$ となる．ただし，r は $\boldsymbol{A}^*\boldsymbol{A}$ のランクである．よって，定理の主張が示せた．$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^*$ についても同様である．

□

1. 上記の定理から，$m \geq n$ の場合，行列 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$ の特異値分解を得るためにはまず $\boldsymbol{A}^*\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ の固有値分解を行い，$\boldsymbol{A}^*\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}^*$ を計算する．$\boldsymbol{A}^*\boldsymbol{A}$ は対称行列になっていることに注意．

2. つぎに，$\boldsymbol{\Lambda} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ の対角要素（$\boldsymbol{A}^*\boldsymbol{A}$ の固有値）の平行根を $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n$ として，正のものだけをその順番に $\boldsymbol{\Sigma} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ の対角におく．

3. $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{V} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ とおき，最後に $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^*$ となるように，ユニタリ行列 $\boldsymbol{U} \in \mathbb{C}^{m\times m}$ を求める．定理１３．１からわかるように，行列 $\boldsymbol{A}$ の特異値は一意であるが，その特異値分解は一意ではないので $\boldsymbol{U}$ を計算するときに自由度がある．

[問題 13-01] 例１，例２に出てくる行列の特異値分解を上記の方法を用い確かめよ．

13.3 Moore-Penrose 形一般逆行列

定義１３．７：$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$ の特異値分解を $\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^*$ とすると $\boldsymbol{A}$ の Moore-Penrose 一般逆行列を $\boldsymbol{A}^\dagger = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^\dagger\boldsymbol{U}^*$ と定義する．ただし，$\boldsymbol{\Sigma}^\dagger \in \mathbb{R}^{n\times m}$ の対角行列でその要素は

$$\begin{cases} \frac{1}{\sigma_j} & , \text{ if } \sigma_j > 0 \\ 0 & , \text{ if } \sigma_j = 0 \end{cases}$$

として定められている．

上記の $\boldsymbol{A}^\dagger \in \mathbb{C}^{n\times m}$ は $\boldsymbol{A}$ の疑似逆行列とよばれることもあり，以下の性質を満す唯一の行列 $\boldsymbol{X} \in \mathbb{C}^{n\times m}$ である．

1. $\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}$
2. $\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}$
3. $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X})^* = \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}$
4. $(\boldsymbol{X}\boldsymbol{A})^* = \boldsymbol{X}\boldsymbol{A}$

当然ながら，$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = n\ (\leq m)$ のとき $\boldsymbol{A}^\dagger = (\boldsymbol{A}^*\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^*$ であり，$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = n = m$ であるとき $\boldsymbol{A}^\dagger = \boldsymbol{A}^{-1}$ である．

このことから $\boldsymbol{A}$ の Moore-Penrose 一般逆行列は $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$ の最小ノルムを満すベクトル $\boldsymbol{x}$ のなかでさらに最小ノルムのものを実現するベクトル $\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{b}$ に関連していることがわかる．