

Сингулярное разложение — это очень полезно!

В университетских курсах линейной алгебры и численных методов значительное внимание уделяется представлению матриц в виде произведения достаточно простых сомножителей. Укажем лишь некоторые примеры: $A = PLR$, A — невырожденная матрица, P — матрица перестановок, L — нижняя треугольная матрица, R — верхняя треугольная матрица²; $A = U\Lambda U^*$, A — нормальная матрица, U — унитарная матрица, Λ — диагональная матрица; $A = UR$, A — произвольная квадратная матрица, U — унитарная матрица, R — верхняя треугольная матрица.

В предлагаемой заметке речь идет о так называемом сингулярном разложении произвольной прямоугольной матрицы на множители. Оно играет очень важную роль как в теории, так и в разнообразных приложениях, однако редко упоминается в учебных курсах.

Более полно с затрагиваемыми здесь вопросами можно познакомиться по литературе, список которой приведен в конце статьи.

1. Сингулярные базисы и сингулярные числа матрицы

1. Основная теорема.

Теорема 1. Пусть A — произвольная матрица из $M_{m,n}$. Существуют такие ортонормированные базисы $\{e^k\}_{k=1}^n \subset \mathbb{C}^n$, $\{q^k\}_{k=1}^m \subset \mathbb{C}^m$ и положительные числа $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r$, $0 \leq r \leq \min\{m, n\}$, что

$$Ae^k = \begin{cases} \sigma_k q^k, & k \leq r, \\ 0, & k > r, \end{cases} \quad (1)$$

Числа $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r$ называют *сингулярными числами* матрицы A . Базисы $\{e^k\}_{k=1}^n$, $\{q^k\}_{k=1}^m$, обеспечивающие выполнение соотношений (1), называют *сингулярными базисами* матрицы A . Понятно, что r есть размерность $\text{Im}(A)$, т. е. r — ранг матрицы A .

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО теоремы 1. Матрица A^*A самосопряжена и неотрицательно определена. Действительно $(A^*A)^* = A^*A$, $(A^*Ax, x) = (Ax, Ax) \geq 0$ для любого $x \in \mathbb{C}^n$. Поэтому существует ортонормированный базис собственных векторов $\{e^k\}_{k=1}^n$ матрицы A^*A . Все ее собственные числа неотрицательны. Таким образом,

$$A^*Ae^k = \sigma_k^2 e^k, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (2)$$

$\sigma_k^2 \geq 0$, $k = 1, 2, \dots, n$. Будем считать при этом, что $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$, $\sigma_{r+1} = \dots = \sigma_n = 0$. Положим $z^k = Ae^k$ для $k = 1, 2, \dots, r$ и заметим, что

$$(z^p, z^q) = (Ae^p, Ae^q) = (A^*Ae^p, e^q) = \sigma_p^2 (e^p, e^q).$$

Значит,

$$(z^p, z^q) = \begin{cases} 0, & p \neq q, \\ \sigma_p^2, & p = q, \end{cases} \quad (3)$$

¹Карчевский Михаил Миронович, mkarchev44@yandex.ru, кафедра вычислительной математики.

²Все не введенные в настоящей статье обозначения и определения можно найти, например, в [6].

следовательно, векторы

$$q^k = \sigma_k^{-1} A e^k, \quad k = 1, 2, \dots, r, \quad (4)$$

образуют ортонормированную систему в пространстве \mathbb{C}^m . Если окажется, что r меньше m , дополним ее произвольно векторами q^k , $k = r + 1, r + 2, \dots, m$, до ортонормированного базиса пространства \mathbb{C}^m . Из равенств (4) вытекает справедливость (1). \square

2. Матричное представление сингулярного разложения. Равенства (1) часто записывают в виде

$$A = V \Sigma W^*. \quad (5)$$

Здесь V — матрица, столбцами которой служат векторы $\{q^k\}_{k=1}^m$; W — матрица, столбцами которой являются векторы $\{e^k\}_{k=1}^n$; Σ — матрица, у которой главный минор порядка r диагональный, на его диагонали расположены сингулярные числа матрицы A , все остальные элементы матрицы Σ — нули.

Именно в такой форме обычно реализуют сингулярное разложение в пакетах стандартных программ линейной алгебры. Например, в среде Matlab сингулярное разложение может быть выполнено при помощи функции `svd` (от английского SVD — Singular Value Decomposition).

3. Тензорное представление сингулярного разложения. Из равенств (1) следует, что

$$Ax = \sum_{j=1}^r \sigma_j (x, e^j) q^j \quad \forall x \in \mathbb{C}^n. \quad (6)$$

Введем в рассмотрение матрицы $q^j \otimes e^j$ порядка m на n , определяемые тождествами

$$q^j \otimes e^j x = (x, e^j) q^j \quad \forall x \in \mathbb{C}^n. \quad (7)$$

Матрицу $q^j \otimes e^j$ называют тензорным произведением векторов q^j , e^j . Из тождеств (6), (7) получаем, что

$$A = \sum_{j=1}^r \sigma_j q^j \otimes e^j. \quad (8)$$

Равенство (8) есть *тензорное представление* матрицы A . Отметим, что для задания матрицы A , достаточно хранить в памяти компьютера $Q = r(m+n+1)$ чисел. Элементарные оценки показывают, что, например, для квадратной матрицы экономия достигается, если ранг матрицы не превышает половины ее порядка.

4. Оценки сингулярных чисел. Вследствие (2) очевидным образом получаем, что $(A^* A x, x) = \sum_{j=1}^r \sigma_j^2 |(x, e^j)|^2$, поэтому

$$\sigma_1^2 = \max_{|x|=1} (A^* A x, x). \quad (9)$$

Если A — квадратная матрица, то из равенства (9) нетрудно вывести следующие оценки

$$\max_{1 \leq i, j \leq n} |a_{ij}| \leq \sigma_1 \leq n \max_{1 \leq i, j \leq n} |a_{ij}|. \quad (10)$$

Оценки (10) нелучшаемы. Левое неравенство превращается в равенство при $A = I$, где I — единичная матрица, правое — при $A = E$, где E — матрица, все элементы которой равны единице.

2. Некоторые применения сингулярного разложения

1. Полярные разложения. Пусть A — произвольная квадратная матрица. Равенство (5) можно переписать в виде

$$A = US, \quad A = TU, \quad (11)$$

где $U = VW^*$ — унитарная матрица, $S = W\Sigma W^*$, $T = V\Sigma V^*$ — самосопряженные нетрицательные матрицы³. Формулы (11) определяют *полярные разложения* матрицы (левое и правое). Они находят разнообразные приложения, например, в механике деформируемого твердого тела.

2. Решение систем линейных алгебраических уравнений. Если сингулярное разложение матрицы A построено, то решение системы линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b, \quad (12)$$

где b — заданный вектор из \mathbb{C}^m , $x \in \mathbb{C}^n$ — искомый вектор, строится без труда. В самом деле, представим вектор b в виде $b = \sum_{k=1}^m (b, q^k) q^k$, а вектор x будем разыскивать

в виде разложения $x = \sum_{k=1}^n \xi_k e^k$. Для определения чисел ξ_k , используя (12), получим соотношения $\xi_k = (b, q^k)/\sigma_k$, $k = 1, 2, \dots, r$. Далее нужно различать два случая:

1) все числа $\eta_k = (b, q^k)$, $k = r + 1, r + 2, \dots, m$, — нули, тогда

$$x = \sum_{k=1}^r (b, q^k)/\sigma_k e^k + \sum_{k=r+1}^n \xi_k e^k, \quad (13)$$

где числа ξ_k , $k = r + 1, r + 2, \dots, n$, произвольны, есть общее решение системы уравнений (12);

2) если хотя бы одно из чисел η_k отлично от нуля, то система (12) не имеет решений, вектор, определяемый формулой (13), называют в этом случае псевдорешением системы (12); легко проверить, что этот вектор дает не бóльшую длину вектору невязки $r = Ax - b$ по сравнению с любым другим вектором пространства \mathbb{C}^n .

Если сингулярное разложение матрицы A построено, то вычисления по формулам (13) требуют дополнительно всего порядка rm арифметических операций.

3. Оценка возмущения решения системы линейных алгебраических уравнений за счет неточности задания правой части. Пусть A — квадратная невырожденная матрица, x — решение системы уравнений (12), \tilde{x} — решение системы уравнений $Ax = \tilde{b}$. Тогда $A(x - \tilde{x}) = b - \tilde{b}$. Величину $\delta_x = |x - \tilde{x}|/|x|$ называют величиной *относительного изменения решения* при изменении правой части. Выясним, как она зависит от $\delta_b = |b - \tilde{b}|/|b|$ — величины *относительного изменения правой части*. Представляя x , \tilde{x} в виде разложений по базису $\{e^k\}_{k=1}^n$, а b , \tilde{b} — в виде разложений по базису $\{q^k\}_{k=1}^n$, получим, что

$$\delta_x^2 = \frac{\sum_{k=1}^n \frac{|\eta_k - \tilde{\eta}_k|^2}{\sigma_k^2}}{\sum_{k=1}^n \frac{|\eta_k|^2}{\sigma_k^2}} \leq \frac{\sigma_1^2}{\sigma_n^2} \frac{\sum_{k=1}^n |\eta_k - \tilde{\eta}_k|^2}{\sum_{k=1}^n |\eta_k|^2} = \frac{\sigma_1^2}{\sigma_n^2} \delta_b^2. \quad (14)$$

³Напомним, что U не меняет длин векторов, а S (как и T) растягивает \mathbb{C}^n в n попарно ортогональных направлениях.

Таким образом,

$$\delta_x \leq \frac{\sigma_1}{\sigma_n} \delta_b. \quad (15)$$

Величину σ_1/σ_n , характеризующую устойчивость решения уравнения (12) по отношению к изменению его правой части, называют *числом обусловленности* матрицы A и обозначают через $\text{cond}(A)$. Очевидно, $\text{cond}(A) \geq 1$ для любой матрицы A .

Задача. Приведите примеры матриц A , для которых $\text{cond}(A) = 1$. Докажите, что оценка (15) неулучшаема в том смысле, что для любой невырожденной матрицы A можно указать такие b и \tilde{b} , что неравенство (15) превращается в равенство.

4. Малоранговые приближения матриц. Как было отмечено выше, при использовании сингулярного разложения количество чисел, требуемых для задания матрицы, пропорционально ее рангу. В то же время, во многих случаях требуется лишь приближенное задание матрицы. В связи этим естественным образом возникает следующая задача. Пусть $A \in M_{m,n}$. Требуется построить матрицу $X \in M_{m,n}$, являющуюся наилучшим приближением к A среди всех матриц, ранг которых не превосходит заданного числа k . Пусть A , матрица ранга $r \geq 2$, представлена в виде (8), и $k < r$. Положим

$$X = \sum_{j=1}^k \sigma_j q^j \otimes e^j. \quad (16)$$

Имеем $\text{rank}(X) = k$, причем $A - X = \sum_{j=k+1}^r \sigma_j q^j \otimes e^j$, следовательно, максимальное сингулярное число матрицы $A - X$ равно σ_{k+1} . Пусть теперь матрица $Y \in M_{m,n}$ имеет ранг, не превосходящий k . Тогда $\text{def}(Y)$ не меньше, чем $n - k$. Поэтому существует вектор $z \neq 0$, $z \in \text{span}\{e^1, e^2, \dots, e^{k+1}\} \cap \text{Ker}(Y)$. Можно считать, что $|z| = 1$. Положим $z = \sum_{j=1}^{k+1} \alpha_j e^j$. Элементарные вычисления дают, что

$$((A - Y)^*(A - Y)z, z) = (A^*Az, z) = \sum_{j=1}^{k+1} \sigma_j^2 \alpha_j^2 \geq \sigma_{k+1}^2.$$

Вследствие (9) отсюда вытекает, что максимальное сингулярное число матрицы $A - Y$ не меньше, чем σ_{k+1} . Таким образом, можно сказать, что в определенном здесь смысле матрица X — наилучшее приближение к матрице A на множестве всех матриц ранга, не превосходящего $k < r$. Полученный результат составляет содержание *теоремы Эккарта — Янга* [1].

Говорят, что матрица X осуществляет сжатие информации, содержащейся в матрице A . Если A — квадратная матрица, то, используя оценку (10), близость матриц X и A можно характеризовать неравенством $\max_{1 \leq i, j \leq n} |a_{ij} - x_{ij}| \leq \sigma_{k+1}$.

5. Сингулярное разложение и фотографии. Используя функции среды Matlab, можно существенно сократить объем памяти компьютера для хранения фотографий без заметного ухудшения качества изображений. Продемонстрируем, как это делается, на примере конкретного файла `doll.jpg`. Чтение информации из этого файла и последующее преобразование ее в стандартный числовой формат выполняется функциями `A1=imread('doll.jpg')`, `DA1=im2double(A1)`. Получили трехмерный массив `DA1` с размерами `m=972`, `n=1296`, `p=3`. «Вертикальный» размер `p` для любой цветной фотографии равен 3. Размеры «горизонтальных» слоев, `m`, `n`, зависят от

качества конкретной фотографии. Можно определить ранг каждого горизонтально-го слоя, используя функцию `rank`. В данном примере все ранги оказались равными $m=972$, то есть все горизонтальные слои — полноранговые матрицы. Экранный образ файла DA1 можно получить при помощи функции `image(DA1)`. Он будет дан в виде фигуры Matlab. Задавая затем некоторое целое $1 \leq k < 972$, каждую матрицу $DA1(:, :, j)$, $j=1,2,3$, используя функцию `svd`, приблизим матрицей вида (16). На модифицированный таким образом массив DA1 можно подействовать затем функцией `image`. Результаты работы описанного метода иллюстрирует рис. 1, с. 6. Поясним, что q обозначает объем необходимой памяти для хранения матриц вида (16) по отношению к количеству чисел в исходном массиве DA1.



а) исходный массив



б) ранг $k=60$, $q=10.8\%$



с) ранг $k=30$, $q=5.4\%$



д) ранг $k=15$, $q=2.7\%$

Рис. 1:

Список литературы

- [1] Eckart Carl, Young Gale. The approximation of one matrix by another of lower rank//Psychometrika.— 1936.— Vol. 1, no. 3. — pp. 211–218.
- [2] Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Физматлит, 2010.

- [3] **Хорн Р., Джонсон Ч.** Матричный анализ. М.: Мир, 1989.
- [4] **Деммель Дж.** Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения. М.: Мир, 2001.
- [5] **Beilina L., Karchevskii E., Karchevskii M.** Numerical Linear Algebra: Theory and Application. Springer, 2017.
- [6] **Карчевский Е.М., Карчевский М.М.** Лекции по линейной алгебре и аналитической геометрии. СПб.: Издательство «Лань», 2018.