9. přednáška — Singulární rozklad matice / Pseudoinverzní matice

Motivace: Pro každou matici A typu $k \times n$ existují matice

(1) P ortogonální (unitární) typu $k \times k$

(2) Q ortogonální (unitární) typu $n \times n$

(3) S typu $k \times n$

$$S = \begin{array}{c} \left(\begin{array}{c|c} \begin{matrix} s_1 & & 0 \\ & s_2 & \\ 0 & \ddots & s_r \end{matrix} & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right) \begin{matrix} \}\, r \\ \}\, k-r \end{matrix} \\ \underbrace{\qquad\quad}_{r} \; \underbrace{\quad}_{n-r} \end{array}$$

(4) Platí

$$A = P\,\underline{S}\,Q^*$$

$$Q^* = Q^T$$
$$Q^* = \overline{Q}^T$$
$$Q^* = Q^{-1}$$

Singulární rozklad matice A

Hraje důležitou roli v aplikacích, zvláště ve statistice.

Pseudoinverzní matice k matici A typu $k \times n$

Ani ne všechny matice typu $n \times n$ mají inverzi. Tu je snaha nahradit inverzní matici, pokud neexistuje, něčím „slabším", ale s podobnými vlastnostmi.

A matice $k \times n$

$A^{(-1)}$ matice $n \times k$, vždy existuje

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

$$\ker\varphi \oplus \ker\varphi^{\perp}$$

$$\begin{tikzcd} \mathbb{R}^n \arrow[r, "\varphi"', "x \mapsto Ax"] \arrow[rr, bend right, "x \mapsto A^{(-1)}Ax"'] & \mathbb{R}^k \arrow[r, "\varphi^{(-1)}"', "y \mapsto A^{(-1)}y"] & \mathbb{R}^n \end{tikzcd}$$

$\varphi: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k \qquad \varphi(x) = Ax$

$\varphi^{(-1)}: \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^n \qquad \varphi^{(-1)}(y) = A^{(-1)}y$

$\varphi^{(-1)}\varphi \quad \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^n$ kolmá projekce na $(\ker\varphi)^{\perp}$

(2) $A \cdot A^{(-1)}: \mathbb{R}^k \xrightarrow[y \mapsto A^{(-1)}y]{\varphi^{(-1)}} \mathbb{R}^n \xrightarrow[x \mapsto Ax]{\varphi} \mathbb{R}^k$

je kolmá projekce $\mathbb{R}^k$ na $\operatorname{im}\varphi$

$$\begin{tikzcd} \mathbb{R}^n \arrow[rr, "\varphi(x) = Ax"] & & \mathbb{R}^k \\ \ker\varphi \oplus (\ker\varphi)^{\perp} & & (\operatorname{im}\varphi)^{\perp} \oplus \operatorname{im}\varphi \end{tikzcd}$$

$$\begin{tikzcd} \ker\varphi \arrow[r, shift left, "\varphi = 0"] & (\operatorname{im}\varphi)^{\perp} \arrow[l, shift left, "\varphi^{(-1)} = 0"] \\ (\ker\varphi)^{\perp} \arrow[r, shift left, "\varphi \text{ je izo}"'] & \operatorname{im}\varphi \arrow[l, shift left, dashed, "\varphi^{(-1)}"] \end{tikzcd}$$

Příklad: A matice $k \times n$ nad $\mathbb{R}$ ($\mathbb{C}$)

$$A^* = A^T \quad \text{tvaru } n \times k \text{ nad } \mathbb{R}$$
$$ = \bar{A}^T \quad \text{tvaru } n \times k \text{ nad } \mathbb{C}$$

Platí

$$\left.\begin{array}{ll} A^* A & \text{tvaru } n \times n \\ A A^* & \text{tvaru } k \times k \end{array}\right\}$$ obě jsou symetrické ($\mathbb{R}$) nebo hermitovské ($\mathbb{C}$)

$$\left.\begin{array}{ll} A = A^T & \text{symetrická} \\ A = \bar{A}^T & \text{hermitovská} \end{array}\right\} \quad A = A^*$$

Platí $A^* A = (A^* A)^*$

$$\underline{(A^* A)^*} = \left(\overline{(A^* A)}\right)^T = \left(\bar{A}^* \bar{A}\right)^T$$
$$= \bar{A}^T \left(\bar{A}^*\right)^T = A^* (A^*)^* = \underline{A^* A}$$

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

$$\varphi^* \; V \to U$$

je adjungované zobrazení k φ. Pak

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

je samoadjungované, pozitivně semidefinitní, tj.

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

a navíc platí, že

$$\ker(\varphi^*\varphi) = \ker\varphi$$

a $\varphi^* \cdot \varphi$ má pouze nezáporná vlastní čísla.

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

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

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

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

2. $\varphi^* \circ \varphi$ je poz. semidefinitní

$$\langle \varphi^*\varphi(u), u\rangle = \langle \varphi(u), \varphi(u)\rangle = \|\varphi(u)\|^2 \geq 0.$$

3. $\varphi^*\varphi$ má nezáporná vl. čísla: $\varphi^*\varphi(u) = \lambda u$

$$\lambda\overset{>0}{\langle u, u\rangle} = \langle \overbrace{\varphi^*\varphi(u)}^{\lambda u}, u\rangle = \langle \varphi(u), \varphi(u)\rangle \geq 0$$

$\Rightarrow \lambda \geq 0.$

4. $\ker(\varphi^*\varphi) = \ker\varphi$

$\ker\varphi \subseteq \ker\varphi^*\varphi \qquad \varphi(u) = \vec{o} \Rightarrow \varphi^*\varphi(u) = \vec{o}$

Dk, že $\ker(\varphi^*\varphi) \subseteq \ker\varphi$.

$u \in \ker(\varphi^*\varphi) \qquad \varphi^*\varphi(u) = 0$

$$0 = \langle 0, u\rangle = \langle \varphi^*\varphi(u), u\rangle = \langle \varphi(u), \varphi(u)\rangle = \|\varphi(u)\|^2$$

$\Rightarrow \varphi(u) = \vec{o}, \quad u \in \ker\varphi.$

Věta o singulárním rozkladu

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

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

kde $S = \left(\begin{array}{c|c} \begin{matrix} s_1 & & & \\ & s_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & s_r \end{matrix} & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right)$ tvaru $k\times n$

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

Důkaz: Uvažujme lin. zobrazení
$$\varphi : \mathbb{K}^n \to \mathbb{K}^k \quad \varphi(x) = Ax$$
Adjungované zobrazení
$$\varphi^* : \mathbb{K}^k \to \mathbb{K}^n \quad \varphi^*(y) = A^* y$$
Podle předchozího lemmatu má
$$\varphi^* \circ \varphi \quad (\varphi^* \circ \varphi(x) = A^* A x) : \mathbb{K}^n \to \mathbb{K}^n$$
je samoadj. operátor s vlastními čísly
$$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_r \quad \text{kladnými}$$
$$\lambda_{r+1}, \ldots, \lambda_n = 0$$
Podle hlavní věty o samoadj. operátoru existuje v $\mathbb{K}^n$ ortonormální báze
$$\alpha = (u_1, u_2, \ldots u_n)$$
tvořená vlastními vektory operátoru $\varphi^* \circ \varphi$. Položíme
$$Q = (id)_{\varepsilon_n, \alpha}$$

Odtud $\ker(\varphi^*\varphi) = \ker\varphi$, platí, že

$$\ker\varphi = \ker(\varphi^*\varphi) = [u_{r+1}, u_{r+2}, \dots u_n]$$

Pro vektory $u_1, u_2, \dots u_r$ platí

$$\|\varphi(u_i)\|^2 = \langle\varphi(u_i), \varphi(u_i)\rangle = \langle\varphi^*\varphi(u_i), u_i\rangle$$

$$= \langle\lambda_i u_i, u_i\rangle = \lambda_i \underbrace{\langle u_i, u_i\rangle}_{1} = \lambda_i$$

$1 \le i < j \le r$

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

$$= \langle\lambda_i u_i, u_j\rangle = \lambda_i \underbrace{\langle u_i, u_j\rangle}_{0} = 0$$

$\varphi(u_1), \dots \varphi(u_r)$ jsou ortogonální tam v K^m a jejich velikosti jsou postupně

$$\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sqrt{\lambda_r}$$

$$v_i = \frac{\varphi(u_i)}{\|\varphi(u_i)\|} = \frac{\varphi(u_i)}{\sqrt{\lambda_i}} \quad \text{pro } 1 \le i \le r$$

$v_1 \dots v_r$ jsou ortonormální vektory a tyto vektory doplníme na $\underbrace{\text{ortonormální}}$ bázi celého prostoru $\mathbb{K}^k$

$$B = (v_1, v_2, \dots, v_r, v_{r+1}, \dots v_k)$$

$$P = (id)_{\mathcal{E}_k, B}$$

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

$$(\varphi)_{B,\alpha} = \Big((\varphi(u_1))_B \ (\varphi(u_2))_B \ \dots \ (\varphi(u_n))_B \Big)$$

$$= \Big((\overset{\|\varphi(u_1)\|}{\overset{\shortparallel}{\sqrt{\lambda_1}}}\, v_1)_B \ (\sqrt{\lambda_2}\, v_2)_B \ \dots \ (\sqrt{\lambda_r}\, v_r)_B \ (\vec{o})_B \dots (\vec{o})_B \Big)$$

$$= \underbrace{\begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} & & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & & 0 & 0 & & 0 \\ & \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & & \sqrt{\lambda_r} & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & & 0 & 0 & & 0 \\ \vdots & & & \vdots & & & \\ 0 & 0 & & 0 & 0 & & 0 \end{pmatrix}}_{n} \Bigg\} k = S$$

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

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

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

Toto jsme chtěli dokázat.

Příklad: $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ tvaru 3×2

$\varphi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^3 \quad \varphi(x) = Ax$

Spočítáme sing. rozklad:

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

Char. polynom, vl. čísla a vl. vektory

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

má kořeny $\lambda_1 = 1, \ \lambda_2 = 6$ $\qquad \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$

Vlastní vektory $\lambda_1 = 1$ vl. vektor $\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 12 \end{pmatrix}$$

$\lambda_2 = 6$ vl. vektor $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$

Ortonorm. báze $\quad u_1 = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$

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

$$Q = (id)_{\varepsilon_2, \alpha} = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$$

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

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

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

$$\|v_1\| = \|v_2\| = 1 \qquad \langle v_1, v_2 \rangle = 0$$

Vektor v_3 vezmeme kolmý na v_1, v_2 jednotkové velikosti.

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

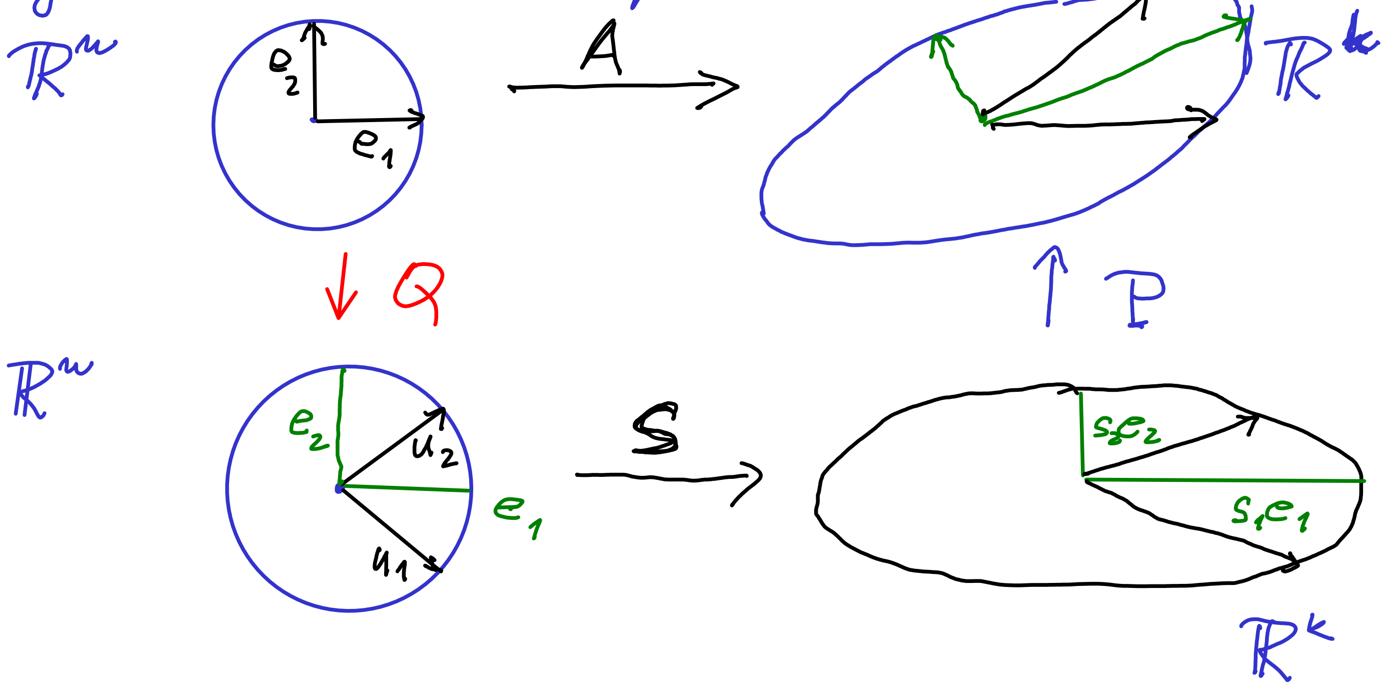
$\beta = (v_1, v_2, v_3)$ je ortonormální báze v $\mathbb{R}^3$

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

Platí

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

Geometrická interpretace



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

Pseudoinverzní matice

Motivace: Nechť A je matice $n \times n$, která má inverzní matici a současně sing. rozklad

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

.

všechny matice jsou typu $n \times n$, všechny jsou regulární.

$$\det A = \det P \cdot \det S \cdot \det Q$$

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

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

$$= (Q^{-1})^{-1}\,S^{-1}\,\underset{\shortparallel}{P^{-1}} =$$

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

Závěr: $A^{-1} = Q\,S^{-1}P^*$

je sing. rozklad inverzní matice.

Odtud dostaneme praktickou definici

pseudoinverzní matice . S kran $k \times n$

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

Definujme $S^{(-1)}$ jako matici $n \times k$

$$S^{(-1)} = \begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccc|c} s_1^{-1} & & 0 & \\ & s_2^{-1} & & 0 \\ 0 & & \ddots \, s_r^{-1} & \\ \hline & 0 & & 0 \end{array}\right) \begin{array}{l} \left.\vphantom{\begin{matrix}a\\a\\a\end{matrix}}\right\} r \\ \left.\vphantom{a}\right\} n-r \end{array} \\ \underbrace{\hphantom{xxxxxxx}}_{r} \; \underbrace{\hphantom{xxxx}}_{k-r} \end{array}$$

$$\underset{n \times n}{S^{(-1)} \cdot S} = \begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & & 0 & \\ & 1 & & 0 \\ 0 & & \ddots \, 1 & \\ \hline & 0 & & 0 \end{array}\right) \begin{array}{l} \left.\vphantom{\begin{matrix}a\\a\\a\end{matrix}}\right\} r \\ \left.\vphantom{a}\right\} n-r \end{array} \\ \underbrace{\hphantom{xxxxxxx}}_{r} \; \underbrace{\hphantom{xxxx}}_{n-r} \end{array}$$

$$\underset{k \times k}{S \cdot S^{(-1)}} = \begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & & 0 & \\ & 1 & & 0 \\ 0 & & \ddots \, 1 & \\ \hline & 0 & & 0 \end{array}\right) \begin{array}{l} \left.\vphantom{\begin{matrix}a\\a\\a\end{matrix}}\right\} r \\ \left.\vphantom{a}\right\} k-r \end{array} \\ \underbrace{\hphantom{xxxxxxx}}_{r} \; \underbrace{\hphantom{xxxx}}_{k-r} \end{array}$$

Praktická definice pseudoinverze

Nechť A je tvaru $k \times n$ se sing. rozkladem

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

Pak pseudoinverze k A je matice tvaru $n \times k$ se sing. rozkladem

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

Příklad: Spočítejte $A^{(-1)}$ pro $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Před chvílí jsme našli sing. rozklad matice A

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \overset{P}{\begin{pmatrix} 0 & 5/\sqrt{30} & -1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{30} & 1/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{30} & 2/\sqrt{6} \end{pmatrix}} \overset{S}{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}} \overset{Q^*}{\begin{pmatrix} 2/\sqrt{5} & -1/\sqrt{5} \\ 1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5} \end{pmatrix}}$$

$$A^{(-1)} = \underset{Q}{\begin{pmatrix} 2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} \\ -1/\sqrt{5} & 2/\sqrt{5} \end{pmatrix}} \underset{S^{(-1)}}{\begin{pmatrix} \frac{1}{1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 \end{pmatrix}} \underset{P^*}{\begin{pmatrix} 0 & 2/\sqrt{5} & -1/\sqrt{5} \\ 5/\sqrt{30} & 1/\sqrt{30} & 2/\sqrt{30} \\ -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} & 2/\sqrt{6} \end{pmatrix}}$$

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

Vlastnosti pseudoinverzní matice

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

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

(3) $A^{(-1)}A$ a $AA^{(-1)}$ jsou hermitovské (symetrické) matice typu $n \times n$ a $k \times k$.

(4) Je-li $\varphi : \mathbb{K}^n \to \mathbb{K}^k$ $\varphi(x) = Ax$

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

pak

$\varphi^{(-1)} \circ \varphi : \mathbb{K}^n \to \mathbb{K}^n$ $\varphi^{(-1)} \circ \varphi(x) = A^{(-1)} \cdot Ax$

je kolmá projekce $\mathbb{K}^n$ do $(\ker \varphi)^\perp$.

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

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

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

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

(7) důležitá pro počítání

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

Důsledek (7) a (1).

Má-li A^*A inverzní matici, je podle (7) a (1)

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

toto jednoduše značíme

Příklad na důsledek

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

$$\det A^*A = 10 - 4 = 6$$

Tedy A^*A má inverzi $\begin{pmatrix} 5/6 & -1/3 \\ -1/3 & 1/3 \end{pmatrix}$

Podle důsledku

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

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