9. přednáška: Singulární rozklad matice
Pseudoinverzní matice

Motivace: V této přednášce si řekneme, jak k matici A typu $k \times n$ nad $\mathbb{R}$ nebo $\mathbb{C}$ najdeme matice P, Q a S takové, že

(1) P je ortogonální (unitární) typu $k \times k$
(2) Q je ortogonální (unitární) typu $n \times n$
(3) S je typu $k \times n$

$$S = \begin{array}{cc} \left(\begin{array}{cccc|c} s_1 & & & 0 & \\ & s_2 & & & 0 \\ & & \ddots & & \\ 0 & & & s_r & \\ \hline & & 0 & & 0 \end{array}\right) & \begin{array}{l} \left.\vphantom{\begin{array}{c} s_1 \\ s_2 \\ \ddots \\ s_r \end{array}}\right\} r \\ \} \, k-r \end{array} \\ \underbrace{\hphantom{s_1 \; s_2 \; \ddots \; s_r}}_{r} \; \underbrace{\hphantom{0}}_{n-r} & \end{array}$$

kde r = hodnost matice A, $s_i > 0$ pro $1 \leq i \leq r$.

(4) Platí
$$A = P \cdot S \cdot Q^* .$$

Tomuto zápisu se říká <u>singulární rozklad</u> matice A. Hraje důležitou roli v aplikacích, např. ve statistice.

<u>Pseudoinverzní matice</u> k matici A typu $k \times n$ je matice $A^{(-1)}$ typu $n \times k$ taková, že

(1) $A^{(-1)} \cdot A$ je matice kolmé projekce prostoru $\mathbb{R}^n$ (nebo $\mathbb{C}^n$) na podprostor kolmý k $\{x \in \mathbb{R}^n, Ax = 0\}$.

(2) $A \cdot A^{(-1)}$ je matice kolmé projekce prostoru $\mathbb{R}^k$ (nebo $\mathbb{C}^k$) na podprostor $\{y \in \mathbb{R}^k, \exists x \in \mathbb{R}^n, y = Ax\}$.

Matice $A^{(-1)}$ vždy existuje a je zobecněním inverzní matice. Jestliže inv. matice A^{-1} existuje, je

$$A^{(-1)} = A^{-1}.$$

K výpočtu lze použít singulární rozklad matice A.

Příklad: Nechť A je matice $k \times n$ (nad $\mathbb{R}$ nebo $\mathbb{C}$), pak

$$A^* = A^T \ (\text{nad } \mathbb{R})$$
$$A^* = \bar{A}^T \ (\text{nad } \mathbb{C})$$

je matice $n \times k$ a platí, že

$A^* A$ je matice $n \times n$

$A A^*$ je matice $k \times k$

Přitom obě jsou symetrické nebo hermitovské.

Nad $\mathbb{R}$: $\quad A^* A = A^T A$

$$(A^T A)^T = A^T (A^T)^T = A^T A. \quad A^T A \text{ je symetrická}$$

Analogicky nad $\mathbb{C}$.

Lemma: Nechť $\varphi : U \to V$ je lin. zobrazení mezi prostory se skalárním součinem. Potom

$$\varphi^* \circ \varphi : U \to U$$

je samoadjungovaný operátor, který je

pozitivně semidefinitní, tj.

$\forall u \in U : \langle \varphi^*\varphi(u), u \rangle \geq 0$

Navíc platí $\ker(\varphi^*\varphi) = \ker\varphi$.

Důkaz: 1. $\varphi^*\varphi$ je samoadjungovaný. Pro $u, v \in U$

$$\langle \varphi^*(\varphi(u)), v \rangle = \langle \varphi(u), \varphi(v) \rangle = \langle u, \varphi^*\varphi(v) \rangle$$

2. $\varphi^*\varphi$ je pozitivně semidefinitní: Pro $u \in U$ je

$$\langle \varphi^*(\varphi(u)), u \rangle = \langle \varphi(u), \varphi(u) \rangle \geq 0.$$

Speciálně všechna vl. čísla λ jsou ≥ 0.
Nechť $\varphi^*\varphi(u) = \lambda u$, pak

$$\lambda \langle u, u \rangle = \langle \lambda u, u \rangle = \langle \varphi^*\varphi(u), u \rangle = \langle \varphi(u), \varphi(u) \rangle \geq 0.$$

Protože $\langle u, u \rangle > 0$, je $\lambda \geq 0$.

3. Dokaž $\ker(\varphi^*\varphi) = \ker\varphi$.

Zřejmě $\ker\varphi \subseteq \ker(\varphi^*\varphi)$.
Nechť $u \in \ker(\varphi^*\varphi)$. Pak

$$0 = \langle \varphi^*\varphi(u), u \rangle = \langle \varphi(u), \varphi(u) \rangle$$

Tedy $\varphi(u) = 0$ a proto $u \in \ker\varphi$.

Věta o singulárním rozkladu

Nechť $A \in \mathrm{Mat}_{k\times n}(\mathbb{K})$, kde $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ nebo $\mathbb{C}$. Existují unitární (ortogonální) matice P tvaru $k\times k$ a Q tvaru $n\times n$ takové, že

$$A = P\,S\,Q^*$$

kde

$$S = \underbrace{\left(\begin{array}{ccc|c} s_1 & & 0 & \\ & s_2 & & 0 \\ 0 & & \ddots\, s_r & \\ \hline & 0 & & 0 \end{array}\right)}_{n} \Bigg\} k$$

a čísla $s_1, s_2, \ldots, s_r$ jsou druhé odmocniny z kladných vlastních čísel matice A^*A.

Důkaz: Uvažujme lin. zobrazení

$$\varphi : \mathbb{K}^n \longrightarrow \mathbb{K}^k, \qquad \varphi(x) = Ax$$

Pak adjungované zobrazení je

$$\varphi^* : \mathbb{K}^k \longrightarrow \mathbb{K}^n \qquad \varphi^*(y) = A^*y$$

zobrazení

$$\varphi^*\varphi : \mathbb{K}^n \longrightarrow \mathbb{K}^n \quad \text{je} \quad \varphi^*\varphi(x) = A^*Ax .$$

To je podle předchozího lemmatu samoadj. operátor s vlastními čísly

$$\lambda_1, \lambda_2, \ldots \lambda_r \quad \text{kladnými}$$

a vlastními čísly
$$\lambda_{r+1} = \dots = \lambda_n = 0.$$

V $\mathbb{K}^n$ vezmeme ortonormální bázi
$$\alpha = (u_1, u_2, \dots, u_n)$$
tvořenou vlastními vektory operátoru $\varphi^* \varphi$. Položme

$$Q = (id)_{\varepsilon_n, \alpha}$$

Protože $\ker(\varphi^* \varphi) = \ker \varphi$, je
$$\ker \varphi = [u_{r+1}, \dots, u_n].$$

Pro vektory $u_1, u_2, \dots, u_r$ platí
$$\|\varphi(u_i)\|^2 = \langle \varphi(u_i), \varphi(u_i) \rangle = \langle \varphi^* \varphi(u_i), u_i \rangle = \langle \lambda_i u_i, u_i \rangle$$
$$= \lambda_i > 0$$

Pro $1 \leq i < j \leq r$ je

$$\langle \varphi(u_i), \varphi(u_j) \rangle = \langle \varphi^* \varphi(u_i), u_j \rangle = \langle \lambda_i u_i, u_j \rangle$$
$$= \lambda_i \langle u_i, u_j \rangle = \lambda_i \cdot 0 = 0$$

Proto jsou vektory $\varphi(u_1), \varphi(u_2), \dots \varphi(u_r)$ ortogonální v prostoru $\mathbb{K}^k$. Položme
$$v_i = \frac{\varphi(u_i)}{\|\varphi(u_i)\|} \quad \text{pro} \quad 1 \leq i \leq r.$$

Vektory $v_1, v_2, \dots, v_r$ doplníme na ortonormální bázi prostoru $\mathbb{K}^k$

$$\beta = (v_1, \dots, v_r, v_{r+1}, \dots, v_k)$$

Položme

$$P = (id)_{\varepsilon_k, \beta}$$

Spočítáme matici $(\varphi)_{\beta, \alpha}$

$$(\varphi)_{\beta,\alpha} = \left((\varphi(u_1))_\beta, (\varphi(u_2))_\beta, \dots (\varphi(u_n))_\beta \right)$$

$$= \left((\|\varphi(u_1)\| v_1)_\beta \; (\|\varphi(u_2)\| \cdot v_2)_\beta \cdots \right)$$

$$= \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \sqrt{\lambda_r} & 0 & 0 \\ & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = S$$

To je hledaná matice S.

Přitom platí

$$A = (\varphi)_{\varepsilon_k, \varepsilon_n} = (id)_{\varepsilon_k, \beta} (\varphi)_{\beta,\alpha} (id)_{\alpha, \varepsilon_n}$$

$$= (id)_{\varepsilon_k, \beta} (\varphi)_{\beta,\alpha} (id)^{-1}_{\varepsilon_n, \alpha}$$

$$= P \cdot S \cdot Q^{-1}$$

$$= P \cdot S \cdot Q^{*},$$

neboť Q je unitární (ortogonální).

Příklad: $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ $\quad \varphi(x) = Ax : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3$

$$A^* A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}$$

$$\det \begin{pmatrix} 2-\lambda & 2 \\ 2 & 5-\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 7\lambda + 6$$

má vlastní čísla $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 6$.

Jednotkové vlastní vektory

$$\lambda_1 = 1 \qquad u_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_2 = 6 \qquad u_2 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\alpha = (u_1, u_2)$$

Pak
$$Q = (id)_{\varepsilon_2, \alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Dále
$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{\lambda_1}} \varphi(u_1) = \frac{1}{\sqrt{1}} A u_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$v_2 = \frac{1}{\sqrt{\lambda_2}} \varphi(u_2) = \frac{1}{\sqrt{6}} A u_2 = \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} 5 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Vektor v_3 zvolíme tak, aby $\mathcal{B} = (v_1, v_2, v_3)$ byla ortonormální báze v $\mathbb{R}^3$

$$v_3 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$P = (id)_{\mathcal{E}_3, \mathcal{B}} = \begin{pmatrix} 0 & 5/\sqrt{30} & -1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{2} & 1/\sqrt{30} & 1/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{2} & 2/\sqrt{30} & 2/\sqrt{6} \end{pmatrix}$$

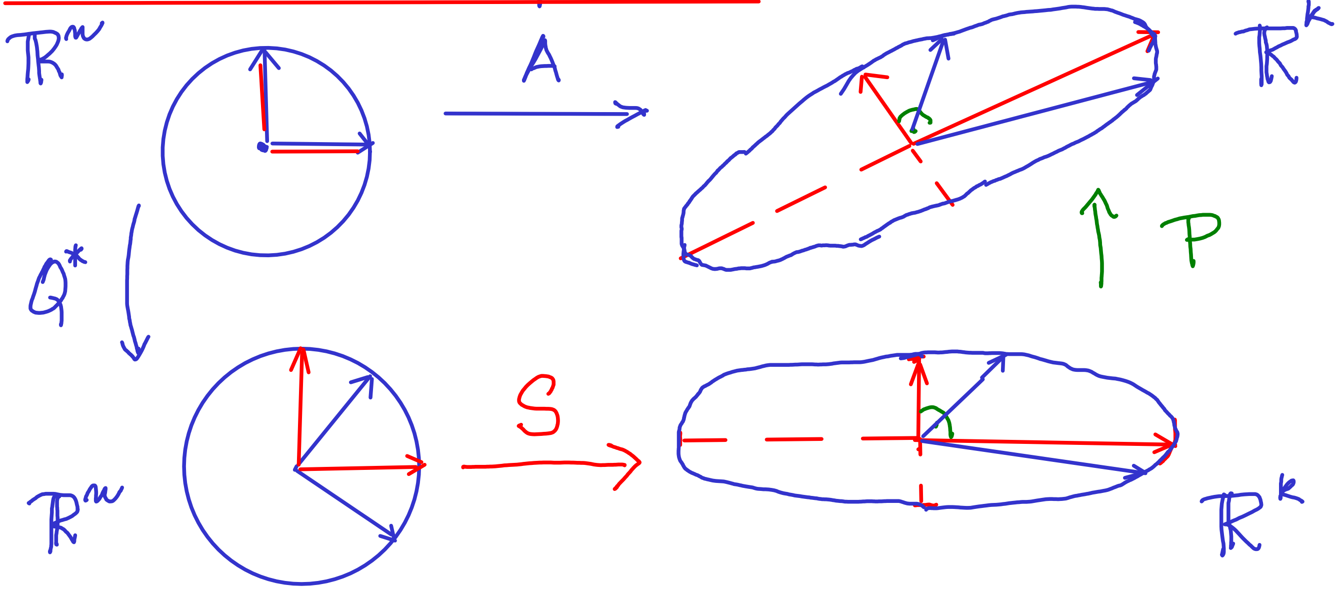
Dále

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Platí

$$A = P \cdot S \cdot Q^T .$$

Geometrická interpretace



Pseudoinverzní matice

Nechť A je invertibilní matice $n \times n$.
Pak má singulární rozklad

$$A = P S Q^*$$

kde $S = \begin{pmatrix} s_1 & & & 0 \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & s_n \end{pmatrix}$ a $s_i > 0$ pro všechna i.

Platí $S^{-1} = \begin{pmatrix} s_1^{-1} & & & 0 \\ & s_2^{-1} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & s_n^{-1} \end{pmatrix}$

P a Q jsou regulární. Proto

$$A^{-1} = (PSQ^*)^{-1} = (Q^*)^{-1} S^{-1} P^{-1}$$

$$= (Q^*)^* S^{-1} P^* = Q S^{-1} P^{-1}.$$

To je singulární rozklad inverzní matice.

Definice pseudoinverzní matice $A^{(-1)}$ k A (toto je pragmatická definice, lze definovat i pomocí vlastností)

Je-li sing. rozklad matice $A = PSQ^*$, pak

$$A^{(-1)} = Q\, S^{(-1)} P^*$$

kde $$S^{(-1)} \underset{\text{def}}{=} \begin{array}{c} \left.\underbrace{\left(\begin{array}{ccc|c} s_1^{-1} & & & \\ & \ddots & & 0 \\ & & s_r^{-1} & \\ \hline & 0 & & 0 \end{array} \right)}_{k}\right\} n \end{array}$$

Vlastnosti pseudoinverzní matice

(1) Je-li A invertibilní, je $A^{(-1)} = A^{-1}$.

(2) $\left(A^{(-1)}\right)^{(-1)} = A$

(3) $A^{(-1)} \cdot A$ a $A \cdot A^{(-1)}$ jsou samoadjungované (hermitovské nebo symetrické) matice

(4) Je-li $\varphi : \mathbb{K}^n \to \mathbb{K}^k$, $\varphi(x) = Ax$
a $\varphi^{(-1)} : \mathbb{K}^k \to \mathbb{K}^n$, $\varphi^{(-1)}(y) = A^{(-1)} y$,
pak
$$\varphi^{(-1)} \circ \varphi : \mathbb{K}^n \to \mathbb{K}^n \quad \varphi^{(-1)} \circ \varphi(x) = A^{(-1)} A x$$
je kolmá projekce $\mathbb{K}^n$ na podprostor $(\ker \varphi)^{\perp}$.

(5) $\varphi \circ \varphi^{(-1)} : \mathbb{K}^k \to \mathbb{K}^k \quad \varphi \circ \varphi^{(-1)}(y) = A A^{(-1)} y$

je kolmá projekce $\mathbb{K}^k$ na podprostor $\operatorname{im} \varphi$.

(6) Platí $$A A^{(-1)} A = A$$ $$A^{(-1)} A A^{(-1)} = A^{(-1)}$$

(7) $A^{(-1)} = (A^* A)^{(-1)} A^*$ důležité početně

Poznámka Pseudoinverzní matici bychom mohli (z teoretického hlediska lépe) definovat tak, že splňuje vlastnosti (4) a (5).
Z těchto vlastností plyne jednoznačnost $A^{(-1)}$, a pak se dokáže, že matice $Q S^{(-1)} P^*$ má vlastnosti (4) a (5). Tedy musí být $A^{(-1)} = Q S^{(-1)} P^*$

Důsledek (1) a (7) Početně důležitý.

Je-li A^*A invertibilní matice, je

$$A^{(-1)} = (A^*A)^{-1} \cdot A^*$$

Příklad na tento důsledek

Nechť $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, pak $A^*A = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}$

je invertibilní. Potom

$$A^{(-1)} = (A^*A)^{-1} \cdot A^* = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 5/6 & -1/3 \\ -1/3 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/6 & 5/6 & -1/3 \\ 1/3 & -1/3 & 1/3 \end{pmatrix}$$