

DESCOMPUNEREA VALORILOR SINGULARE

Valorile singulare ale unei matrice reale sau complexe dau informații prețioase despre caracteristicile matricei (rang, norme etc.), iar pe de altă parte (spre deosebire de valorile proprii în cazul matricelor pătrate) sunt perfect condiționate numeric și, în consecință, pot fi calculate cu o înaltă acuratețe.

Descompunerea valorilor singulare (**DVS**) ale unei matrice reprezintă o transformare extrem de utilă în evidențierea multor proprietăți structurale ale matricei respective, cerute în numeroase aplicații dintre care amintim rezolvarea cazului general al problemei celor mai mici pătrate fără sau cu restricții liniare sau pătratice. De asemenea, algoritmul de calcul **DVS** reprezintă unica modalitate, numeric fiabilă, de determinare a rangului unei matrice. Dacă, într-o aritmetică exactă, conceptul matematic de rang al unei matrice este foarte bine definit, în prezența erorilor de rotunjire, generic, toate matricele sunt de rang matematic maximal. De aceea, într-o aritmetică aproximativă, se utilizează mai curând noțiunea de "rang numeric" care adaptează conceptul de rang matematic la un mediu computațional real dat de tehnica de calcul actuală.

În prima parte a capitoului sunt prezentate unele noțiuni teoretice relative la conceptul de valori singulare și principalele lor proprietăți precum și unele descompuneri derivate. Partea de conținut prezintă algoritmul de calcul al descompunerii valorilor singulare pentru matricelor reale, mai des întâlnite în aplicații. În esență algoritmul **DVS** reprezintă o adaptare a algoritmului **QR** simetric, care evită calculul efectiv al valorilor proprii ale unei matrice produs de tipul $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ sau $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ acționând exclusiv asupra matricei factor $\mathbf{A}$. Cazul complex se poate reduce la cel real de dimensiune dublă sau se tratează absolut similar utilizându-se transformări unitare (complexe).

Descompunerea valorilor singulare

Fie o matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Descompunerea valorilor singulare ale matricei $\mathbf{A}$ se poate introduce prin următoarea teoremă.

Teorema 1: Descompunerea valorilor singulare.

Oricare ar fi matricea $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ există matricele ortogonale $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ și întregul $r \geq 0$ astfel încât

$$\mathbf{U}^T \mathbf{A} \mathbf{V} = \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

unde

$$\Sigma_1 = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r) \in \mathbb{R}^{r \times r}$$

cu

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \geq \dots \geq \sigma_r > 0.$$

În cazul complex sunt adevărate aceleași afirmații cu precizarea că matricele $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{m \times m}$, $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ sunt unitare și $\mathbf{U}^H \mathbf{A} \mathbf{V} = \Sigma$.

Demonstrație. Fie, pentru precizare, $m \geq n$. Considerăm numai cazul real.

Dacă $\mathbf{A} = \mathbf{0}$, atunci teorema este adevărată cu $\mathbf{U} = \mathbf{I}_m$, $\mathbf{V} = \mathbf{I}_n$ și $r = 0$.

Dacă $\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$, fie matricea simetrică, pozitiv semidefinită $\mathbf{C} = \mathbf{A}^T \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Există o transformare ortogonală de asemănare, definită de matricea ortogonală $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, care reduce matricea $\mathbf{C}$ la forma Schur, i.e.

$$\mathbf{v}^T \mathbf{C} \mathbf{v} = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r, 0, \dots, 0).$$

Valorile proprii nenule ale matricei $\mathbf{C}$ sunt pozitive întrucât

$\lambda_i = \mathbf{e}_i^T \Lambda \mathbf{e}_i = \mathbf{e}_i^T \mathbf{V} \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{V} \mathbf{e}_i = \|\mathbf{A} \mathbf{V} \mathbf{e}_i\|^2 > 0$ și, prin urmare, fără a reduce generalitatea, putem considera că acestea au fost ordonate descrescător, i.e

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_r > 0, \quad \lambda_j = 0, \quad j = r + 1 : n.$$

și defini numerele pozitive

$$\sigma_j = +\sqrt{\lambda_j}, \quad j = 1 : n.$$

$$\mathbf{v}^T \mathbf{C} \mathbf{v} = \Lambda = \begin{bmatrix} \Sigma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Considerăm următoarea partiție a matricei $\mathbf{V}$

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_1 & \mathbf{V}_2 \end{bmatrix},$$

unde $\mathbf{V}_1 = \mathbf{V}(:, 1 : r)$, $\mathbf{V}_2 = \mathbf{V}(:, r + 1 : n)$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{V}_1^T \mathbf{C} \mathbf{V}_1 & \mathbf{V}_1^T \mathbf{C} \mathbf{V}_2 \\ \mathbf{V}_2^T \mathbf{C} \mathbf{V}_1 & \mathbf{V}_2^T \mathbf{C} \mathbf{V}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

și de unde rezultă, printre altele, egalitatea blocurilor diagonale

$$\mathbf{V}_1^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{V}_1 = \Sigma_1^2, \quad \mathbf{V}_2^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{V}_2 = 0.$$

Cum blocul $\Sigma_1 \in \mathbb{R}^{r \times r}$ este o matrice nesară, rezultă

$$\Sigma_1^{-1} \mathbf{V}_1^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \Sigma_1^{-1} = (\mathbf{A} \mathbf{V}_1 \Sigma_1^{-1})^T \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \Sigma_1^{-1} = \mathbf{I}_r, \text{ i.e. matricea}$$

$$\mathbf{U}_1 = \mathbf{A} \mathbf{V}_1 \Sigma_1^{-1} \in \mathbb{R}^{m \times r}$$

are coloanele ortogonale și, prin urmare, poate fi completată cu o matrice $\mathbf{U}_2 \in \mathbb{R}^{m \times (m-r)}$ până la o matrice

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1 & \mathbf{U}_2 \end{bmatrix}$$

ortogonală. De asemenea, rezultă $\mathbf{U}_1^T \mathbf{A} \mathbf{V}_1 = \Sigma_1$ și $\mathbf{U}_2^T \mathbf{A} \mathbf{V}_1 = \mathbf{U}_2^T \mathbf{U}_1 \Sigma_1 = 0$. Pe de altă parte, rezultă, evident, $\mathbf{A} \mathbf{V}_2 = 0$.

$$\mathbf{U}^T \mathbf{A} \mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1^T \mathbf{A} \mathbf{V}_1 & \mathbf{U}_1^T \mathbf{A} \mathbf{V}_2 \\ \mathbf{U}_2^T \mathbf{A} \mathbf{V}_1 & \mathbf{U}_2^T \mathbf{A} \mathbf{V}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

În virtutea teoremei de mai sus observăm că

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \Sigma \mathbf{V}^T = \mathbf{U}_1 \Sigma_1 \mathbf{V}_1^T,$$

relație care definește *descompunerea* (sau *factorizarea*) *valorilor singulare* ale matricei $\mathbf{A}$. Numerele $\sigma_j > 0$, $j = 1 : r$ împreună cu numerele $\sigma_j = 0$, $j = r + 1 : n$ se numesc *valori singulare* ale matricei $\mathbf{A}$. Coloanele $\mathbf{v}_j = \mathbf{V} \mathbf{e}_j \in \mathbb{R}^n$, $j = 1 : n$, ale matricei $\mathbf{V}$ se numesc *vectori singulari* (la dreapta) ai lui $\mathbf{A}$ asociați valorilor singulare

$\sigma_j, j = 1 : n$, iar coloanele $\mathbf{u}_j = \mathbf{U}\mathbf{e}_j \in \mathbb{R}^m, j = 1 : n$ ale matricei $\mathbf{U}$ se numesc *vectori singolari la stânga* ai lui $\mathbf{A}$ asociați acelorași valori singulare. Rezultă că orice matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ se poate scrie ca sumă de produse externe de vectori singolari ponderați cu valorile singulare nenule

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}_1 \Sigma_1 \mathbf{V}_1^T = \sum_{j=1}^r \sigma_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T,$$

relație numită și descompunerea *redușă* a valorilor singulare, unde matricele $\mathbf{W}_j = \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T, j = 1 : r$ se numesc *componentele principale* ale matricei $\mathbf{A}$. Matricea Σ se numește *forma canonică pseudodiagonală* a matricei $\mathbf{A}$.

În legătură cu unicitatea DVS a unei matrice $\mathbf{A}$, din demonstrația teoremei rezultă că valorile singulare sunt rădăcinile pătrate pozitive ale valorilor proprii ale matricei $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ și, în consecință, sunt unic determinate. În ceea ce privește matricele de transformare, vectorii singolari asociați valorilor singulare nenule, i.e. submatricele $\mathbf{U}_1$ și $\mathbf{V}_1$ sunt, în esență (în sensul că putem multiplica simultan coloane individuale ale acestor matrice cu ± 1 , iar în cazul complex cu orice număr de modul unitar), unice în timp ce submatricele $\mathbf{U}_2$ și $\mathbf{V}_2$ pot fi orice completări ortogonale ale submatricelor $\mathbf{U}_1$ și $\mathbf{V}_1$.

Cadrul definitoriu de mai sus al valorilor singulare sugerează următoarea procedură de calcul

1. Se calculează $\mathbf{C} \leftarrow \mathbf{A}^T \mathbf{A}$
2. Folosind, de exemplu, algoritmul **QR** simetric se calculează
 $\lambda(\mathbf{C}) = \Lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ cu $\lambda_i \leq \lambda_{i-1}, i = 2 : n$
3. $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}, i = 1 : n$,

care, din păcate, nu este recomandată în aplicații practice din cauza erorilor introduse în formarea produsului $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$, erori ce pot fi amplificate ulterior pe parcursul calculelor. Algoritmul de calcul al valorilor singulare care s-a impus în practică, numit algoritmul **DVS** este un algoritm **QR** "mască" în sensul că acționează exclusiv asupra matricei $\mathbf{A}$ într-un mod echivalent cu acțiunea algoritmului **QR** simetric cu deplasare implicită asupra matricei $\mathbf{C}$.

Aplicații ale DVS

Descompunerea valorilor singulare reprezintă un instrument deosebit de util și de sigur în rezolvarea a numeroase probleme cu caracter aplicativ din diverse domenii științifice și tehnice, cum sunt teoria sistemelor, prelucrarea semnalelor, statistică etc.

1. Calculul normelor matriceale ortogonal invariante

Fie matricea $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n} (\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times n})$. Vom spune că o normă matriceală $\|\cdot\| : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}_+ (\|\cdot\| : \mathbb{C}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}_+)$ este ortogonal (unitar) invariantă dacă $\|\mathbf{UAV}\| = \|\mathbf{A}\|$ pentru toate matricele $\mathbf{U}, \mathbf{V}$ ortogonale (unitare).

Norma matriceală $\|\cdot\|_2$ indusă de norma euclidiană, i.e. definită de

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \max_{\|\mathbf{x}\|_2=1} \|\mathbf{Ax}\|_2$$

numită *norma spectrală*, precum și *norma Frobenius* $\|\cdot\|_F$ definită de

$$\| \mathbf{A} \|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2} = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}$$

sunt ortogonal invariante și, în consecință, se exprimă foarte simplu în termenii valorilor singulare $\sigma_i \in \sigma(\mathbf{A})$. Concret, avem

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}\|_2 &= \sigma_1, \\ \|\mathbf{A}\|_F &= \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \dots + \sigma_r^2}. \end{aligned}$$

Într-adevăr

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \|\Sigma\|_2 = \max_{\|\mathbf{x}\|_2=1} \|\Sigma \mathbf{x}\|_2 = \max_{\|\mathbf{y}\|_2=1} \|\Sigma \mathbf{y}\|_2 = \max_{\|\mathbf{y}\|_2=1} \sqrt{\sum_{i=1}^r \sigma_i^2 y_i^2} = \sigma_1,$$

se obține imediat din $\|\mathbf{A}\|_F = \|\Sigma\|_F$.

Desigur, pentru a calcula norma Frobenius a unei matrice determinarea prealabilă a valorilor singulare este o cale total neeficientă. În schimb, dacă se dispune de valorile singulare, calculul acestei norme pe baza relației de definiție devine eficient. Calculul normei spectrale este echivalent cu evaluarea valorii singulare maxime, ceea ce presupune un efort de calcul important și, de aceea, norma spectrală este utilizată destul de rar în aplicații dar joacă un rol important în dezvoltările teoretice.

Dacă matricea $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ este pătrată și nesingulară, având descompunerea valorilor singulare $\mathbf{A} = \mathbf{U} \Sigma \mathbf{V}^T$, atunci matricea inversă $\mathbf{A}^{-1}$ are expresia

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{V} \Sigma^{-1} \mathbf{U}^T = \mathbf{V} \cdot \text{diag} \left(\frac{1}{\sigma_1}, \frac{1}{\sigma_2}, \dots, \frac{1}{\sigma_n} \right) \cdot \mathbf{U}^T,$$

i.e.

$$\sigma(\mathbf{A}^{-1}) = \left\{ \frac{1}{\sigma_n}, \frac{1}{\sigma_{n-1}}, \dots, \frac{1}{\sigma_1} \right\}$$

întrucât valorile singulare sunt ordonate întotdeauna descrescător. Rezultă că descompunerea valorilor singulare pentru matricea $\mathbf{A}^{-1}$ este $\mathbf{A}^{-1} = \tilde{\mathbf{U}} \tilde{\Sigma} \tilde{\mathbf{V}}^T$, unde $\tilde{\mathbf{U}} = \mathbf{V}(:, n:-1:1)$, $\tilde{\mathbf{V}} = \mathbf{U}(:, n:-1:1)$, iar

$$\tilde{\Sigma} = \text{diag} \left(\frac{1}{\sigma_n}, \frac{1}{\sigma_{n-1}}, \dots, \frac{1}{\sigma_1} \right).$$

Aceste observații permit o exprimare interesantă a numerelor de condiționare la inversare a matricei nesingulare $\mathbf{A}$. Avem

$$\kappa_2(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_2 \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}$$

și

$$\kappa_F(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_F \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2 \cdot \sum_{i=1}^n \sigma_i^{-2}}.$$

Prin urmare, o matrice este cu atât mai bine condiționată la inversare cu cât valorile sale singulare sunt mai grupate. În particular, matricele ortogonale (unitare) $\mathbf{Q}$, având toate valorile singulare egale cu 1, au $\kappa_2(\mathbf{Q}) = 1$ și, prin urmare, sunt perfect condiționate la inversare.

2. Calculul rangului

Două matrice $\mathbf{A}$ și $\mathbf{B}$, de aceeași dimensiuni, se numesc *echivalente* dacă există matricele pătrate nesingulare $\mathbf{S}$ și $\mathbf{T}$ astfel încât

$$\mathbf{B} = \mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{T}$$

și *ortogonal (unitar) echivalente* dacă matricele $\mathbf{S}$ și $\mathbf{T}$ sunt ortogonale (unitare).

Rangul unei matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ este dat de numărul liniilor (sau coloanelor) sale liniar independente.

Considerăm cunoscut faptul că transformările de echivalență conservă rangul unei matrice. În consecință, din descompunerea valorilor singulare $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T$, rezultă că orice matrice este ortogonal (unitar) echivalentă cu forma sa canonică pseudodiagonală și, prin urmare, obținem imediat următorul rezultat.

Teorema 2. Rangul unei matrice este egal cu numărul valorilor sale singulare nenule, i.e.
 $\text{rang } \mathbf{A} = \text{rang } \mathbf{\Sigma} = r.$

Din nefericire, așa cum s-a mai menționat, acest rezultat nu poate fi folosit ca atare în aprecierea numerică a rangului unei matrice date întrucât descompunerea valorilor singulare *calculată* într-un mediu de calcul aproximativ (cum este cel care folosește reprezentarea în format virgulă mobilă) este descompunerea valorilor singulare exactă a unei matrice ușor perturbate. Cum însă în vecinătatea oricărei matrice există o mulțime densă de matrice de rang maximal rezultă că există toate șansele ca forma canonică pseudodiagonală calculată, pe care o vom nota cu $\hat{\mathbf{\Sigma}}$, să fie de rang maximal. De aceea, în practica numerică se utilizează conceptul de *rang numeric* care se definește în modul următor.

Definiția 1. Dată o toleranță $\varepsilon > 0$, rangul numeric r_ε al matricei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ este definit de cel mai mic dintre rangurile matematice ale tuturor matricelor de aceeași dimensiuni aflate la o distanță – definită corespunzător – de matricea $\mathbf{A}$ mai mică decât toleranța, i.e.

$$r_\varepsilon = \min_{\substack{\text{dist}(\mathbf{A}, \mathbf{X}) \leq \varepsilon \\ \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}} (\text{rang } \mathbf{X}) .$$

Dacă se utilizează distanța dintre două matrice definită cu ajutorul normei matriceale spectrale

$$\text{dist}_2(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|_2$$

sau, respectiv, cu ajutorul normei Frobenius

$$\text{dist}_F(\mathbf{A}, \mathbf{X}) = \|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|_F ,$$

atunci descompunerea valorilor singulare oferă mijloace de exprimare comode a rangului numeric. Baza acestor rezultate rezidă în următoarea teoremă.

Teorema 3. Fie $r = \text{rang } (\mathbf{A})$ și $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T = \sum_{j=1}^r \sigma_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T$ descompunerea valorilor singulare a matricei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, unde $\mathbf{u}_j = \mathbf{U}(:, j)$, $\mathbf{v}_j = \mathbf{V}(:, j)$ sunt coloanele matricelor ortogonale de transformare. Considerăm un întreg $k < r$ și definim matricea

$$\mathbf{A}_k = \sum_{j=1}^k \sigma_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T.$$

Atunci

$$\min_{\substack{\text{rang } \mathbf{X} = k \\ \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}}} \|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|_2 = \|\mathbf{A} - \mathbf{A}_k\|_2 = \sigma_{k+1}$$

și

$$\min_{\substack{\text{rang } \mathbf{X} = k \\ \mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}}} \|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|_F^2 = \|\mathbf{A} - \mathbf{A}_k\|_F^2 = \sum_{i=k+1}^r \sigma_i^2.$$

Demonstrație. Pentru precizare considerăm $m \geq n$ iar pentru simplificarea notațiilor notăm norma vectorială euclidiană cu $\|\cdot\|$. Din datele teoremei, mai precis din expresia matricei $\mathbf{A}_k$, avem în mod evident relația $\mathbf{U}^T \mathbf{A}_k \mathbf{V} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_k, 0, \dots, 0)$ de unde rezultă egalitatea $\mathbf{U}^T (\mathbf{A} - \mathbf{A}_k) \mathbf{V} = \text{diag}(0, \dots, 0, \sigma_{k+1}, \dots, \sigma_r, 0, \dots, 0)$ și, prin urmare, ținând seama de conservarea normelor vizate la transformări ortogonale, obținem $\|\mathbf{A} - \mathbf{A}_k\|_2 = \sigma_{k+1}$ și $\sigma(\mathbf{A}) = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\}$. Fie acum o matrice $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ de rang k dar altfel arbitrară. Pentru început, notând $\mathbf{V}(:, 1 : k+1) = \mathbf{V}_{k+1}$, vom arăta că există un vector nenul $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ astfel încât $\mathbf{w} \in \text{Ker} \mathbf{X} \cap \text{Im } \mathbf{V}_{k+1}$, i.e. $\mathbf{X}\mathbf{w} = \mathbf{0}$ și $\mathbf{w} = \mathbf{V}(:, 1 : k+1)\mathbf{z}$. Într-adevăr, considerând DVS $\mathbf{X} = \tilde{\mathbf{U}}_1 \tilde{\Sigma}_1 \tilde{\mathbf{V}}_1^T$ a lui $\mathbf{X}$, matricea $\mathbf{Y} = \tilde{\mathbf{V}}_1^T \mathbf{V}_{k+1} \in \mathbb{R}^{k \times (k+1)}$ având mai multe coloane decât linii are un subspațiu nucleu $\text{Ker} \mathbf{Y} \neq \{\mathbf{0}\}$, i.e. există un vector $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ cu $\|\mathbf{z}\| = 1$ astfel încât $\mathbf{Y}\mathbf{z} = \mathbf{0}$. Prin urmare, $\mathbf{w} = \mathbf{V}_{k+1}\mathbf{z}$ este vectorul căutat. Pe această bază avem secvența de inegalități

$$\begin{aligned} \sigma_1^2(\mathbf{A} - \mathbf{X}) &= \max_{\|\mathbf{y}\|=1} \|(\mathbf{A} - \mathbf{X})\mathbf{y}\|^2 \geq \|(\mathbf{A} - \mathbf{X})\mathbf{w}\|^2 = \|\mathbf{A}\mathbf{w}\|^2 = \|\mathbf{A}\mathbf{V}_{k+1}\mathbf{z}\|^2 = \|\mathbf{U}_{k+1}\Sigma_{k+1}\mathbf{z}\|^2 = \\ &= \sum_{i=1}^{k+1} \sigma_i^2 \mathbf{z}_i^2 = \sum_{i=1}^k \sigma_i^2 \mathbf{z}_i^2 + \sigma_{k+1}^2 (1 - \sum_{i=1}^k \mathbf{z}_i^2) = \sum_{i=1}^k (\sigma_i^2 - \sigma_{k+1}^2) \mathbf{z}_i^2 + \sigma_{k+1}^2 \geq \sigma_{k+1}^2, \end{aligned}$$

unde ultima inegalitate rezultă din ordonarea descrescătoare a valorilor singulare. Cum matricea $\mathbf{X}$ a fost o matrice arbitrară de rang k iar $\sigma_1^2(\mathbf{A} - \mathbf{X}) = \|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|_2^2$ rezultă că prima egalitate a teoremei este demonstrată.

Pentru demonstrarea celei de a doua egalități a teoremei vom utiliza inegalitatea lui Weyl [28], conform căreia $\sigma_{i+j-1}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) \leq \sigma_i(\mathbf{B}) + \sigma_j(\mathbf{C})$. Luând matricea $\mathbf{X}$ o matrice arbitrară de rang k avem $\sigma_{k+1}(\mathbf{X}) = 0$ și, prin urmare, aplicând inegalitatea lui Weyl obținem

$$\sigma_{k+1}(\mathbf{A}) = \sigma_{k+1}(\mathbf{A} - \mathbf{X} + \mathbf{X}) \leq \sigma_1(\mathbf{A} - \mathbf{X}) + \sigma_{k+1}(\mathbf{X}) = \sigma_1(\mathbf{A} - \mathbf{X}).$$

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{X}\|_F^2 = \sum_{i=1}^n \sigma_i^2(\mathbf{A} - \mathbf{X}) \geq \sum_{i=1}^{n-k} \sigma_i^2(\mathbf{A} - \mathbf{X}) \geq \sum_{i=k+1}^n \sigma_i^2(\mathbf{A})$$

ceea ce trebuia demonstrat.

Pe baza teoremei de mai sus se poate utiliza descompunerea valorilor singulare pentru exprimarea rangului numeric conform următorului rezultat.

Teorema 4. Fie $\sigma(\mathbf{A}) = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\}$ spectrul de valori singulare al matricei $\mathbf{A}$.

Dacă utilizăm funcția distanță atunci rangul numeric r al matricei A este egal cu numărul valorilor sale singulare superioare toleranței ε , i.e. este întregul r_ε care satisface condiția

$$\sigma_{r_\varepsilon} > \varepsilon \geq \sigma_{r_\varepsilon+1}.$$

Dacă utilizăm funcția distanță, atunci rangul numeric r_ε al matricei A rezultă din relația

$$\sum_{j>r_\varepsilon+1} \sigma_j^2 > \varepsilon^2 \geq \sum_{j>r_\varepsilon} \sigma_j^2.$$

Demonstrația acestor rezultate este imediată și este lăsată în sarcina cititorului.

Important este faptul că expresiile de mai sus, pentru definirea rangului numeric, pot fi utilizate cu succes pentru calculul acestuia pe baza descompunerii valorilor singulare ale matricei date *calculate* cu algoritmul **DVS**. De exemplu, numărul $\hat{r}_\varepsilon$ al valorilor singulare calculate $\hat{\sigma}_j$ superioare toleranței date este o foarte bună estimare a numărului r_ε de valori singulare exacte σ_j superioare valorii toleranței ε .

Încheiem acest paragraf cu sublinierea faptului că orice referire corectă, din punctul de vedere al calculului numeric, la rangul unei matrice trebuie să facă apel la valorile sale singulare și la conceptul de rang numeric. De exemplu, cea mai bună măsură a apropierei unei matrice pătrate de o matrice singulară este dată de valoarea sa singulară minimă. Alte criterii cum ar fi valoarea determinantului sau cel mai mic dintre modulele valorilor proprii pot furniza în acest sens o apreciere cu totul eronată.

Rezolvarea problemei generale ale celor mai mici pătrate

Descompunerea valorilor singulare oferă o soluție problemei generale a rezolvării, în sensul celor mai mici pătrate, a sistemelor liniare. Fie sistemul liniar cu m ecuații și n necunoscute

$$Ax = b,$$

respectiv cu $A \in R^{m \times n}$ și $b \in R^m$. Cazurile în care matricea A este de rang maximal (monică și/sau epică) au fost tratate în capitolele precedente ale lucrării. De aceea acum vom presupune situația generală în care

$$\text{rang}(A) \leq \min(m, n).$$

În cazul în care inegalitatea este satisfăcută strict, sistemul este, în general, incompatibil și admite o infinitate de pseudosoluții în sensul celor mai mici pătrate. Într-o astfel de situație se dorește calculul pseudosoluției CMMP de normă euclidiană minimă numită *pseudosoluția normală* a sistemului. Rezultatul fundamental care permite rezolvarea acestei probleme este dat de următoarea teoremă.

Teorema 5. Soluția problemei generale a celor mai mici pătrate: Oricare ar fi matricea $A \in R^{m \times n}$ și vectorul $b \in R^m$, sistemul $Ax = b$ admite o pseudosoluție normală unică $x^* \in R^n$. Dacă $\text{rang}(A) = r$ și $A = U\Sigma V^T = U_1\Sigma_1V_1^T$ este descompunerea valorilor singulare a matricei A , atunci pseudosoluția normală poate fi scrisă în forma

$$x^* = A^+b$$

unde

$$A^+ = V_1\Sigma_1^{-1}U_1^T \in R^{n \times m}$$

este pseudoinversa (Moore-Penrose) a matricei A .

Demonstrație: Considerăm reziduul de ecuație $r = b - Ax$ al sistemului (141) și calculăm norma sa euclidiană ținând seama de descompunerea valorilor singulare ale matricei A . Întrucât transformările ortogonale conservă norma euclidiană, avem

$$\|r\| = \|b - U \Sigma V^T x\| = \|U(U^T b - \Sigma V^T x)\| = \|U^T b - \Sigma V^T x\|.$$

Introducem notațiile și partițiile

$$d = U^T b = \begin{bmatrix} d' \\ d'' \end{bmatrix} \begin{matrix} r \\ m-r \end{matrix}, \quad y = V^T x = \begin{bmatrix} y' \\ y'' \end{bmatrix} \begin{matrix} r \\ n-r \end{matrix},$$

cu care devine

$$\|r\| = \|d - \Sigma y\| = \left\| \begin{bmatrix} d' - \Sigma_1 y' \\ d'' \end{bmatrix} \right\| = \sqrt{\|d' - \Sigma_1 y'\|^2 + \|d''\|^2}.$$

Cum d'' nu depinde de x , minimul normei lui r corespunde minimului termenului $\|d' - \Sigma_1 y'\| \geq 0$ care minim, datorită faptului că Σ_1 este nesingulară, este nul și se obține pentru

$$y' = \Sigma_1^{-1} d'.$$

toate pseudosoluțiile în sens CMMP ale sistemului se scriu sub forma

$$x = V \begin{bmatrix} \Sigma_1^{-1} d' \\ y'' \end{bmatrix}$$

cu $y'' \in \mathbb{R}^{n-r}$ arbitrar. Dintre acestea există una singură de normă euclidiană minimă, și anume cea care corespunde lui $y'' = 0$, întrucât

$$\|x\| = \sqrt{\|\Sigma_1^{-1} d'\|^2 + \|y''\|^2}.$$

În concluzie, unica pseudosoluție normală este

$$x^* = V \begin{bmatrix} \Sigma_1^{-1} (U^T b)_{(1:r)} \\ 0 \end{bmatrix} = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b.$$

Teorema este demonstrată.

Rezultatele de mai sus pot fi extinse fără dificultăți la cazul matricelor complexe $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$.

Evident, calculul pseudosoluției normale se face fără a calcula explicit pseudoinversa matricei A ci utilizând în mod eficient ultima din relațiile de mai sus, i.e.

$$x^* = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b = \sum_{j=1}^r \frac{V(:, j) \cdot (U(:, j))^T b}{\sigma_j},$$

unde r este rangul matricei A iar σ_j , $j = 1 : r$ sunt valorile sale singulare nenule. Rezultă următoarea schemă de calcul.

1. Se calculează DVS $U^T A V = \Sigma$ cu acumularea transformărilor U și V .
2. Se determină r - rangul (numeric al) matricei A .

3. $x = 0$
4. Pentru $j = 1:r$
 1. $\beta = (U(:, j))^T b$
 2. $\beta = \frac{\beta}{\sigma_j}$
 3. $x = x + V(:, j) \cdot \beta$

Problema CMMP poate fi extinsă impunând minimizarea normei euclidiene a rezidului de ecuație a unui sistem linear supradeterminat în prezența diverselor tipuri de restricții.

3. Calculul pseudoinversei

Pseudoinversa unei matrice generalizează conceptul de inversă, definit pentru matricele pătrate și nesingulare, la cazul unei matrice $m \times n$ oarecare.

Definiția 5. Fie matricea $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. O matrice $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$ se numește pseudoinversa matricei A dacă satisface următoarele patru condiții Moore-Penrose

$$\begin{cases} AXA = A \\ XAX = X \\ (AX)^T = AX \\ (XA)^T = XA \end{cases}$$

În cazul complex pseudoinversa este o matrice complexă care satisface cele patru condiții de mai sus în care transpunerea se înlocuiește cu conjugarea hermitică.

Următorul rezultat afirmă existența și unicitatea pseudoinversei și sugerează o modalitate eficientă de calcul a acesteia.

Teorema 5. Orice matrice $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ admite o pseudoinversă unică. Dacă $A = U\Sigma V^T$ este descompunerea valorilor singulare a matricei A , atunci pseudoinversa sa este

$$X = A^+ = V\Sigma^+U^T,$$

unde Σ^+ este pseudoinversa matricei Σ și are expresia

$$\Sigma^+ = \begin{bmatrix} \Sigma_1^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}.$$

Demonstrație. Pentru început observăm că $\Sigma\Sigma^+ = \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ și

$\Sigma^+\Sigma = \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, de unde rezultă că Σ^+ satisface cele patru condiții Moore-Penrose.

În continuare avem egalitățile

$$AA^+A = U\Sigma V^T V\Sigma^+ U^T U\Sigma V^T = U\Sigma\Sigma^+\Sigma V^T = U\Sigma V^T = A,$$

Pentru demonstrația unicității, presupunem existența a două pseudoinverse $X, Y \in \mathbb{R}^{n \times m}$ și fie $D = X - Y$. Din condițiile Moore-Penrose rezultă

$$\begin{cases} \mathbf{ADA} = \mathbf{0} \\ \mathbf{DAD} + \mathbf{DAY} + \mathbf{YAD} = \mathbf{D} \\ (\mathbf{AD})^T = \mathbf{AD} \\ (\mathbf{DA})^T = \mathbf{DA}. \end{cases}$$

De aici obținem $(\mathbf{AD})^T \mathbf{AD} = \mathbf{ADAD} = \mathbf{0}$, de unde rezultă $\mathbf{AD} = \mathbf{0}$. Similar $(\mathbf{DA})^T \mathbf{DA} = \mathbf{DADA} = \mathbf{0}$, deci $\mathbf{DA} = \mathbf{0}$. Din a doua din relațiile de mai sus rezultă $\mathbf{D} = \mathbf{0}$, deci $\mathbf{X} = \mathbf{Y}$. Prin urmare pseudoinversa unei matrice este unică. Pentru calculul pseudoinversei unei matrice se calculează DVS după care se utilizează expresia (154), conform căreia obținem următoarea expresie de calcul

$$\mathbf{A}^+ = \sum_{k=1}^r \frac{\mathbf{v}_k \mathbf{u}_k^T}{\sigma_k}, \quad r = \text{rang}(\mathbf{A}), \quad \mathbf{u}_k = \mathbf{U}(:, k), \quad \mathbf{v}_k = \mathbf{V}(:, k)$$

sau, pe componente,

$$\mathbf{A}^+(\mathbf{i}, \mathbf{j}) = \sum_{k=1}^r \frac{\mathbf{v}_{ik} \mathbf{u}_{jk}}{\sigma_k}, \quad \mathbf{i} = 1 : n, \quad \mathbf{j} = 1 : m.$$

Observație. Menționăm că pentru matricele $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ monice pseudoinversa se identifică cu pseudoinversa Moore-Penrose $\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$, care este o inversă la stânga întrucât $\mathbf{A}^+ \mathbf{A} = \mathbf{I}_n$, iar pentru matricele $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ epice pseudoinversa se identifică pseudoinversa normală $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{A}^T)^{-1}$, care este o inversă la dreapta întrucât $\mathbf{A} \mathbf{A}^+ = \mathbf{I}_m$.

Una dintre proprietățile cele mai interesante ale pseudoinversei (care se demonstrează fără dificultate) este aceea că pseudoinversa unei matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ este unica soluție de normă Frobenius minimă a problemei de minimizare

$$\min_{\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times m}} \|\mathbf{AX} - \mathbf{I}_m\|_F.$$