Lineární algebra II (pro fyziky)

Singulární rozklad

Dalibor Šmíd

MFF UK

Z minulé přednášky připomeňme, že

- Neleží-li vektor $\mathbf{b}$ v prostoru $\operatorname{Im} A$, nemá soustava $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ řešení.
- Lze pak ale hledat $\mathbf{x}$ tak, aby $\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$ bylo minimální.
- Odpovídá to řešení příslušné normální soustavy $A^+ A\mathbf{x} = A^+\mathbf{b}$.
- $A\mathbf{x}$ je pak projekce $\mathbf{b}$ do sloupcového prostoru A.
- Pro A s LN sloupci z toho plyne $[P_{\operatorname{Im} A}]_K^K = A(A^+A)^{-1}A^+$, tedy vzorec pro matici projekce bez nutnosti hledat ortogonální bázi prostoru $\operatorname{Im} A$
- Soustavě $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ se říká přeurčená a řešení příslušné normální soustavy je nazýváno aproximativním řešením přeurčené soustavy (nejde o aproximaci v numerickém smyslu).

Uvažujme nyní případ soustavy rovnic $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, která má neprázdnou množinu řešení tvaru $\mathbf{x}_p + \operatorname{Ker} A$. Protože

$$\mathbb{C}^n = \operatorname{Ker} A \oplus (\operatorname{Ker} A)^\perp = \operatorname{Ker} A \oplus \operatorname{Im} A^+,$$

můžeme každé řešení soustavy jednoznačně rozložit na součet $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{x}_H$, kde $\mathbf{x}_0 \in \operatorname{Im} A^+$ a $\mathbf{x}_H \in \operatorname{Ker} A$. Protože $\mathbf{x}_0 = P_{\operatorname{Im} A^+}(\mathbf{x})$, je $\|\mathbf{x}_0\| \le \|\mathbf{x}\|$ a tedy $\mathbf{x}_0$ má mezi všemi řešeními soustavy $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ nejmenší normu. Protože $\mathbf{x}_0 \in \operatorname{Im} A^+$, má tvar $\mathbf{x}_0 = A^+\mathbf{z}$ pro nějaké $z \in \mathbb{C}^m$, platí tedy

$$AA^+\mathbf{z} = A\mathbf{x_0} = \mathbf{b}$$

Libovolné řešení $\mathbf{z} \in \mathbb{C}^m$ soustavy $AA^+\mathbf{z} = \mathbf{b}$ dává řešení $\mathbf{x}_0 = A^+\mathbf{z}$ s nejmenší normou. Má-li A LN řádky, je AA^+ regulární a $\mathbf{x}_0 = A^+(AA^+)^{-1}\mathbf{b}$. Je-li $\mathbf{x}$ řešením $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, pak

$$\mathbf{x}_0 = A^+(AA^+)^{-1}A\mathbf{x} = [P_{\operatorname{Im} A^+}]_K^K\,\mathbf{x} \equiv P_{\operatorname{Im} A^+}(\mathbf{x})$$

Pro $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ definujme matici $A^\dagger \in \mathbb{C}^{n\times m}$ jako

- $A^+(AA^+)^{-1}$ pro A s LN řádky:

$$A^\dagger A = [P_{\operatorname{Im} A^+}]_K^K, \quad AA^\dagger = E_m$$

- $(A^+A)^{-1}A^+$ pro A s LN sloupci:

$$A^\dagger A = E_n, \quad AA^\dagger = [P_{\operatorname{Im} A}]_K^K$$

Je to tedy matice inverzní zleva, resp. zprava k matici A. Je-li A regulární, pak $A^\dagger = A^{-1}$. Jsou ♣ to dva nejdůležitější speciální případy následující obecné definice:

Definice

Nechť $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, pak matice $A^\dagger \in \mathbb{C}^{n \times m}$ splňující

1. $AA^\dagger A = A$
2. $A^\dagger A A^\dagger = A^\dagger$
3. $AA^\dagger$ i $A^\dagger A$ jsou hermitovské matice

se nazývá *Moore-Penroseova pseudoinverze* matice A.

Tyto podmínky určují pseudoinverzi jednoznačně ♣, nedávají ale návod, jak ji spočítat pro obecnou matici, která nemá LN řádky ani sloupce. Správnou odpověď v takovém případě poskytne tzv. singulární rozklad, který nyní popíšeme.

Řekneme, že samosdružený operátor $\mathbb{B} : V \to V$ je *pozitivně semidefinitní*, pokud má všechna vlastní čísla nezáporná. To je ekvivalentní ♣ s požadavkem $\forall v \in V : \langle v, \mathbb{B}v \rangle \geq 0$. Každý pozitivně semidefinitní operátor má ♣ jednoznačně definovanou pozitivně semidefinitní odmocninu $\sqrt{\mathbb{B}} : V \to V$, a to předpisem

$$[\mathbb{B}]_C^C = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \\ 0 & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} U^+ \Rightarrow [\sqrt{\mathbb{B}}]_C^C = U \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & \\ 0 & \ddots & \\ & & \sqrt{\lambda_n} \end{pmatrix} U^+$$

(C je nějaká ON báze, U je unitární matice, λ_i vlastní čísla)
Protože $\langle v, \mathbb{A}^*\mathbb{A}v \rangle = \|\mathbb{A}v\|^2 \geq 0$, je $\mathbb{A}^*\mathbb{A}$ pozitivně semidefinitní pro každý operátor $\mathbb{A} : V \to W$. Jeho odmocninu $|\mathbb{A}| := \sqrt{\mathbb{A}^*\mathbb{A}}$ nazýváme *modul operátoru* $\mathbb{A}$. Modul má stejné jádro i hodnost jako původní operátor ♣. Nenulová vlastní čísla modulu $|\mathbb{A}|$ se označují jako *singulární hodnoty operátoru* $\mathbb{A}$. Označují se $\sigma_1, \ldots, \sigma_r$ a konvenčně bývají řazeny sestupně podle velikosti.

Označením $D = \operatorname{diag}_{m\times n}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$ rozumíme obdélníkovou matici, na jejíž diagonále $d_{11}, d_{22}, \dots$ jsou postupně čísla $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r$ a zbytek diagonály i matice je nulový.

Věta

Nechť $\mathbb{A} : V \to W$ je operátor mezi unitárními prostory. Pak existují ON báze $B = (v_i)_1^n$ ve V, $C = (u_i)_1^m$ ve W takové, že $[\mathbb{A}]_B^C = \operatorname{diag}_{m\times n}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$, kde σ_i jsou singulární hodnoty operátoru $\mathbb{A}$.

Důkaz.

Bázi B volme tak, aby vůči ní byl operátor $\mathbb{A}^*\mathbb{A}$ diagonální. Prvních r prvků báze C pak dáno jako $u_i := \frac{1}{\sigma_i}\mathbb{A}v_i$. Ověřme ♣, že $(u_1, \dots, u_r)$ je ON množina a doplňme ji na ON bázi W. Pak $\mathbb{A}v_i = \sigma_i u_i$ pro $i \le r$ a nula jindy, protože $\operatorname{Ker}\mathbb{A} = \operatorname{Ker}\mathbb{A}^*\mathbb{A}$. Tedy matice $[\mathbb{A}]_B^C$ má požadovaný tvar. $\square$

Aplikací na zobrazení F_A určené maticí $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ dostáváme její *singulární (SVD) rozklad*:

$$A = U\Sigma V^+ = \sigma_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^+ + \ldots + \sigma_r \mathbf{u}_r \mathbf{v}_r^+,$$

kde $U = (\mathbf{u}_1|\ldots|\mathbf{u}_m) \in \mathbb{C}^{m\times m}$ a $V = (\mathbf{v}_1|\ldots|\mathbf{v}_n) \in \mathbb{C}^{n\times n}$ jsou unitární matice a $\Sigma = \operatorname{diag}_{m\times n}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$. Můžeme z něj mapříklad vyčíst, co je obrazem jednotkové koule $K_1 := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n | \|x\| = 1\}$ v zobrazení $F_A : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$. Unitární matice V^+ zachovává normu, tedy $V^+(K_1) = K_1$. Násobení maticí Σ převede K_1 na elipsoid ♣ v $\mathbb{R}^m$ s poloosami $\sigma_1, \ldots, \sigma_r$. Další unitární matice U normu a tedy i délky poloos zachová.

SVD rozklad a jeho geometrická interpretace jsou v jádru řady aplikací v analýze dat (PCA), jejich kompresi (low-rank aproximace), posuzování numerické stability (číslo podmíněnosti) a dalších.

Definujeme-li $\Sigma^\dagger := \mathrm{diag}_{n\times m}(\sigma_1^{-1}, \ldots, \sigma_r^{-1})$, snadno ověříme, že $A^\dagger := V\Sigma^\dagger U^+$ splňuje

$$AA^\dagger A = U\Sigma V^+ V\Sigma^\dagger U^+ U\Sigma V^+ = U\Sigma\Sigma^\dagger\Sigma V^+ = U\Sigma V^+ = A$$

a podobně ověříme i zbývající podmínky v definici Moore-Penroseovy pseudoinverze.

Věta

Nechť $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^m$. Pak vektor $A^\dagger\mathbf{b}$ je aproximativním řešením soustavy rovnic $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, které má navíc nejmenší možnou normu.

Dokáže se nejprve pro $A = \Sigma$ (tj. diagonální) a následně využijeme toho, že matice U a V v SVD rozkladu jsou unitární a zachovávají tudíž normu $\clubsuit$.

Singulární rozklad čtvercové matice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ můžeme upravit

$$A = U\Sigma V^+ = UV^+ V\Sigma V^+ = WP,$$

kde $W := UV^+$ je unitární matice a $P := V\Sigma V^+$ je pozitivně semidefinitní hermitovská matice. Plyne odtud ♣

VĚTA

Nechť $\mathbb{A} : V \to V$ *je operátor na unitárním prostoru. Pak existují unitární operátor* $\mathbb{W}$ *a pozitivně semidefinitní samosdružený operátor* $\mathbb{P}$ *takové, že* $\mathbb{A} = \mathbb{W}\mathbb{P}$. *Navíc* $\mathbb{P} = |\mathbb{A}|$ *a pokud je* $\mathbb{A}$ *izomorfismus, pak je* $\mathbb{W}$ *určen jednoznačně.*

Tento tzv. *polární rozklad operátoru* je zobecněním zápisu komplexního čísla v polárních souřadnicích:

$$z = a + ib = \left(\frac{a}{\sqrt{a^2+b^2}} + i \frac{b}{\sqrt{a^2+b^2}} \right) \sqrt{a^2+b^2} = e^{i\alpha} |z|$$

Zde lze $|z|$ chápat jako pozitivně semidefinitní 1×1 matici a $e^{i\alpha} \equiv \cos\alpha + i \sin\alpha$ jako unitární 1×1 matici.