レッスン 12　CS 分解

このレッスンでは特異値分解の応用として Paige-Saunders 型 CS 分解を学ぶ。これはユニタリ行列（このレッスンでは便宜上実直交行列）を任意に 4 分割し、すべてのブロックを（8 個ではなく）4 個の直交行列によって同時特異値分解するものである。結果は、各ブロック間の特異値はすべて 0 と 1 の間にあり、これらが単純な関係で結ばれていることを示す。特異値 1、0 と他特異値が陽に区別されている点にも特徴があり、これと分割の任意性が一般性と使いやすさの素になっている。つぎに、応用への予備知識として、正射影を丁寧に解説する。ついで応用例として、二つの部分空間間の距離の評価、$\mathbf{B}^{-1}$ を陽に計算することなく行う $\mathbf{AB}^{-1}$ 型行列の特異値分解法を学ぶ。CS 分解はさらに商 CS 分解 Quotient CS decomposition と積 CS 分解 Product CS decomposition に発展するが、これらについては参考文献に譲る。Stewart[5], p.77 によれば、「CS 分解」という名称は Stewart 自身の命名による。

このレッスンの準備には次の文献（とくに論文[2]）を一次資料として利用した。この場を借りて著者各位に深甚の謝意を表す。

[1] G. H. Golub and C. F. Van Loan, *Matrix Computations,* Third Edition, The Johns Hopkins University Press, 1996, 75-79

[2] C.C. Paige and M. A. Saunders, Towards a generalized singular value decomposition, SIAM Journal in Numerical Analysis 18, 398-405 (1981)

[3] C. C. Paige and M. Wei, History and generality of the CS decomposition, Linear Algebra and Its Applications 208 / 209, 303-326 (1994)

[4] G. W. Stewart, On the perturbation of pseudo-inverses, projections and linear least square problems, SIAM Review 19, 634-662 (1977)

[5] G. W. Stewart, *Matrix Algorithms,* Volume I, Basic Decompositions, SIAM, 1998, 73-77

12.1　Paige - Saunders 型 CS 分解

直交行列を 4 分割し、すべてのブロックを個別に特異値分解すれば、8 個の直交行列を必要とする。これを 4 個のみの直交行列を用いて、同時に特異値分解できる、というのが Paige and Saunders 型 CS 分解の主張である。これを可能にするのは、むろん、親行列の直交性である。

P-S 型 CS 分解は薄型 CS 分解(Golub & Van Loan[1], p.77)、Stewart 型 CS 分解(Stewart[3], TheoremA.1, [4], Theorem 4.38, p.75)の一般化に相当する。この節では P-S 型 CS 分解形の説明のみを行い、証明は次節で行う。

与えられた直交行列 $\mathbf{Q}$ を $\mathbf{Q}=\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12}\\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}m\times k & \vdots & m\times q\\ \cdots & \cdots & \cdots\\ p\times k & \vdots & p\times q\end{bmatrix}$ と分割するものとする。ここ

に、k, m, p, q の大小関係についての制約はまったくない。

分割例：　$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} x & x & x & \vdots & x \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x & x & x & \vdots & x \\ x & x & x & \vdots & x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1\times 3 & \vdots & 1\times 1 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 2\times 3 & \vdots & 2\times 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12} \\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22} \end{bmatrix}$

　すると、適当な直交行列 $\mathbf{U}_1$（m 次）、$\mathbf{U}_2$（p 次）、$\mathbf{V}_1$（k 次）、$\mathbf{V}_2$（q 次）をとれば、次の P-S 型 CS 分解が成立する（記号使いは[2]より踏襲）：

$$(1)\quad \mathbf{U}^T\mathbf{Q}\mathbf{V} \equiv \underset{(m \quad p)}{\begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_2^T \end{bmatrix}} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12} \\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22} \end{bmatrix} \underset{(k \quad q)}{\begin{bmatrix} \mathbf{V}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2 \end{bmatrix}} = \underset{(\quad k \qquad\qquad q \quad)}{\begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^T\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1 & \mathbf{U}_1^T\mathbf{Q}_{12}\mathbf{V}_2 \\ \mathbf{U}_2^T\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1 & \mathbf{U}_2^T\mathbf{Q}_{22}\mathbf{V}_2 \end{bmatrix}} \begin{pmatrix} m \\ p \end{pmatrix}$$

$$= \underset{(\, r \quad s \quad k-r-s \quad p-k+r \quad s \quad m-r-s \,)}{\begin{bmatrix} \mathbf{I} & & & \vdots & \mathbf{0}_\mathrm{S}{}^T & & \\ & \mathbf{C} & & \vdots & & \mathbf{S} & \\ & & \mathbf{0}_\mathrm{C} & \vdots & & & \mathbf{I} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{0}_\mathrm{S} & & & \vdots & \mathbf{I} & & \\ & \mathbf{S} & & \vdots & & -\mathbf{C} & \\ & & \mathbf{I} & \vdots & & & \mathbf{0}_\mathrm{C}{}^T \end{bmatrix}} \begin{pmatrix} r \\ s \\ m-r-s \\ \cdots\cdots \\ p-k+r \\ s \\ k-r-s \end{pmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{bmatrix} \equiv \Sigma$$

この最終形 Σ を便宜上（Paige & Saunders 型 CS 分解の）<u>標準形</u>と呼ぶことにする。

　説明を追加する：

(a)　Σ 自体も直交行列を表す（$\because\ \mathbf{U}, \mathbf{V}, \mathbf{Q}$ は直交行列）

(b)　空欄部のブロックはすべて 0 ブロックを表す。$\mathbf{0}_\mathrm{C}, \mathbf{0}_\mathrm{S}$ もゼロブロックを表す。

(c)　行列の傍に記した式は対応する行列の列数または行数を表す。例：$\mathbf{U}_1 : m\times m$、$\mathbf{V}_2 : q\times q$、$\mathbf{C} : s\times s$、$\mathbf{0}_\mathrm{C} : (m-r-s)\times(k-r-s)$。

(d)　$\mathbf{I}, \mathbf{C}, \mathbf{0}_\mathrm{C}, \cdots$ の中には空ブロックのものもあり得る。

(e)　$\mathbf{Q}_{11}, \cdots, \mathbf{Q}_{22}$ の特異値は標準形内の対応するブロック $\Sigma_{11}, \cdots, \Sigma_{22}$ から直接読み取れる。

$\mathbf{Q}_{11}$ の特異値：これらは、後述するように、0 と 1 の間にあるので、これらを $1, \cdots, 1$（r 個）、$(1>)\ c_{r+1} \ge \cdots \ge c_{r+s} (>0)$（$s$ 個）、$0, \cdots, 0$　（$\min\{m, k\} - r - s$ 個）に分類する。$r = 0$ または $s = 0$ の場合もあり得る。そして、$diag\{c_{r+1}, \cdots, c_{r+s}\} \equiv \mathbf{C}$、$diag\{s_{r+1}, \cdots, s_{r+s}\} \equiv \mathbf{S}$ と定義する。ここに、$s_i = \sqrt{1-c_i{}^2},\ i = r+1, \cdots, r+s$。ゆえに、$0 < s_{r+1} \le \cdots \le s_{r+s} < 1$ である。

$c_i = \cos\theta_i (0 < \theta_i < \pi/2)$ と書けば、$s_i = \sin\theta_i$ となる。CS 分解の名はここから来ている。

$\mathbf{C}^{-1}, \mathbf{S}^{-1}$ の存在性と $\mathbf{C}^2 + \mathbf{S}^2 = \mathbf{I}$ に注意のこと。

$\mathbf{Q}_{21}$ の特異値：$\mathbf{I}_{k-r-s}, \mathbf{S}$ の対角成分および $\min\{p, k\} - k + r$ 個の 0

$\mathbf{Q}_{12}$ の特異値：$\mathbf{I}_{m-r-s}$, $\mathbf{S}$ の対角成分および $\min\{m,q\}-m+r$ 個の 0

$\mathbf{Q}_{22}$ の特異値：$\mathbf{I}_{p-k+r}$, $\mathbf{C}$ の対角成分および $\min\{m,k\}-r-s$ 個の 0

ここに、$m+p=k+q$ に注意。

(f)　$\Sigma_{11},\cdots,\Sigma_{22}$ のどれか一つが定まれば、r,s の値が定まり、従って標準形 Σ の形も確定する。結局、$\mathbf{Q}_{11},\cdots,\mathbf{Q}_{22}$ の特異値は、そのどれか一つの特異値がわかれば、一意的に定まってしまう。

例 1　$\mathbf{Q}=\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12}\\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22}\end{bmatrix}=\left[\begin{array}{ccc:cc}1&0&0&0&0\\0&0&0&0&1\\0&1&0&0&0\\ \hdashline 0&0&1&0&0\\0&0&0&1&0\end{array}\right]$（$m=k=3,\ p=q=2$）　$\mathbf{Q}$ は確かに直交行列を表す。$\mathbf{Q}_{22}=\begin{bmatrix}0&0\\1&0\end{bmatrix}$ に着目すると、${\mathbf{Q}_{22}}^T\mathbf{Q}_{22}=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}$ だから、その特異値は $\{1,0\}$ によって与えられる。これを一般形に照らせば、$p-k+r=1,\ s=0$。これより、$r=2$ が得られ、標準形は

$$\Sigma=\left[\begin{array}{cc:cc}\mathbf{I}_2 & \mathbf{0} & {\mathbf{0}_{\mathrm{S}}}^T & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}_{\mathrm{C}} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_1\\ \hdashline \mathbf{0}_{\mathrm{S}} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_1 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0}_{\mathrm{C}}\end{array}\right]\begin{pmatrix}2\\1\\ \cdots\\1\\1\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}2 & 1 & & 1 & 1\end{pmatrix}$$

によって与えられる。■

例2　ある 8 次直交行列 $\mathbf{Q}$ を $\mathbf{Q}=\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12}\\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22}\end{bmatrix}$ のように分割したところ（ここに $\mathbf{Q}_{21}:5\times 1$）、$\mathbf{Q}_{21}$ の特異値は α（$0<\alpha<1$）であったという。Σ を求めよ。まず、一般形(1)に照らせば、$m=3, p=5, k=1, q=7$、$\Sigma_{21}=\begin{bmatrix}\mathbf{0}\\ \mathbf{S}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0&0&0&0&\alpha\end{bmatrix}^T$（$\mathbf{S}=[\alpha]:1\times 1$）、$r=0, s=1$ のはずである。ゆえに、

$$\Sigma=\left[\begin{array}{c:ccc}\mathbf{C} & \mathbf{0} & \mathbf{S} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_2\\ \hdashline \mathbf{0} & \mathbf{I}_4 & \mathbf{0} & \mathbf{0}\\ \mathbf{S} & \mathbf{0} & -\mathbf{C} & \mathbf{0}\end{array}\right]\begin{pmatrix}1\\2\\ \cdots\\4\\1\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}1 & 4 & 1 & 2\end{pmatrix}$$

（$\mathbf{C}=\left[\sqrt{1-\alpha^2}\right]$）。■

例 3　ある 6 次直交行列の標準形 Σ の Σ_{21} ブロックが $\begin{bmatrix}0\end{bmatrix}$（1×1）であるという。標準形は

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_1 & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{I}_4 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{I}_1 & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ \cdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & \vdots & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

によって与えられる。■

例 4　一般形(1)の特別の場合として、直交行列を上下または左右に 2 分割した場合を考える。

直交行列 $\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11} \\ \cdots \\ \mathbf{Q}_{21} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} m \\ \cdots \\ p \end{pmatrix}$（$m+p=n$）の P-G 分解標準形は $\Sigma = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_m & \mathbf{0} \\ \cdots & \cdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_p \end{bmatrix}$ によって与えられる（$\because \mathbf{Q}_{11}\mathbf{Q}_{11}{}^T = \mathbf{I}_m$、$\mathbf{Q}_{21}\mathbf{Q}_{21}{}^T = \mathbf{I}_p$）。また、$\begin{matrix} \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11} & \vdots & \mathbf{Q}_{12} \end{bmatrix} \\ \begin{pmatrix} k & \vdots & q \end{pmatrix} \end{matrix}$（$k+q=n$）と分割すれば、標準形は $\Sigma = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_k & \vdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{I}_q \end{bmatrix}$ となる（$\because \mathbf{Q}_{11}{}^T\mathbf{Q}_{11} = \mathbf{I}_k,\ \mathbf{Q}_{12}{}^T\mathbf{Q}_{12} = \mathbf{I}_q$）。■

例5　最後の例として、標準形 Σ を区分けの形状に無関係に与えることはできないことを示す。$\Sigma = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \vdots & x \\ 0 & 0 & \vdots & x \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x & x & \vdots & x \end{bmatrix}$ 型の標準形はあり得ない。仮に可能だとすれば、Σ 自体も直交行列を表すはずから、最初の 2 列は正規直交系をなすべきであるが、これは不可能である。ゆえに、標準形の(1,1)ブロックはゼロブロックではあり得ず、$\begin{bmatrix}\mathbf{I}\end{bmatrix}$ 型、$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C} \end{bmatrix}$ 型、$\begin{bmatrix}\mathbf{C}\end{bmatrix}$ 型、または $\begin{bmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$ 型のいずれかでなければならない。■

12.2　Paige-Saunders 型 CS 分解の証明

この節における記号の意味は 12.1 節から引き継ぐものとする。証明のポイントは直交性の繰り返し利用である。

(I)　$\mathbf{Q}$ 第 1 列の特異値分解　$\mathbf{Q}^T\mathbf{Q} = \mathbf{I}_n$ $(n \equiv m+p = k+q)$ より、（ブロックとしての）第 1 列に関して、$\mathbf{Q}_{11}{}^T\mathbf{Q}_{11} + \mathbf{Q}_{21}{}^T\mathbf{Q}_{21} = \mathbf{I}_k$ $(\because \mathbf{Q}_{11} : m\times k, \mathbf{Q}_{21} : p\times k)$ が成立する。ここに、左辺の各

項は実対称行列を表す。第 1 項をシュール分解すれば、その固有値はすべて正または 0 でなければならないからこれを、$\mathbf{V}_1{}^T\mathbf{Q}_{11}{}^T\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1 = diag\{c_1{}^2,\cdots,c_k{}^2\}$（$c_1 \geq \cdots \geq c_k \geq 0$）とする。すると、$\mathbf{V}_1{}^T\mathbf{Q}_{21}{}^T\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1 = \mathbf{I} - \mathbf{V}_1{}^T\mathbf{Q}_{11}{}^T\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1 = diag\{1-c_1{}^2,\cdots,1-c_k{}^2\}$ となる。ゆえに $\mathbf{Q}_{21}{}^T\mathbf{Q}_{21}$ の固有値は $1-c_1{}^2,\cdots,1-c_k{}^2$ によって与えられる。$\mathbf{Q}_{21}{}^T\mathbf{Q}_{21}$ の形からこれらもすべて正または 0 でなければならないから、

$$1 \geq c_1 \geq \cdots \geq c_k \geq 0 \quad \text{および} \quad 0 \leq s_1 \equiv \sqrt{1-c_1{}^2} \leq \cdots \leq s_k \equiv \sqrt{1-c_k{}^2} \leq 1$$

が真でなければならない。

ここで、$c_1,\cdots$ の値を 1 のもの、1 と 0 の中間にあるもの、および 0 に分類し、1 のものの個数を r 、中間にあるものの個数を s とすれば、

$$c_1 = \cdots = c_r = 1 > c_{r+1} \geq \cdots \geq c_{r+s} > 0 = c_{r+s+1} = \cdots = c_k$$
$$s_1 = \cdots = s_r = 0 < s_{r+1} \leq \cdots \leq s_{r+s} < 1 = s_{r+s+1} = \cdots = s_k$$

となる。これ以降

$$\mathbf{C} \equiv diag\{c_{r+1},\cdots,c_{r+s}\},\ \mathbf{S} \equiv diag\{s_{r+1},\cdots,s_{r+s}\}$$

と書くことにする（対角成分 c_i, s_i はすべて $0 < c_i, s_i < 1$ を満たすことに注意)。これまでの結果をまとめると

(2)　$\mathbf{V}_1^T\mathbf{Q}_{11}{}^T\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1 = diag\{c_1{}^2,\cdots,c_k{}^2\} = diag\{\mathbf{I}_r,\mathbf{C}^2,\mathbf{0}_{k-r-s}\}$（$1 \geq c_1 \geq \cdots \geq c_k \geq 0$）

(3)　$\mathbf{V}_1^T\mathbf{Q}_{21}{}^T\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1 = diag\{s_1{}^2,\cdots,s_k{}^2\} = diag\{\mathbf{0}_r,\mathbf{S}^2,\mathbf{I}_{k-r-s}\}$（$0 \leq s_1 \leq \cdots \leq s_k \leq 1$）

この 2 式から

(4)　$\min\{m,k\} \geq rank(\mathbf{Q}_{11}) = rank(\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1) = rank(\mathbf{V}_1^T\mathbf{Q}_{11}{}^T\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1) = r + s$

(5)　$\min\{p,k\} \geq rank(\mathbf{Q}_{21}) = rank(\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1) = rank(\mathbf{V}_1^T\mathbf{Q}_{21}{}^T\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1) = s + (k-r-s) = k - r$

（$\because$ 一般に $rank(\mathbf{A}^T\mathbf{A}) = rank(\mathbf{A}\mathbf{A}^T) = rank(\mathbf{A})$）

つぎに、$\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2$ を構築する。$\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1 \equiv \mathbf{X} \equiv \left[\mathbf{x}_1 \cdots \mathbf{x}_k\right] : m \times k$ と書けば、(2)は $\mathbf{X}^T\mathbf{X} = diag\{\mathbf{I}_r,\mathbf{C}^2,\mathbf{0}_{k-r-s}\} : k \times k$ 、を意味し、これは $\mathbf{X}$ の列は互いに直交し、かつ

$$\mathbf{x}_1{}^T\mathbf{x}_1 = \cdots \mathbf{x}_r{}^T\mathbf{x}_r = 1,\ \mathbf{x}_{r+1}{}^T\mathbf{x}_{r+1} = c_{r+1}{}^2,\cdots,\mathbf{x}_{r+s}{}^T\mathbf{x}_{r+s} = c_{r+s}{}^2,\ \mathbf{x}_{r+s+1} = \cdots \mathbf{x}_k = \mathbf{0}$$

が成り立っていることを意味する。これより、$\{\mathbf{x}_1,\cdots,\mathbf{x}_r,\dfrac{\mathbf{x}_{r+1}}{c_{r+1}},\cdots,\dfrac{\mathbf{x}_{r+s}}{c_{r+s}}\}$は正規直交系を表す。

ここで(5)式$\min\{m,k\}\geq r+s$を考慮すると、$m-r-s(\geq 0)$本のベクトル$\tilde{\mathbf{x}}_{r+s+1},\cdots,\tilde{\mathbf{x}}_m$を適当に選択すれば、

(6)　$\mathbf{U}_1\equiv\left[\mathbf{x}_1\cdots\mathbf{x}_r\ \dfrac{\mathbf{x}_{r+1}}{c_{r+1}}\cdots\dfrac{\mathbf{x}_{r+s}}{c_{r+s}}\ \tilde{\mathbf{x}}_{r+s+1}\cdots\tilde{\mathbf{x}}_m\right]:m\times m$

が直交行列を表すようできる。 すると

(7)　$\mathbf{U}_1{}^T\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1=\mathbf{U}_1{}^T\mathbf{X}=\left[\mathbf{x}_1\cdots\mathbf{x}_r\ \dfrac{\mathbf{x}_{r+1}}{c_{r+1}}\cdots\dfrac{\mathbf{x}_{r+s}}{c_{r+s}}\ \tilde{\mathbf{x}}_{r+s+1}\cdots\tilde{\mathbf{x}}_m\right]^T\left[\mathbf{x}_1\cdots\mathbf{x}_r\ \ \mathbf{x}_{r+1}\cdots\mathbf{x}_{r+s}\ \ \mathbf{0}\cdots\mathbf{0}\right]$

$$
=\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{C} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}r\\ s\\ m-r-s\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix}r & s & k-r-s\end{pmatrix}\end{array}
$$

　つぎに、$\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1\equiv\mathbf{Z}\equiv\left[\mathbf{z}_1\cdots\mathbf{z}_k\right]:p\times k$と書けば、(3)は$\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}=diag\{\mathbf{0}_r,\mathbf{S}^2,\mathbf{I}_{k-r-s}\}:k\times k$となる。これは$\mathbf{Z}$の列は直交し、かつ

$$\mathbf{z}_1=\cdots\mathbf{z}_r=\mathbf{0},\ \mathbf{z}_{r+1}{}^T\mathbf{z}_{r+1}=s_{r+1}{}^2,\cdots,\mathbf{z}_{r+s}{}^T\mathbf{z}_{r+s}=s_{r+s}{}^2,\ \mathbf{z}_{r+s+1}{}^T\mathbf{z}_{r+s+1}=\cdots\mathbf{z}_k{}^T\mathbf{z}_k=1$$

を示している。ここで、(5)より$\min\{p,k\}\geq k-r$だから、 $p-k+r(\geq 0)$本のベクトル$\tilde{\mathbf{z}}_1,\cdots,\tilde{\mathbf{z}}_{p-k+r}$を適当に選択すれば、

(8)　$\mathbf{U}_2\equiv\left[\tilde{\mathbf{z}}_1\cdots\tilde{\mathbf{z}}_{p-k+r}\ \dfrac{\mathbf{z}_{r+1}}{s_{r+1}}\cdots\dfrac{\mathbf{z}_{r+s}}{s_{r+s}}\ \mathbf{z}_{r+s+1}\cdots\mathbf{z}_k\right]:p\times p$

が直交行列を表すようにできる。 すると

(9)

$$\mathbf{U}_2{}^T\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1=\mathbf{U}_2{}^T\mathbf{Z}=\left[\tilde{\mathbf{z}}_1\cdots\tilde{\mathbf{z}}_{p-k+r}\ \dfrac{\mathbf{z}_{r+1}}{s_{r+1}}\cdots\dfrac{\mathbf{z}_{r+s}}{s_{r+s}}\ \mathbf{z}_{r+s+1}\cdots\mathbf{z}_k\right]^T\left[\mathbf{0}\cdots\mathbf{0}\ \ \mathbf{z}_{r+1}\cdots\mathbf{z}_{r+s}\ \ \mathbf{z}_{r+s+1}\cdots\mathbf{z}_k\right]$$

$$
=\begin{array}{cc}
\begin{bmatrix} \mathbf{0}_S & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{S} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} & \begin{pmatrix} p-k+r \\ s \\ k-r-s \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} r & s & k-r-s \end{pmatrix} &
\end{array}
$$

以上をまとめると、

$$
(10)\quad \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1{}^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_2{}^T \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11} \\ \mathbf{Q}_{21} \end{bmatrix}\mathbf{V}_1 =
\begin{array}{cc}
\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0}_C \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{0}_S & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{S} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} & \begin{pmatrix} r \\ s \\ m-r-s \\ \cdots \\ p-k+r \\ s \\ k-r-s \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} r & s & k-r-s \end{pmatrix} &
\end{array}
$$

この式は$\begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11} \\ \mathbf{Q}_{21} \end{bmatrix}$の列が正規直交系をなす、すなわち、$\mathbf{Q}_{11}{}^T\mathbf{Q}_{11}+\mathbf{Q}_{21}{}^T\mathbf{Q}_{21}=\mathbf{I}_k$、だけを使って導いた関係である。(10)式は Golub & Van Loan[1], p. 77 の<u>薄型 CS 分解</u> thin version CS decomposition に相当する。

(II)　**Q** 第 1 行の特異値分解

$\mathbf{Q}^T=\begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11}{}^T & \mathbf{Q}_{21}{}^T \\ \mathbf{Q}_{12}{}^T & \mathbf{Q}_{22}{}^T \end{bmatrix}$も直交行列だから、その第 1 列に(I)の結果を適用すれば、

$$
\begin{bmatrix} \mathbf{V}_1{}^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2{}^T \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11}{}^T \\ \mathbf{Q}_{12}{}^T \end{bmatrix}\mathbf{U}_1 =
\begin{array}{cc}
\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{C} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0}_C{}^T \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{0}_S & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{S} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} & \begin{pmatrix} r \\ s \\ k-r-s \\ \cdots \\ q-m+r \\ s \\ m-r-s \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} r & s & m-r-s \end{pmatrix} &
\end{array}
$$

を満たす直交行列$\mathbf{V}_2 : q\times q$がとれる。ここに$\mathbf{0}_S : (q-m+r)\times r$である。転置をとれば

(11)　$$\mathbf{U}_1^T\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{V}_1 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{I} & & \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0}_S{}^T & & \mathbf{0}\\ & \mathbf{C} & & \vdots & & \mathbf{S} & \\ \mathbf{0} & & \mathbf{0}_C & \vdots & \mathbf{0} & & \mathbf{I}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}r\\ s\\ m-r-s\end{pmatrix}$$

$$(r\quad s\quad k-r-s\quad q-m+r\quad s\quad m-r-s)$$

以上(10)(11)を使うと

(12)　$$\begin{bmatrix}\mathbf{U}_1{}^T & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_2{}^T\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12}\\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{V}_1 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{U}_1{}^T\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1 & \mathbf{U}_1{}^T\mathbf{Q}_{12}\mathbf{V}_2\\ \mathbf{U}_2{}^T\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1 & \mathbf{U}_2{}^T\mathbf{Q}_{22}\mathbf{V}_2\end{bmatrix}\begin{pmatrix}m\\ p\end{pmatrix}$$

$$(m\quad p)\quad (k\quad q)\quad (k\quad q)\quad \left(\quad k\qquad\qquad q\quad\right)$$

$$=\begin{bmatrix}\mathbf{I} & & & \vdots & \mathbf{0}_\mathrm{S}{}^T & & \\ & \mathbf{C} & & \vdots & & \mathbf{S} & \\ & & \mathbf{0}_\mathrm{C} & \vdots & & & \mathbf{I}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \mathbf{0}_\mathrm{S} & & & \vdots & \mathbf{X}_{11} & \mathbf{X}_{12} & \mathbf{X}_{13}\\ & \mathbf{S} & & \vdots & \mathbf{X}_{21} & \mathbf{X}_{22} & \mathbf{X}_{23}\\ & & \mathbf{I} & \vdots & \mathbf{X}_{31} & \mathbf{X}_{32} & \mathbf{X}_{33}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}r\\ s\\ m-r-s\\ \cdots\\ p-k+r\\ s\\ k-r-s\end{pmatrix}$$

$$\left(r\quad s\quad k-r-s\quad p-k+r\quad s\quad m-r-s\right)$$

となる（$m+p=k+q$ ゆえ、$p-k+r=q-m+r$ に注意)。

ここに $\mathbf{X}_{11},\cdots,\mathbf{X}_{33}$ は、未知行列であるが、以下で示すように、直交性を利用すれば定まる。実際、(12)の左辺は直交行列を表すから、最終辺も直交行列を表す。$\mathbf{C}^T=\mathbf{C}$、$\mathbf{S}^T=\mathbf{S}$、$\mathbf{CS}=\mathbf{SC}$、$\mathbf{C}^{-1},\mathbf{S}^{-1}$ の存在性、を使うと、次の関係が出る：

2 列⊥4 列：$\mathbf{S}^T\mathbf{X}_{21}=\mathbf{0}\rightarrow\mathbf{X}_{21}=\mathbf{0}$

2 列⊥5 列：$\mathbf{C}^T\mathbf{S}+\mathbf{S}^T\mathbf{X}_{22}=\mathbf{0}\rightarrow\mathbf{X}_{22}=-\mathbf{C}$

2 列⊥6 列：$\mathbf{S}^T\mathbf{X}_{23}=\mathbf{0}\rightarrow\mathbf{X}_{23}=\mathbf{0}$

3 列⊥4 列：$\mathbf{IX}_{31}=\mathbf{0}\rightarrow\mathbf{X}_{31}=\mathbf{0}$

3 列⊥5 列：$\mathbf{IX}_{32}=\mathbf{0}\rightarrow\mathbf{X}_{32}=\mathbf{0}$

3 列⊥6 列：$\mathbf{IX}_{33}=\mathbf{0}\rightarrow\mathbf{X}_{33}=\mathbf{0}=\mathbf{0}_\mathrm{C}{}^T$

3 行⊥4 行：$\mathbf{IX}_{13}=\mathbf{0}\rightarrow\mathbf{X}_{13}=\mathbf{0}$

(4 列)^T(4 列)$=\mathbf{I}$ ：$\mathbf{X}_{11}{}^T\mathbf{X}_{11}=\mathbf{I}$　$(\mathbf{X}_{11}:(p-k+r)\times(p-k+r))\rightarrow\mathbf{X}_{11}$ は $p-k+r$ 次直交行列

$(5\text{列})^T(5\text{列})=\mathbf{I}$: $\mathbf{S}^2+{\mathbf{X}_{12}}^T\mathbf{X}_{12}+\mathbf{C}^2=\mathbf{I}\rightarrow\mathbf{X}_{12}=\mathbf{0}$ （$\because\mathbf{C}^2+\mathbf{S}^2=\mathbf{I}$）

まとめると

(13) $\begin{bmatrix}\mathbf{X}_{11} & \mathbf{X}_{12} & \mathbf{X}_{13}\\ \mathbf{X}_{21} & \mathbf{X}_{22} & \mathbf{X}_{23}\\ \mathbf{X}_{31} & \mathbf{X}_{32} & \mathbf{X}_{33}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{X}_{11} & \mathbf{0} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & -\mathbf{C} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & {\mathbf{0}_\mathrm{C}}^T\end{bmatrix}$ （$\mathbf{X}_{11}$ は $p-k+r(=q-m+r)$ 次直交行列）

仕上げは $\mathbf{X}_{11}$ 部が $\mathbf{I}_{p-k+r}$ になるように $\mathbf{U}_2$ または $\mathbf{V}_2$ の定義を変更すればよい。すなわち、

$\mathbf{U}_2$ を $\mathbf{U}_2\begin{bmatrix}\mathbf{X}_{11} & & \\ & \mathbf{I} & \\ & & \mathbf{I}\end{bmatrix}\equiv\mathbf{U}_2{}'$ または $\mathbf{V}_2$ を $\mathbf{V}_2\begin{bmatrix}{\mathbf{X}_{11}}^T & & \\ & \mathbf{I} & \\ & & \mathbf{I}\end{bmatrix}\equiv\mathbf{V}_2{}'$ に変更すれば、$\mathbf{U}_2{}',\mathbf{V}_2{}'$ も直交行列を表し、最終的に

(14) $\underset{(m\quad p)}{\begin{bmatrix}{\mathbf{U}_1}^T & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & {\mathbf{U}_2}'^T\end{bmatrix}}\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12}\\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22}\end{bmatrix}\underset{(k\quad q)}{\begin{bmatrix}\mathbf{V}_1 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2\end{bmatrix}}=\begin{bmatrix}{\mathbf{U}_1}^T & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & {\mathbf{U}_2}^T\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12}\\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{V}_1 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2{}'\end{bmatrix}$

$$=\left[\begin{array}{ccc:ccc}\mathbf{I} & & & {\mathbf{0}_\mathrm{S}}^T & & \\ & \mathbf{C} & & & \mathbf{S} & \\ & & \mathbf{0}_\mathrm{C} & & & \mathbf{I}\\ \hdashline \mathbf{0}_\mathrm{S} & & & \mathbf{I} & & \\ & \mathbf{S} & & & -\mathbf{C} & \\ & & \mathbf{I} & & & {\mathbf{0}_\mathrm{C}}^T\end{array}\right]\begin{pmatrix}r\\ s\\ m-r-s\\ \hdashline p-k+r\\ s\\ k-r-s\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}r & s & k-r-s & p-k+r & s & m-r-s\end{pmatrix}$$

証明は以上で完了した。ただし、$\mathbf{Q}_{11}$ の特異値分解以降は $\mathbf{Q}_{21},\cdots$ に QR 分解を施すという別法もあるので、これは腕試し問題とする（問題 12.8)。■

12.3　$p\geq m\geq k$ の場合

$p\geq m\geq k$ の場合に特化した Paige-Saunders 型 CS 分解について考える。このときは当然 $q=m+p-k\geq k$ となる。とくに、$p\geq m=k$ の場合は、後述する「Stewart 型 CS 分解」（Stewart [4, Theorem A.1]に還元することを示そう。

さて、$p\geq m\geq k$ 場合、P-S 型 CS 分解における $\mathbf{Q}_{11}$、$\mathbf{Q}_{21}$ の特異値は、それぞれ

(1)
$$
\begin{array}{c}
\mathbf{C}'\equiv\begin{bmatrix}\mathbf{I}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\mathbf{C}&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}r\\s\\k-r-s\end{pmatrix}\\
\begin{pmatrix}r&s&k-r-s\end{pmatrix}
\end{array}、
\begin{array}{c}
\mathbf{S}'\equiv\begin{bmatrix}\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\mathbf{S}&\mathbf{0}\\\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{I}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}r\\s\\k-r-s\end{pmatrix}\\
\begin{pmatrix}r&s&k-r-s\end{pmatrix}
\end{array}、（\mathbf{C}'^2+\mathbf{S}'^2=\mathbf{I}）
$$

の特異値（$\mathbf{C}',\mathbf{S}'$ は $k\times k$ 行列ゆえそれぞれの対角成分 k 個）によって与えられる。ゆえに、P-S 型 CS 分解の標準形 Σ は次のようになる：

$$
\begin{array}{c}
\Sigma=\left[\begin{array}{ccc:ccccc}
\mathbf{I}_r&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\\
\mathbf{0}&\mathbf{C}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{S}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\\
\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{I}_{k-r-s}&\mathbf{0}\\
\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{I}_{m-k}\\
\hdashline
\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{I}_{p-k}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\\
\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{I}_r&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\\
\mathbf{0}&\mathbf{S}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&-\mathbf{C}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\\
\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{I}_{k-r-s}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}
\end{array}\right]
\begin{pmatrix}r\\s\\k-r-s\\m-k(\geq 0)\\\cdots\cdots\\p-k(\geq 0)\\r\\s\\k-r-s\end{pmatrix}\\
\begin{pmatrix}r&s&k-r-s&p-k&r&s&k-r-s&m-k\end{pmatrix}
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{c}
=\left[\begin{array}{c:ccc}
\mathbf{C}'&\mathbf{0}&\mathbf{S}'&\mathbf{0}\\
\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{I}_{m-k}\\
\hdashline
\mathbf{0}&\mathbf{I}_{p-k}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\\
\mathbf{S}'&\mathbf{0}&-\mathbf{C}'&\mathbf{0}
\end{array}\right]
\begin{pmatrix}k\\m-k\\\cdots\\p-k\\k\end{pmatrix}\\
\begin{pmatrix}k&p-k&k&m-k\end{pmatrix}
\end{array}
$$

ここで、この行列の上下の各ブロック内での行交換または非零スカラー倍、左右の各ブロック内での列交換または非零スカラー倍は、すべて原分解形中の直交行列 $\mathbf{U}_1,\cdots,\mathbf{V}_2$ の定義を適当に修正することにより実現できることに着目し、次の演算を行う：

$$
\begin{array}{c}
\Sigma=\left[\begin{array}{c:ccc}
\mathbf{C}'&\mathbf{0}&\mathbf{S}'&\mathbf{0}\\
\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{I}_{m-k}\\
\hdashline
\mathbf{0}&\mathbf{I}_{p-k}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\\
\mathbf{S}'&\mathbf{0}&-\mathbf{C}'&\mathbf{0}
\end{array}\right]
\begin{pmatrix}k\\m-k\\\cdots\\p-k\\k\end{pmatrix}\quad\rightarrow\quad\text{最後の 2 行を交換}\\
\begin{pmatrix}k&p-k&k&m-k\end{pmatrix}
\end{array}
$$

$$\to \begin{bmatrix} \mathbf{C}' & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{S}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_{m-k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{S}' & \vdots & \mathbf{0} & -\mathbf{C}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{I}_{p-k} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \to 2\text{ 列と 4 列を交換}$$

$$\to \begin{bmatrix} \mathbf{C}' & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{S}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{I}_{m-k} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{S}' & \vdots & \mathbf{0} & -\mathbf{C}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_{p-k} \end{bmatrix} \to 3\text{ 列に} -1\text{を乗じる}$$

$$\to \begin{bmatrix} \mathbf{C}' & \vdots & \mathbf{0} & -\mathbf{S}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{I}_{m-k} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{S}' & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{C}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_{p-k} \end{bmatrix}$$

ゆえに、適当な直交行列 $\mathbf{U}_1',\cdots,\mathbf{V}_2'$ をとれば

(2) $$\begin{array}{c} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1'^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_2'^T \end{bmatrix} \\ (m \quad p) \end{array} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12} \\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22} \end{bmatrix} \begin{array}{c} \begin{bmatrix} \mathbf{V}_1' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2' \end{bmatrix} \\ (k \quad q) \end{array} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} \mathbf{C}' & \vdots & \mathbf{0} & -\mathbf{S}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{I}_{m-k} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{S}' & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{C}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_{p-k} \end{bmatrix} \\ (k \quad m-k \quad k \quad p-k) \end{array} \begin{pmatrix} k \\ m-k \\ \cdots\cdots \\ k \\ p-k \end{pmatrix}$$

これは Paige & Saunders[2] (4.10)式である。とくに $p \ge m = k$ の場合、(2)式は

(3) $$\begin{array}{c} \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1'^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_2'^T \end{bmatrix} \\ (m \quad p) \end{array} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12} \\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22} \end{bmatrix} \begin{array}{c} \begin{bmatrix} \mathbf{V}_1' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2' \end{bmatrix} \\ (k \quad q) \end{array} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} \mathbf{C}' & \vdots & -\mathbf{S}' & \mathbf{0} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \mathbf{S}' & \vdots & \mathbf{C}' & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{I}_{p-k} \end{bmatrix} \\ (k \quad k \quad p-k) \end{array} \begin{pmatrix} k \\ \cdots\cdots \\ k \\ p-k \end{pmatrix}$$

となる。これが Stewart 型 CS 分解（Stewart [4], pp. 657-659, Theorem A.1）である。

以上を振り返ると、薄型 CS 分解（前節(10)式）の上に Stewart 型分解(3)式があり、その上に P-S 型 CS 分解の特別の場合(2)が位置し、その上に最も一般的な P-S 型 CS 分解 12.1 節(1)

式が位置していることがわかる（12.1 節当初でもこのことに言及している）。

さて、直交行列をブロックに区分けし、個々のブロックの特異値を考える必要性はどんな場合に起るのか？これ以降は CS 分解の応用を考えることにする。

12.4　正射影

本節の主題「正射影」はこれ以降の話しへの予備知識として必要である。正射影とは、簡単にいえば、「任意点から与えられた部分空間へ垂線を下す演算」と考えてよい。この演算は前レッスンにおいて、最小自乗法に関連して出てきている（レッスン 11、11.8 節）。

以下において正射影の基礎知識をまとめてのべる。まずは定義から： $\mathbf{P}=\mathbf{P}^T\mathbf{P}$ を満たす n 次行列 $\mathbf{P}$ を<u>正射影</u> orthogonal projection という。与えられた部分空間を $R(\mathbf{P})$ としてもつよう正射影をその部分空間上への正射影ともいう。ここに $R(\cdots)$ は $\cdots$ の値域を表す。とくに、$\mathbf{P}=\mathbf{0},\mathbf{I}$ は、それぞれ、$\{\mathbf{0}\},\mathbf{R}^{n\times 1}$ 上への正射影を表す。

$\mathbf{P}$ を正射影とすれば、以下(a)-(e)が成り立つ（証明は後述）：

(a) $\mathbf{I}-\mathbf{P}$ も正射影を表す。また、$\mathbf{P}^T=\mathbf{P}$ （対称性）、$\mathbf{P}^2=\mathbf{P}$ （<u>ベキ等性</u> idempotency）、
$R(\mathbf{I}-\mathbf{P})=R(\mathbf{P})^{\perp}$ （すなわち、$\mathbf{I}-\mathbf{P}$ は $R(\mathbf{P})$ の直交補空間 $R(\mathbf{P})^{\perp}$ 上への正射影）、
$R(\mathbf{I}-\mathbf{P})^{\perp}=R(\mathbf{P})$ （すなわち、$\mathbf{P}$ は $R(\mathbf{I}-\mathbf{P})$ の直交補空間 $R(\mathbf{I}-\mathbf{P})^{\perp}$ 上への正射影）。

(b) $0<k\equiv\dim R(\mathbf{P})\le n$ とし、$\{\mathbf{w}_1,\cdots,\mathbf{w}_k\}$ を $R(\mathbf{P})$ の任意基底、$\mathbf{W}_1\equiv\left[\mathbf{w}_1\cdots\mathbf{w}_k\right]$ とすれば

（$R(\mathbf{P})=R(\mathbf{W}_1)$ に注意）、$\mathbf{P}=\mathbf{W}_1(\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{W}_1)^{-1}\mathbf{W}_1{}^T$ と書ける。これは、与えられた部分空間上への正射影は一つしかないこと、すなわち、正射影 $\mathbf{P}_1,\mathbf{P}_2$ に対して、$\mathbf{P}_1=\mathbf{P}_2\leftrightarrow R(\mathbf{P}_1)=R(\mathbf{P}_2)$ が成り立つことを示す。

(c) (b)において $\{\mathbf{w}_1,\cdots,\mathbf{w}_k\}$ を正規直交系にとり、これを $\mathbf{R}^{n\times 1}$ の正規直交基底に拡張したもの

を $\{\mathbf{w}_1,\cdots,\mathbf{w}_k,\mathbf{w}_{k+1},\cdots,\mathbf{w}_n\}$ とし、$\mathbf{W}=\left[\mathbf{w}_1\cdots\mathbf{w}_n\right]\in\mathbf{R}^{n\times n}$ （$\mathbf{W}^T\mathbf{W}=\mathbf{I}_n$）とおけば、$\mathbf{P}$ は

$\mathbf{P}=\mathbf{W}_1\mathbf{W}_1{}^T=\mathbf{W}\begin{bmatrix}\mathbf{I}_k & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}\mathbf{W}^T$ と書ける。これは $\mathbf{P}$ の特異値分解を表す（シュール分解でもある）。

(d) $\mathbf{P}\ne\mathbf{0}$ なら $\|\mathbf{P}\|=1$

(e) 任意の $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ に対して $\|\mathbf{x}-\mathbf{P}\mathbf{x}\|\le\|\mathbf{x}-\mathbf{P}\mathbf{y}\|$ が成り立つ。すなわち、$\mathbf{P}\mathbf{x}$ は $\mathbf{x}$ から最短距離にある $R(\mathbf{P})$ 上の点を表し、$\mathbf{x}-\mathbf{P}\mathbf{x}\perp R(\mathbf{P})$ も成り立つ。この意味において、$\mathbf{P}\mathbf{x}$ は $\mathbf{x}$ から $R(\mathbf{P})$ 上に下した垂線の足を表す。（実はこの逆も真である：問題 12.9 参照。）

証明　(a)　まず、$\mathbf{P}$ は正射影 $\rightarrow\mathbf{P}=\mathbf{P}^T\mathbf{P}\rightarrow\mathbf{P}^T=\mathbf{P}\rightarrow\mathbf{P}=\mathbf{P}^2$ ($\therefore$ $\mathbf{P}$ は $R(\mathbf{P})$ 上での恒等変換)。

これを使うと、$\mathbf{I}-\mathbf{P}=(\mathbf{I}-\mathbf{P})^T(\mathbf{I}-\mathbf{P})$ が出るから、$\mathbf{I}-\mathbf{P}$ も正射影を表す。$R(\mathbf{I}-\mathbf{P})=R(\mathbf{P})^{\perp}$ を示そう：$\mathbf{b}\in R(\mathbf{I}-\mathbf{P})\leftrightarrow$ (*) $\mathbf{b}=(\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{x}$ と書ける $\leftrightarrow \mathbf{Pb}=\mathbf{0}$（$\because\ \rightarrow$：(*)の左から $\mathbf{P}$ を乗じる、$\leftarrow$：$\mathbf{b}=(\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{b}$）$\leftrightarrow$ すべての $\mathbf{y}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ に対して $0=\mathbf{y}^T\mathbf{Pb}=\mathbf{y}^T\mathbf{P}^T\mathbf{b}=(\mathbf{Py})^T\mathbf{b}\leftrightarrow$ $\mathbf{b}\perp RB$ $\mathbf{b}\perp R(\mathbf{P})\leftrightarrow \mathbf{b}\in R(\mathbf{P})^{\perp}$。

(b) $R(\mathbf{I}-\mathbf{P})=R(\mathbf{P})^{\perp}$（(a)で証明済み）より、任意の $\mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ に対して、$\mathbf{x}-\mathbf{Px}\perp R(\mathbf{P})$、すなわち、(†) $\mathbf{W}_1{}^T(\mathbf{x}-\mathbf{Px})=\mathbf{0}$ が成り立つ。また一般に、$\mathbf{y}\perp R(\mathbf{P})\leftrightarrow \mathbf{W}_1{}^T\mathbf{y}=\mathbf{0}$ ゆえ、$\mathbf{y}^T\mathbf{W}_1=\mathbf{0}\rightarrow \mathbf{y}^T\mathbf{Px}=0$ が成り立つ。これは方程式(††) $\mathbf{W}_1\mathbf{z}=\mathbf{Px}$ が $\mathbf{z}$ に関して可解であることを示す。これを (†) に代入すれば $\mathbf{W}_1{}^T(\mathbf{x}-\mathbf{W}_1\mathbf{z})=\mathbf{0}$ となるから、これを $\mathbf{z}$ について解けば、$\mathbf{z}=(\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{W}_1)^{-1}\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{x}$ が出る。ここに $k\times k$ 行列 $\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{W}_1$ は確かに可逆行列を表す（実際、$rank(\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{W}_1)=rank(\mathbf{W}_1)=k$）。この $\mathbf{z}$ を (††) に代入すれば $\mathbf{Px}=\mathbf{W}_1(\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{W}_1)^{-1}\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{x}$ が出る。$\mathbf{x}$ は任意であったから、これは $\mathbf{P}=\mathbf{W}_1(\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{W}_1)^{-1}\mathbf{W}_1{}^T$ を示す。

(c) (b)より従う。

(d) (c)で得られた特異値分解から従う。

（別証）$\|\mathbf{x}\|=1$ を満たす任意の $\mathbf{x}\in\mathbf{R}^{n\times 1}$ に対して $\mathbf{x}=\mathbf{Px}+(\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{x}\equiv\mathbf{y}+\mathbf{z}$ と分解すれば $\mathbf{y}^T\mathbf{z}=(\mathbf{Px})^T(\mathbf{I}-\mathbf{Px})=\mathbf{x}^T\mathbf{P}^T(\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{x}=\mathbf{x}^T\cdot\mathbf{0}\cdot\mathbf{x}=0$ ($\because \mathbf{P}^T=\mathbf{P},\ \mathbf{P}^2=\mathbf{P}$) ゆえ、$1=\|\mathbf{x}\|^2=\|\mathbf{y}\|^2+\|\mathbf{z}\|^2$。ゆえに、$\|\mathbf{y}\|^2=\|\mathbf{Px}\|^2=1-\|\mathbf{z}\|^2\le 1$。これより $\|\mathbf{P}\|\le 1$。他方、$\|\mathbf{P}\|=\|\mathbf{P}\cdot\mathbf{P}\|\le\|\mathbf{P}\|^2$。$\mathbf{P}\ne\mathbf{0}$ ゆえ $\|\mathbf{P}\|>0$。ゆえに $1\le\|\mathbf{P}\|$。）

(e) $\|\mathbf{x}-\mathbf{Py}\|^2=\|\mathbf{x}-\mathbf{Px}+\mathbf{Px}-\mathbf{Py}\|^2=\|\mathbf{x}-\mathbf{Px}\|^2+\|\mathbf{Px}-\mathbf{Py}\|^2\ge\|\mathbf{x}-\mathbf{Px}\|^2$

($\because \mathbf{x}-\mathbf{Px}\perp\mathbf{Px}-\mathbf{Py}$ $\because (\mathbf{I}-\mathbf{P})^T\mathbf{P}=\mathbf{0}$)

これより、$\mathbf{Px}\ne\mathbf{Py}$ なら $\|\mathbf{x}-\mathbf{Py}\|^2>\|\mathbf{x}-\mathbf{Px}\|^2$ となる。ゆえに $\mathbf{Px}$ は $R(\mathbf{P})$ 内のベクトルのうち、$\mathbf{x}$ から最短距離にある唯一つのベクトルを表す。■

12.5 部分空間間の距離

この節では CS 分解に応用事例として、部分空間間の距離の評価について考える。

まず、S_1,S_2 を $\mathbf{R}^{n\times 1}$ の部分空間、$\mathbf{P}_1,\mathbf{P}_2$ を、それぞれ、S_1,S_2 上への正射影とすれば、

(1)　$dist(S_1, S_2) \equiv \|\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2\|$

を S_1, S_2 間の<u>距離</u> distance という。前節で示したように、与えられた部分空間とその上への正射影は 1 対 1 に対応するから、この定義に曖昧性はない。とくに

(2)　$dist(S_1, S_1^{\perp}) = 1$（∵左辺＝$\|\mathbf{P}_1 - (\mathbf{I} - \mathbf{P}_1)\|$＝1、前節(a)参照）。

また、$dist(\cdot\,,\,\cdot)$ は明らかに距離の公理を満たす：S_1, S_2, S_3 を $\mathbf{R}^{n\times 1}$ 内の部分空間とすれば、

(3)　$dist(S_1, S_2) \geq 0;\quad dist(S_1, S_2) = 0 \leftrightarrow S_1 = S_2$

(4)　$dist(S_1, S_2) = dist(S_2, S_1)$

(5)　$dist(S_1, S_2) + dist(S_2, S_3) \geq dist(S_1, S_3)$（3 角不等式）

以下、$dist(S_1, S_2)$ を評価する作業に入るが、S_1, S_2 の一方が $\{\mathbf{0}\}$ または $\mathbf{R}^{n\times 1}$ の場合は簡単である（前節(a)、(d)参照）：

(5)　$dist(S_1, \{\mathbf{0}\}) = \|\mathbf{P}_1 - \mathbf{0}\| = 1$（$S_1 \neq \{\mathbf{0}\}$）、$dist(S_1, \mathbf{R}^{n\times 1}) = \|\mathbf{P}_1 - \mathbf{I}\| = 1$（$S_1 \neq \mathbf{R}^{n\times 1}$）

ゆえに、$0 < \dim S_1 \equiv m < n,\ 0 < \dim S_2 \equiv k < n$ の場合のみについて考えれば十分である。そこで、$\{\mathbf{w}_1, \cdots, \mathbf{w}_m\}$ を S_1 の正規直交基底、これを全空間の正規直交基底に拡張したものを $\{\mathbf{w}_1, \cdots, \mathbf{w}_m, \cdots, \mathbf{w}_n\}$、$\{\mathbf{z}_1, \cdots, \mathbf{z}_k\}$ を S_2 の正規直交基底、これを全空間の正規直交基底に拡張したものを $\{\mathbf{z}_1, \cdots, \mathbf{z}_k, \cdots, \mathbf{z}_n\}$ とし、

$$\mathbf{W}_1 = [\mathbf{w}_1, \cdots, \mathbf{w}_m],\ \mathbf{W}_2 = [\mathbf{w}_{m+1}, \cdots, \mathbf{w}_n],\ \mathbf{W} = [\mathbf{w}_1, \cdots, \mathbf{w}_n] = [\mathbf{W}_1 \vdots \mathbf{W}_2]$$

$$\mathbf{Z}_1 = [\mathbf{z}_1, \cdots, \mathbf{z}_k],\ \mathbf{Z}_2 = [\mathbf{z}_{k+1}, \cdots, \mathbf{z}_n],\ \mathbf{Z} = [\mathbf{z}_1, \cdots, \mathbf{z}_n] = [\mathbf{Z}_1 \vdots \mathbf{Z}_2]$$

とすれば、$\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2$ は前節(c)により

(6)　$\mathbf{P}_1 = \mathbf{W}_1\mathbf{W}_1^T$、$\mathbf{P}_2 = \mathbf{Z}_1\mathbf{Z}_1^T$

によって与えられる。すると、$dist(S_1, S_2)$ について以下の評価が成り立つ（証明は後述）：

(7)　$dist(S_1, S_2) = \|\mathbf{W}_1\mathbf{W}_1^T - \mathbf{Z}_1\mathbf{Z}_1^T\| = \max\{\|\mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_2\|, \|\mathbf{Z}_1^T\mathbf{W}_2\|\}$

(8)　$dist(S_1, S_2^{\perp}) = \|\mathbf{W}_1\mathbf{W}_1^T - \mathbf{Z}_2\mathbf{Z}_2^T\| = \max\{\|\mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_1\|, \|\mathbf{W}_2^T\mathbf{Z}_2\|\}$

(9)　$\dim S_1 = \dim S_2$ なら、$dist(S_1, S_2) = \|\mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_2\| = \|\mathbf{Z}_1^T\mathbf{W}_2\| = \sqrt{1 - \sigma_{\min}{}^2(\mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_1)}\ \ \leq 1$

(10)　$\dim S_1 \neq \dim S_2$ なら、$dist(S_1, S_2) = 1$

(11)　$0 \leq dist(S_1, S_2) \leq 1$

証明　まず、$\mathbf{W}_1^T\mathbf{W}_1=\mathbf{I}_m, \mathbf{W}_1^T\mathbf{W}_2=\mathbf{0}, \mathbf{W}_2^T\mathbf{W}_2=\mathbf{I}_{n-k},\cdots$ ゆえ、

$$\mathbf{W}^T(\mathbf{W}_1\mathbf{W}_1^T-\mathbf{Z}_1\mathbf{Z}_1^T)\mathbf{Z}=\begin{bmatrix}\mathbf{W}_1^T\\ \mathbf{W}_2^T\end{bmatrix}(\mathbf{W}_1\mathbf{W}_1^T-\mathbf{Z}_1\mathbf{Z}_1^T)\begin{bmatrix}\mathbf{Z}_1 & \mathbf{Z}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{0} & \mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_2\\ -\mathbf{W}_2^T\mathbf{Z}_1 & \mathbf{0}\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{W}^T(\mathbf{W}_1\mathbf{W}_1^T-\mathbf{Z}_2\mathbf{Z}_2^T)\mathbf{Z}=\begin{bmatrix}\mathbf{W}_1^T\\ \mathbf{W}_2^T\end{bmatrix}(\mathbf{W}_1\mathbf{W}_1^T-\mathbf{Z}_2\mathbf{Z}_2^T)\begin{bmatrix}\mathbf{Z}_1 & \mathbf{Z}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_1 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & -\mathbf{W}_2^T\mathbf{Z}_2\end{bmatrix}$$

$\mathbf{W}^T\mathbf{W}=\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}=\mathbf{I}_n$ に注意してノルムをとれば、前レッスン 11.6 節(X)(XI)により(7)(8)が出る。

(9)(10)の証明には $\mathbf{W}^T\mathbf{Z}$（これも直交行列）を計算し、P-S 型 CS 分解を使う！実際、

$$\mathbf{W}^T\mathbf{Z}=\begin{bmatrix}\mathbf{W}_1^T\\ \mathbf{W}_2^T\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{Z}_1 & \mathbf{Z}_2\end{bmatrix}=\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_1 & \mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_2\\ \mathbf{W}_2^T\mathbf{Z}_1 & \mathbf{W}_2^T\mathbf{Z}_2\end{bmatrix}\begin{pmatrix}m\\ n-m\equiv p>0\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix}k & n-k\equiv q>0\end{pmatrix}\end{array}$$

に P-S 型 CS 分解を適用すると

$$(\dagger)\quad \begin{array}{c}\begin{bmatrix}\mathbf{U}_1^T & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_2^T\end{bmatrix}\\ (m\quad p)\end{array}\begin{bmatrix}\mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_1 & \mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_2\\ \mathbf{W}_2^T\mathbf{Z}_1 & \mathbf{W}_2^T\mathbf{Z}_2\end{bmatrix}\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\mathbf{V}_1 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{V}_2\end{bmatrix}\\ (k\quad q)\end{array}\begin{pmatrix}m\\ p\end{pmatrix}$$

$$=\begin{array}{c}\left[\begin{array}{ccc|ccc}\mathbf{I} & & & \mathbf{0}_S^T & & \\ & \mathbf{C} & & & \mathbf{S} & \\ & & \mathbf{0}_C & & & \mathbf{I}\\ \hline \mathbf{0}_S & & & \mathbf{I} & & \\ & \mathbf{S} & & & -\mathbf{C} & \\ & & \mathbf{I} & & & \mathbf{0}_C^T\end{array}\right]\begin{pmatrix}r\\ s\\ m-r-s\\ \hline p-k+r\\ s\\ k-r-s\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix}r & s & k-r-s & p-k+r & s & m-r-s\end{pmatrix}\end{array}\equiv\begin{bmatrix}\Sigma_{11} & \Sigma_{12}\\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22}\end{bmatrix}$$

が得られる（記号については 12.1 節参照)。ここに、$\mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_1$、$\mathbf{W}_2^T\mathbf{Z}_1$、$\mathbf{W}_1^T\mathbf{Z}_2$、$\mathbf{W}_2^T\mathbf{Z}_2$ の特異値は、それぞれ、Σ_{11}、Σ_{21}、Σ_{12}、Σ_{22} の特異値と一致する

まず、$m=\dim S_1=\dim S_2=k$ なら（$t\equiv m-r-s=k-r-s$）、

$$\Sigma_{11}=\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\mathbf{I} & & \\ & \mathbf{C} & \\ & & \mathbf{0}_C\end{bmatrix}\begin{pmatrix} r \\ s \\ t\end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} r & s & t\end{pmatrix}\end{array}\qquad \Sigma_{21}=\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\mathbf{0}_S & & \\ & \mathbf{S} & \\ & & \mathbf{I}\end{bmatrix}\begin{pmatrix} p-k+r \\ s \\ t\end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} r & s & t\end{pmatrix}\end{array}\qquad \Sigma_{12}=\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\mathbf{0}_S{}^T & & \\ & \mathbf{S} & \\ & & \mathbf{I}\end{bmatrix}\begin{pmatrix} r \\ s \\ t\end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} r & s & t\end{pmatrix}\end{array}$$

となる。視察により

$$\left\|\mathbf{W}_2{}^T\mathbf{Z}_1\right\|=\sigma_{\max}(\Sigma_{21})=\sigma_{\max}(\Sigma_{12})=\left\|\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{Z}_2\right\|=\sqrt{1-\sigma_{\min}{}^2(\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{Z}_1)}\quad(\because \mathbf{C}^2+\mathbf{S}^2=\mathbf{I})$$

が得られる。$m=\dim S_1\neq\dim S_2=k$ なら、分解形(†)における Σ_{21}、Σ_{12} の少なくとも一方の右下隅に必ず“1”が存在する（$\mathbf{I}_{k-r-s}$、$\mathbf{I}_{m-r-s}$ の一方は空ブロックではない)。ゆえに

$$1=\max\{\left\|\mathbf{W}_2{}^T\mathbf{Z}_1\right\|,\left\|\mathbf{W}_1{}^T\mathbf{Z}_2\right\|\}=dist(S_1,S_2)\text{。}\blacksquare$$

例 1 $\left\|\mathbf{w}_1\right\|=\left\|\mathbf{z}\right\|_1=1,\ \mathbf{w}_1{}^T\mathbf{z}_1=\cos\theta\geq 0$（$0\leq\theta\leq\pi/2$、$\mathbf{w}_1,\mathbf{z}_1\in\mathbf{R}^{3\times 1}$）とし、

$S_1=span\{\mathbf{w}_1\},\ S_2=span\{\mathbf{z}_1\}$ とすれば

$$dist(S_1,S_2)=\sqrt{1-\sigma_{\min}{}^2(\mathbf{w}_1{}^T\mathbf{z}_1)}=\sqrt{1-\cos^2\theta}=\sin\theta$$

ゆえに、S_1,S_2 間の距離とは、それぞれの表す直線のなす角を θ とすれば、$\sin\theta$ に等しい。■

12.6　$\mathbf{AB}^{-1}$ 型行列の特異値分解

この節では、CS 分解の巧妙な応用例として、$\mathbf{AB}^{-1}$ 型行列の特異値分解を考える。ここに $\mathbf{A}:m\times n,\ \mathbf{B}:n\times n$ とし、$\mathbf{B}^{-1}$ の存在を仮定する。$\mathbf{B}^{-1}$ の計算を避けつつ行う点がポイントである。これは一般化特異値分解 generalized singular value decomposition, GSVD（Paige-Saunders[2]）、または商特異値分解 quotient singular value decomposition , QSVD（Paige and Wei [3]）の特別の場合を表す。このような分解は最小自乗問題

「$f(\mathbf{x})=\left\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\right\|^2+\lambda^2\left\|\mathbf{Bx}-\mathbf{d}\right\|^2$ ＝最小」の最適解が λ の変化にどう反応するか、の解析に必要となることが報告されているが、ここでは立ち入らない。

まず、$\mathbf{C}\equiv\begin{bmatrix}\mathbf{A}\\ \mathbf{B}\end{bmatrix}$ を特異値分解し（これが工夫の第一)、それを

(1)　$\mathbf{P}^T\begin{bmatrix}\mathbf{A}\\ \mathbf{B}\end{bmatrix}\mathbf{Q}=\begin{bmatrix}\mathbf{R}\\ \mathbf{0}\end{bmatrix}$

とする。ここに、$\mathbf{P}:m+n$ 次直交行列、$\mathbf{Q}:n$ 次直交行列、$\mathbf{R}:n$ 次可逆対角行列 (対角成分 >0）である（$\because\ n=rank(\mathbf{B})=rank(\begin{bmatrix}\mathbf{A}\\ \mathbf{B}\end{bmatrix})=rank(\mathbf{R})$）。

つぎに、(1)中の $\mathbf{P}$ を $\mathbf{P}=\begin{bmatrix}\mathbf{P}_{11} & \mathbf{P}_{12}\\ \mathbf{P}_{21} & \mathbf{P}_{22}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}m\\ n\end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}n & m\end{pmatrix}$ と区分けし、第 1 列に P- S 型 CS 分解を施すと

（これが工夫の第二）、

(2)
$$\begin{bmatrix}\mathbf{U}^T & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{V}^T\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{P}_{11}\\ \mathbf{P}_{21}\end{bmatrix}\mathbf{W}=\begin{bmatrix}\mathbf{U}^T\mathbf{P}_{11}\mathbf{W}\\ \mathbf{U}^T\mathbf{P}_{21}\mathbf{W}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{I} & & \\ & \mathbf{C} & \\ & & \mathbf{0}\\ \cdots & \cdots & \cdots\\ \mathbf{0} & & \\ & \mathbf{S} & \\ & & \mathbf{I}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}r\\ s\\ m-r-s\\ \cdots\\ r\\ s\\ n-r-s\end{pmatrix}\equiv\begin{bmatrix}\Sigma_{\mathbf{A}}\\ \cdots\\ \Sigma_{\mathbf{B}}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}m\\ \cdots\\ n\end{pmatrix}$$
$$(m\ \ n)\quad(n)\ (n)\quad(n)\quad(r\quad s\quad n-r-s)\quad(n)$$

が得られる（記号については 12.1 節参照)。ここに、$\Sigma_{\mathbf{A}},\Sigma_{\mathbf{B}}$ は（$\mathbf{A},\mathbf{B}$ ではなく）$\mathbf{P}_{11},\mathbf{P}_{21}$ の特異値分解標準形を表していることに注意。

(1)を $\begin{bmatrix}\mathbf{A}\\ \mathbf{B}\end{bmatrix}\mathbf{Q}=\mathbf{P}\begin{bmatrix}\mathbf{R}\\ \mathbf{0}\end{bmatrix}$ と書き直し、これと(2)から $\mathbf{P}_{11},\mathbf{P}_{21}$ を消去すると、次式が得られる：

(3)
$$\underset{(m\ n\ n)\,(\ n\ )}{\mathbf{U}^T\mathbf{A}\mathbf{X}=\Sigma_{\mathbf{A}}\,(m)}\qquad \underset{(n\ n\ n)\,(\ n\ )}{\mathbf{V}^T\mathbf{B}\mathbf{X}=\Sigma_{\mathbf{B}}\,(n)}\qquad (\mathbf{X}=\mathbf{Q}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{W})$$

後者の左辺は可逆行列を表すから、$\Sigma_{\mathbf{B}}$ も可逆行列を表す。結局この 2 式より $\mathbf{X}$ も消去できて

(4)
$$\mathbf{U}^T(\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1})\mathbf{V}=\Sigma_{\mathbf{A}}\Sigma_{\mathbf{B}}{}^{-1}$$

が得られる。これは $\mathbf{AB}^{-1}$ の特異値分解に他ならない！さらに、$\Sigma_{\mathbf{B}}$ が可逆行列であることを考慮すれば、(2)は実際には

(5)
$$\begin{bmatrix}\mathbf{U}^T & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{V}^T\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{P}_{11}\\ \mathbf{P}_{21}\end{bmatrix}\mathbf{W}=\begin{bmatrix}\mathbf{U}^T\mathbf{P}_{11}\mathbf{W}\\ \mathbf{U}^T\mathbf{P}_{21}\mathbf{W}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{C} & \\ & \mathbf{0}\\ \cdots & \cdots\\ \mathbf{S} & \\ & \mathbf{I}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}s\\ m-s\\ \cdots\\ s\\ n-s\end{pmatrix}=\begin{bmatrix}\Sigma_{\mathbf{A}}\\ \cdots\\ \Sigma_{\mathbf{B}}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}m\\ \cdots\\ n\end{pmatrix}$$
$$(m\ \ n)\quad(n)\ (n)\quad(n)\quad(s\quad n-s)\quad(n)$$

の形をとることがわかる。これより、

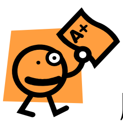
(6) $$\mathbf{U}^T(\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1})\mathbf{V}=\Sigma_{\mathbf{A}}\Sigma_{\mathbf{B}}^{-1}=\begin{array}{c}\begin{bmatrix}\mathbf{CS}^{-1} & \\ & \mathbf{0}\end{bmatrix}\begin{pmatrix} s \\ n-s\end{pmatrix}\\ \begin{pmatrix} s & n-s\end{pmatrix}\end{array}$$

ここで(5)(6)を見ると、$\mathbf{U},\mathbf{V}$ はそれぞれ $\mathbf{P}_{11},\mathbf{P}_{21}$ の特異値分解に必要な直交行列であるが、これが $\mathbf{AB}^{-1}$ の特異値分解に役立っている！これは一見不思議だが、(2)式から出る関係 $\mathbf{AQR}^{-1}=\mathbf{P}_{11}$、$\mathbf{BQR}^{-1}=\mathbf{P}_{21}$ を見ると、$\mathbf{P}_{11},\mathbf{P}_{21}$ は共通の座標変換によって「化けた $\mathbf{A},\mathbf{B}$ の姿」と見なせる。同様に(3)式 $\mathbf{U}^T\mathbf{AX}=\Sigma_{\mathbf{A}}$、$\mathbf{V}^T\mathbf{BX}=\Sigma_{\mathbf{B}}$（$\mathbf{X}=\mathbf{QR}^{-1}\mathbf{W}$）を見ると、これは特異値分解ではないが、$\Sigma_{\mathbf{A}},\Sigma_{\mathbf{B}}$ もそれぞれ「$\mathbf{A},\mathbf{B}$ の化けた姿」と見なせる。この間の事情を Paige and Saunders[2]は "We can ascribe n singular value pairs $(\alpha_i,\beta_i), i=1,\cdots,n$ to $\mathbf{A}$ and $\mathbf{B}$,... " といっている（「$\Sigma_{\mathbf{A}},\Sigma_{\mathbf{B}}$ の対角成分の対 α_i,β_i は $\mathbf{A},\mathbf{B}$ に帰することができる、・・」

例 1 $\begin{bmatrix}\mathbf{A}\\ \mathbf{B}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ \cdots\\ 1\end{bmatrix}$ の特異値分解：$\mathbf{P}^T\begin{bmatrix}\mathbf{A}\\ \mathbf{B}\end{bmatrix}\mathbf{Q}\equiv\begin{bmatrix}a & a\\ -a & a\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sqrt{2}\\ 0\end{bmatrix}\equiv\begin{bmatrix}\mathbf{R}\\ \mathbf{0}\end{bmatrix}$ （$a=1/\sqrt{2}$）

より、$\mathbf{P}=\begin{bmatrix}a & a\\ -a & a\end{bmatrix}\equiv\begin{bmatrix}\mathbf{P}_{11} & \mathbf{P}_{12}\\ \mathbf{P}_{21} & \mathbf{P}_{22}\end{bmatrix}$ だから、$\Sigma_{\mathbf{A}}=\Sigma_{\mathbf{B}}=\begin{bmatrix}a\end{bmatrix}:1\times1$、$\Sigma_{\mathbf{A}}\Sigma_{\mathbf{B}}^{-1}=\begin{bmatrix}1\end{bmatrix}$ となる。これは確かに $\mathbf{AB}^{-1}=\begin{bmatrix}1\end{bmatrix}$ の特異値分解標準形である。■

最後にひとこと：Paige-Saunders 型 CS 分解最大の特徴は、全く任意の区分けを許している点と特異値を 0、1、その他、に陽に区別している点である。このため、特定ブロックの標準形がわかれば、他ブロックの標準形も簡単に構築できるし、応用上も使いやすい。部分空間間の距離の評価、$\mathbf{B}^{-1}$ を計算することなく $\mathbf{AB}^{-1}$ 型行列の特異値分解を実現する算法、への P-S 型 CS 分解の応用は意外性があっておもしろい。



腕試し問題

問題 12.1（Paige-Saunders 型 CS 分解）

(1)　ある 9 次直交行列 $\mathbf{Q}$ を

$$\mathbf{Q}=\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12}\\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}m\times k & \vdots & m\times q\\ \cdots\cdots & \vdots & \cdots\cdots\\ p\times k & \vdots & p\times q\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\times 4 & \vdots & 3\times 5\\ \cdots\cdots & \vdots & \cdots\cdots\\ 6\times 4 & \vdots & 6\times 5\end{bmatrix}\ (m+p=k+q=9)$$

に分割したところ、$\mathbf{Q}_{11}$ の特異値は $\{1,c_2,0\}(0<c_2<1)$ によって与えられるという。Paige-Saunders 型 CS 分解の標準形 Σ を求めよ。

(2) ある 5 次直交行列の P-G 標準形左上ブロックは $\Sigma_{11}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & c_2 & 0\end{bmatrix}$（$0<c_2<1$）によって与えられるという。標準形 Σ を求めよ。

(3)　ある 3 次直交行列の P-G 標準形右上ブロックは $\Sigma_{12}=\begin{bmatrix}0\end{bmatrix}:1\times 1$ であるという。Σ を求めよ。

（略解：(1) $r=s=1,\mathbf{C}=\begin{bmatrix}c_2\end{bmatrix}$、$\mathbf{S}=\begin{bmatrix}s_2\end{bmatrix}(s_2=\sqrt{1-c_2{}^2})$ だから、標準形は

$$\begin{bmatrix}\mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0}_S{}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{C} & \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & -\mathbf{S} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0}_C & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}\\ \cdots & \cdots & \cdots & & \cdots & \cdots & \cdots\\ \mathbf{0}_S & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{S} & \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{C} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0}_C{}^T\end{bmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\\1\\ \cdots\\3\\1\\2\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}1 & 1 & 2 & & 3 & 1 & 1\end{pmatrix}$$

(2)
$$\begin{bmatrix}\mathbf{I}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{C} & \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{S}\\ \cdots & \cdots & \cdots & & \cdots & \cdots\\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{I}_1 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{S} & \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{0} & -\mathbf{C}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_1 & \vdots & \mathbf{0} & \mathbf{0}\end{bmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\\ \cdots\\1\\1\\1\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 1\end{pmatrix}$$

(3)
$$\begin{bmatrix}1 & 0 & \vdots & 0\\ \cdots & \cdots & & \cdots\\ 0 & 0 & \vdots & 1\\ 0 & 1 & \vdots & 0\end{bmatrix}\begin{pmatrix}1\\ \cdots\\1\\1\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}1 & 1 & 1\end{pmatrix}$$
■）

問題 12.2　与えられた 4 x 3 実行列 $\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}\mathbf{y}_1 & \mathbf{y}_2 & \mathbf{y}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x & x & x\\ x & x & x\\ x & x & x\\ x & x & x\end{bmatrix}$ に対して $\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}4 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 9\end{bmatrix}$ が成り立つという。$\mathbf{U}^T\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}-2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 3\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$ となるような 4 次直交行列 $\mathbf{U}$ を構築せよ。

（答：$\mathbf{U}=\begin{bmatrix}-\dfrac{\mathbf{y}_1}{2} & \mathbf{u}_2 & \dfrac{\mathbf{y}_3}{3} & \mathbf{u}_4\end{bmatrix}$、ここに $\mathbf{u}_2,\mathbf{u}_4$ は $\mathbf{U}$ の列が正規直交系をなすように選ぶ。■）

問題 12.3　与えられた 3×4 実行列 $\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}\mathbf{y}_1 & \cdots & \mathbf{y}_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x\,x\,x\,x\\x\,x\,x\,x\\x\,x\,x\,x\end{bmatrix}$ に対して

$\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}0&&&\mathbf{0}\\&4&&\\&&0&\\\mathbf{0}&&&9\end{bmatrix}$ という。$\mathbf{U}^T\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}0&0&0&0\\0&2&0&0\\0&0&0&-3\end{bmatrix}$ を満たす 3 次直交行列 $\mathbf{U}$ を構築せよ。

（答：　$\mathbf{Y}$ の形は $\mathbf{Y}=\begin{bmatrix}\mathbf{0} & \mathbf{y}_2 & \mathbf{0} & \mathbf{y}_4\end{bmatrix}$、$\mathbf{y}_2{}^T\mathbf{y}_2=4,\ \mathbf{y}_4{}^T\mathbf{y}_4=9$ ゆえ、$\mathbf{U}=\begin{bmatrix}\mathbf{u}_1 & \dfrac{\mathbf{y}_2}{2} & -\dfrac{\mathbf{y}_4}{3}\end{bmatrix}$ とすればよい。ここに、$\mathbf{u}_1$ は $\{\mathbf{u}_1, \dfrac{\mathbf{y}_2}{2}, -\dfrac{\mathbf{y}_4}{3}\}$ が正規直交系をなすように選ぶ。■）

問題 12.4　与えられた 3 x 4 実行列 $\mathbf{X}=\begin{bmatrix}\mathbf{x}_1\\\mathbf{x}_2\\\mathbf{x}_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x&x&x&x\\x&x&x&x\\x&x&x&x\end{bmatrix}$ に対して $\mathbf{X}\mathbf{X}^T=\begin{bmatrix}4&0&0\\0&0&0\\0&0&9\end{bmatrix}$ が成立するという。$\mathbf{X}\mathbf{V}=\begin{bmatrix}-2&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&3&0&0\end{bmatrix}$ となるような 4 次直交行列 $\mathbf{V}$ を構築せよ。

（答：　$\mathbf{V}=\begin{bmatrix}-\mathbf{x}_1{}^T/2 & \mathbf{v}_2 & \mathbf{x}_3{}^T/3 & \mathbf{v}_4\end{bmatrix}$、ここに $\mathbf{v}_2,\mathbf{v}_4$ は $\mathbf{V}\mathbf{V}^T=\mathbf{I}$ となるように選ぶ。■）

問題 12.6　与えられた 7 x 2 実行列 $\mathbf{Q}=\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_1\\\mathbf{Q}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\times2\\\cdots\\4\times2\end{bmatrix}$ の列は正規直交系をなし、適当な 2 次直交行列 $\mathbf{V}_1$ に対してシュール分解 $\mathbf{V}_1{}^T\mathbf{Q}_1{}^T\mathbf{Q}_1\mathbf{V}_1=\begin{bmatrix}3/4&0\\0&1/4\end{bmatrix}$ が成立するという。

(1)　$\mathbf{V}_1{}^T\mathbf{Q}_2{}^T\mathbf{Q}_2\mathbf{V}_1$ を計算せよ。

(2)　$\mathbf{U}_1{}^T\mathbf{Q}_1\mathbf{V}_1==\begin{bmatrix}\sqrt{3}/2&0\\0&1/2\\0&0\end{bmatrix}\equiv\begin{bmatrix}\mathbf{C}\\\mathbf{0}\end{bmatrix}$ となるような 3 次直交行列 $\mathbf{U}_1$ を構築せよ。

(3)　$\mathbf{U}_2{}^T\mathbf{Q}_2\mathbf{V}_1 = \begin{bmatrix} -1/2 & 0 \\ 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{S} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$ となるような 4 次直交行列 $\mathbf{U}_2$ を構築せよ。

(4)　$\begin{bmatrix} \mathbf{U}_1{}^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{U}_2{}^T \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1 \\ \mathbf{Q}_2 \end{bmatrix}\mathbf{V}_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{S} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$ を検算せよ。

（略解：(1) 列の正規直交性 $\mathbf{Q}_1{}^T\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2{}^T\mathbf{Q}_2 = \mathbf{I}$ と $\mathbf{V}_1$ の直交性より

$$\mathbf{V}_1{}^T\mathbf{Q}_2{}^T\mathbf{Q}_2\mathbf{V}_1 = \mathbf{I} - \mathbf{V}_1{}^T\mathbf{Q}_1{}^T\mathbf{Q}_1\mathbf{V}_1 = \mathbf{I} - \begin{bmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 3/4 \end{bmatrix}$$

(2)　$\mathbf{Q}_1\mathbf{V}_1 \equiv \mathbf{Y} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 & \mathbf{y}_2 \end{bmatrix}$ とおけば、$\mathbf{Y}^T\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{bmatrix}$ だから、

$\mathbf{U}_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1/(\sqrt{3}/2) & \mathbf{y}_2/(1/2) & \mathbf{u}_3 \end{bmatrix}$ をとれば（$\mathbf{u}_3$ は $\mathbf{U}_1$ の列が正規直交系をなすように選ぶ)、

$\mathbf{U}_1{}^T\mathbf{Q}_1\mathbf{V}_1 = \mathbf{U}_1{}^T\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/4 & 0 \\ 0 & 1/2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ となる。

(3)　$\mathbf{Q}_2\mathbf{V}_1 \equiv \mathbf{Y} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{y}_1 & \mathbf{y}_2 \end{bmatrix}$ とし、(2)と同様の手続きを踏めば、$\mathbf{Y}^T\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 3/4 \end{bmatrix}$。ゆえに、

$\mathbf{U}_2 = \begin{bmatrix} -\mathbf{y}_1/(1/2) & -\mathbf{y}_2/(\sqrt{3}/2) & \mathbf{u}_3' & \mathbf{u}_4' \end{bmatrix}$ をとれば（$\mathbf{u}_3', \mathbf{u}_4'$ は $\mathbf{U}_2$ の列が正規直交系をな

すように選ぶ)、$\mathbf{U}_2\mathbf{Q}_2\mathbf{V}_1 = \mathbf{U}_2{}^T\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} -1/2 & 0 \\ 0 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$　(4) 略　■)

問題 12.7　$\mathbf{Q}\equiv\begin{bmatrix}\mathbf{Q}_{11} & \mathbf{Q}_{12}\\ \mathbf{Q}_{21} & \mathbf{Q}_{22}\end{bmatrix}\equiv\left[\begin{array}{cc:ccc}1&0&0&0&0\\0&0&0&-1&0\\ \hdashline 0&0&1&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&0&0&1\end{array}\right]\equiv\begin{bmatrix}\mathbf{C}' & -\mathbf{S}' & \mathbf{0}\\ \mathbf{S}' & \mathbf{C} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_1\end{bmatrix}$

はすでに Stewart 型 CS 分解の標準形をなす。ここに、$\mathbf{C}'=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\end{bmatrix}$, $\mathbf{S}'=\begin{bmatrix}0&0\\0&1\end{bmatrix}$ としている。

この行列の Paige-Saunders 型標準形を求めよ。

（略解：　$\mathbf{Q}_{11}$ の特異値は $\{1,0\}$ であるから $r=1, s=0$ となる。ゆえに、$\mathbf{C}$ は空ブロックを表す。これにより Paige-Saunders 型標準形は次のように確定する：

$$\left[\begin{array}{cc:ccc}1&0&0&0&0\\0&0&0&0&1\\ \hdashline 0&0&1&0&0\\0&0&0&1&0\\0&1&0&0&0\end{array}\right]=\left[\begin{array}{cc:cc}\mathbf{I}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0}_{\mathrm{S}}{}^T & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{0}_{\mathrm{C}} & 0 & \mathbf{I}_1\\ \hdashline \mathbf{0}_{\mathrm{S}} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_2 & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0}_{\mathrm{C}}{}^T\end{array}\right]\begin{pmatrix}1\\1\\ \cdots\\2\\1\end{pmatrix} \quad \blacksquare)$$
$$\begin{pmatrix}1 & 1 & 2 & 1\end{pmatrix}$$

問題 12.8（P-G 型 CS 分解証明への補足）　次の n 次実行列（$n=m+p=k+q$）は直交行列を表すという：

$$\left[\begin{array}{ccc:ccc}\mathbf{I} & & & \mathbf{Y}_{11} & \mathbf{Y}_{12} & \mathbf{Y}_{13}\\ & \mathbf{C} & & & \mathbf{Y}_{22} & \mathbf{Y}_{23}\\ & & \mathbf{0}_{\mathrm{C}} & & & \mathbf{Y}_{33}\\ \hdashline \mathbf{W}_{11} & & & \mathbf{X}_{11} & \mathbf{X}_{12} & \mathbf{X}_{13}\\ \mathbf{W}_{21} & \mathbf{W}_{22} & & \mathbf{X}_{21} & \mathbf{X}_{22} & \mathbf{X}_{23}\\ \mathbf{W}_{31} & \mathbf{W}_{32} & \mathbf{W}_{33} & \mathbf{X}_{31} & \mathbf{X}_{32} & \mathbf{X}_{33}\end{array}\right]\begin{pmatrix}r\\s\\m-r-s\\ \cdots\cdots\\p-k+r\\s\\k-r-s\end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix}r & s & k-r-s & p-k+r & s & m-r-s\end{pmatrix}$$

（空欄は 0 ブロックを表す）ここに $\mathbf{W}_{22},\mathbf{W}_{33}$ は対角成分が負でないような下三角行列、$\mathbf{Y}_{22},\mathbf{Y}_{33}$ は対角成分が負でない上三角行列、$\mathbf{C}$ は $\mathbf{C}=\begin{bmatrix}c_{r+1} & & \mathbf{0}\\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & c_{r+s}\end{bmatrix}$ $(1>c_{r+1}\geq\cdots\geq c_{r+s}>0)$ 型の行列、$\mathbf{0}_{\mathrm{C}}$ は 0 行列を表す。

すると、上の行列は実は次の形でなければならないことを示せ：

$$\begin{array}{c c}
\left[\begin{array}{ccc:ccc}
\mathbf{I} & & & \mathbf{0}_{\mathrm{S}}{}^{T} & & \\
 & \mathbf{C} & & & \mathbf{S} & \\
 & & \mathbf{0}_{\mathrm{C}} & & & \mathbf{I} \\
\hdashline
\mathbf{0}_{\mathrm{S}} & & & \mathbf{X}_{11} & & \\
 & \mathbf{S} & & & -\mathbf{C} & \\
 & & \mathbf{I} & & & \mathbf{0}_{\mathrm{C}}{}^{T}
\end{array}\right]
&
\left(\begin{array}{l}
r \\ s \\ m-r-s \\ \hdashline p-k+r \\ s \\ k-r-s
\end{array}\right) \\
\left(\begin{array}{cccccc} r & s & k-r-s & p-k+r & s & m-r-s \end{array}\right) &
\end{array}$$

ただし、$\mathbf{S}=\begin{bmatrix} s_{r+1} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & s_{r+s} \end{bmatrix}$ $(0<s_{r+1}\le\cdots\le s_{r+s}<1,\ s_i=\sqrt{1-c_i{}^2})$、$\mathbf{X}_{11}$ は $p-k+r$ 次直交行列を表す。

（略解：　与えられた行列の直交性と $\mathbf{W}_{22},\mathbf{W}_{33},\mathbf{Y}_{22},\mathbf{Y}_{33}$ の形に関する仮定から出る。与えられた行列は標準形の一歩手前の形を表す。$\mathbf{X}_{11}$ は直交行列ゆえ、これを左または右へ括り出せば標準形が得られることは 12.2 節の証明で示した。この問題は左上ブロックに特異値分解 $\mathbf{U}_1{}^T\mathbf{Q}_{11}\mathbf{V}_1=\begin{bmatrix}\mathbf{I}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&\mathbf{C}&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&\mathbf{0}&\mathbf{0}\end{bmatrix}$ を施し、$\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1$（$\mathbf{V}_1$ は今や既知！）に QR 分解を施して $\mathbf{U}_2{}^T(\mathbf{Q}_{21}\mathbf{V}_1)=$ 下三角行列とし、$\mathbf{U}_1{}^T\mathbf{Q}_{12}$（$\mathbf{U}_1$ も今や既知！）に QR 分解を施して $(\mathbf{U}_1{}^T\mathbf{Q}_{21})\mathbf{V}_2=$ 上三角行列とすれば、これらは実は特異値分解を表すのみならず、$\mathbf{U}_2{}^T\mathbf{Q}_{22}\mathbf{V}_2$ も特異値分解直前の形をしていることを示す。QR 分解はシュール分解に関するレッスンの中で説明した。■）

問題 12,9 （正射影）12.4 節(e)の逆：与えられた $n\times n$ 行列 $\mathbf{P}$、任意の $\mathbf{x},\mathbf{y}\in\mathbf{R}^{n\times1}$ に対して $\|\mathbf{x}-\mathbf{P}\mathbf{x}\|\le\|\mathbf{x}-\mathbf{P}\mathbf{y}\|$ が成り立つという。$\mathbf{P}^T(\mathbf{I}-\mathbf{P})=\mathbf{0}$ を示せ。すなわち、$\mathbf{P}$ は正射影を表す。

（略証　$\mathbf{P}^T(\mathbf{I}-\mathbf{P})\ne\mathbf{0}$ と仮定すれば矛盾が起ることを示せばよい。実際、

$\mathbf{0}\ne\mathbf{P}^T(\mathbf{I}-\mathbf{P})\mathbf{x}_0\equiv\mathbf{u}_0$（$\mathbf{x}_0\in\mathbf{R}^{n\times1}$）とすれば、若干の計算後

$\|\mathbf{x}_0-\mathbf{P}(\mathbf{x}_0+\varepsilon\mathbf{u}_0)\|^2=\|\mathbf{x}_0-\mathbf{P}\mathbf{x}_0\|^2-\varepsilon(2\|\mathbf{u}_0\|^2-\varepsilon\|\mathbf{P}\mathbf{u}_0\|^2)$ が得られる。$\|\mathbf{u}_0\|>0$ だから、十分小さい $\varepsilon>0$ に対して、右辺 $<\|\mathbf{x}_0-\mathbf{P}\mathbf{x}_0\|^2$ となる。これは与えられた条件に矛盾する。■）