1. Szinguláris felbontás

Napjaink egyik fontos problémája a nagy dokumentumhalmazokban történő keresés illetve tematizálás. Sajnos egy dokumentum pontos jellemzéséhez hatalmas mennyiségű attribútumra van szükség. A cél, hogy kiválasszunk néhány olyan jellemző attribútumot vagy azokból számítható mennyiséget, amely még alkalmas a dokumentumok közelítő jellemzésére és páronkénti összehasonlítására. A dokumentumhalmazból egy mátrixot készítünk, melynek sorai a dokumentumoknak felelnek meg, oszlopai pedig az attribútumok értékét írják le. Így feladatunk a mátrix sorainak kisebb dimenziójú vektorokkal való helyettesítése. Ez a probléma vezet el az eredeti mátrix kis rangú mátrixszal történő közelítéséhez. Ugyanis, ha a közelelítő mátrix rangja k, akkor sorai felírhatóak k vektor lineáris kombinációjaként. Így a dokumentumokhoz tartozó sorvektorok egy k dimenziós vektorral jellemezhetők, az új paraméterek pedig a k-elemű bázisban történő felíráshoz tartozó koordináták lesznek. Egy mátrix kis rangú mátrixszal történő legjobb közelítése a XX. század elején megoldott probléma. Az eljárást a statisztikában *főkomponens analízisnek* illetve *legkisebb négyzetek módszerének* is nevezik. Az eljárás kulcsa a mátrixok *szinguláris felbontása*, melyet részletesen és több oldalról megvilágítunk ebben a fejezetben.

A bevezető szakaszban a felbontást és a közelítő eljárást egy egyszerű példán mutatjuk be, valamint kimondjuk a közelítés optimalitására vonatkozó legfontosabb állítást. A fejezet további részeiben a közelítést formálisan és részletesen tárgyaljuk és igazoljuk az optimalitásról szóló tételt. Az első szakaszban tisztázzuk, hogy mit jelent mátrixok közelítésének „jósága”, azaz bevezetjük a mátrixnorma fogalmát. A második szakaszban definiáljuk a szinguláris felbontást, több bizonyítást is mutatunk annak létezésére. A harmadik szakaszból kiderül, hogy milyen szoros kapcsolat áll fenn a szinguláris értékek és mátrixnormák között. Az utolsó szakaszban a szinguláris felbontás két alkalmazását tárgyaljuk, köztük megválaszoljuk a kis rangú mátrixszal való közelítés kérdését.

Példaként tekintsük az alábbi dokumentumhalmazt:

- *1. dokumentum:* „Vagy vagy, vagy nem vagy.”
- *2. dokumentum:* „Vagy vagy a Vagy, vagy vagy a Nem Vagy.”
- *3. dokumentum:* „Ha vagy a Vagy, nem vagy a Nem Vagy, ha vagy a Nem Vagy, nem vagy a Vagy.”

A dokumentumhalmaz jellemzésére a *szó-dokumentum mátrixot* használjuk, melynek sorai a dokumentumoknak, oszlopai a szavaknak felelnek meg. Az i-ik sor j-ik eleme megegyezik a j-ik szó előfordulásinak számával az i-ik dokumentumban.

Az így nyert mátrixot a továbbiakban A-val jelöljük. Természetesen A-ból nem állítható vissza az eredeti dokumentumhalmaz (hiszen a szavak előfordulási sorrendje nem szerepel benne), mégis úgy gondoljuk, hogy sorai jól jellemzik az egyes dokumentumokat. A gyakorlati szempontból is érdekes dokumentumhalmazoknál az így nyert mátrixnak 100000 oszlopa is lehet, ezért felmerül az igény

	a	ha	nem	vagy
1. dok.	0	0	1	4
2. dok.	2	0	1	6
3. dok.	4	2	4	8

az oszlopok számának csökkentésére. Kézenfekvőnek látszik a megoldás, hogy hagyjunk el néhány oszlopot a mátrixból. Nyilván olyan oszlopokat hagyunk el, amelyekben összességében kevés adat van, példánkon a másodikat és a harmadikat töröljük. Ez azt jelenti, hogy az A mátrixot az alábbi A' mátrixszal közelítjük.

$$A' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 4 \\ 2 & 0 & 0 & 6 \\ 4 & 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}$$

A közelítés hibáját az $A-A'$ mátrix *normájával*, vagyis az $\|A - A'\|$ nem negatív számmal mérjük. A mátrixnorma fogalmát a következő szakaszban általánosan is ismertetjük, most a *Frobenius-normát* használjuk, mely megegyezik az elemek négyzetösszegének négyzetgyökével. A példánkban ez

$$\|A - A'\|_F = \sqrt{1^2 + 1^2 + 2^2 + 4^2} \approx 4.69\,.$$

Az előbbi eredmény lényegesen javítható, ha a közelítésnél nem csak az attribútumok elhagyását (illetve kiválasztását) engedjük meg. A dokumentumokat leíró, új attribútumokat most az eredeti attribútumok valamilyen lineáris kombinációjából számítjuk. Célunk ismét az lesz, hogy egyrészt kevés attribútummal írjuk le az értékeket, másrészt jól közelítsük az eredeti mátrixot.

Először elkészítjük az A mátrix *szinguláris felbontását.* Általában egy $n \times m$ méretű $\mathrm{rk}(A)$ rangú A mátrix esetében ez megegyezik az

$$A = \sum_{i=1}^{\mathrm{rk}(A)} \sigma_i u_i v_i^T$$

minimális diadikus felbontással, ahol az u_i vektorok ortogonális rendszert alkotnak n dimenzióban, a v_i vektorok pedig m dimenzióban. Továbbá a σ_i számok egy nem növekvően rendezett pozitív valós sorozatot alkotnak, azaz $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_{\mathrm{rk}(A)} > 0$, ezeket *szinguláris értéknek* nevezik. A fejezet későbbi részében igazoljuk, hogy minden mátrixnak létezik ilyen felbontása és a szinguláris értékek egyértelműek. Megjegyezzük azt is, hogy a szinguláris felbontást a későbbiekben kissé eltérő módon fogjuk bevezetni, azonban a két felírás ekvivalenciájára is kitérünk majd.

Egyszerűen belátható, hogy az A-val megegyező méretű $u_i v_i^T$ diádokra $\left\|u_i v_i^T\right\|_F = 1$. Ezért a diadikus felbontásban szereplő tagokra $\left\|\sigma_i u_i v_i^T\right\|_F = \sigma_i$, vagyis a felbontásban az egyes diádok súlyát pont a megfelelő szinguláris értékek adják. A példánkban szereplő A mátrix rangja 3, a szinguláris értékeknek pedig

$\sigma_1 = 10.43$, $\sigma_2 = 2.57$, $\sigma_3 = 1.29$ adódik. A korábbi közelítéshez hasonlóan most is két attribútummal leírható dokumentumokat szeretnénk számítani, ezért az A márix 2 rangú közelítését keressük. Mohó módon válassztjuk ki a két legnagyobb (σ_1 ill. σ_2) súlyú diádot, így kapjuk az A_2-vel jelölt 2-rangú közelítést, azaz

$$A_2 = 10.43\, u_1 v_1^T + 2.57\, u_2 v_2^T = \begin{pmatrix} 0.52 & -0.22 & 0.21 & 3.96 \\ 1.56 & 0.19 & 0.67 & 6.03 \\ 4.10 & 1.96 & 1.84 & 5.99 \end{pmatrix}.$$

A közelítés hibája most $\|A - A_2\|_F = 1.29$, ami jelentős javulást mutat a korábbi A' mátrixhoz képest. Az A_2 mátrix sorai felírhatóak a $\{v_1, v_2\}$ bázisban, e felírás koordinátáiból kapjuk a dokumentumok leírására használandó két attribútumot.

A példához hasonlóan általában egy $n \times m$ méretű A mátrix egy k rangú közelítését ($k \leq \mathrm{rk}(A)$) az első k legsúlyosabb diád összegéből nyerjük, ezt A_k-val jelöljük. A használt jelölésekkel

$$A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T .$$

A fejezet legfontosabb állítását az alábbi tétel mondja ki.

1.1. tétel (Mises). *Az A mátrix k rangú közelítései közül A_k hibája minimális, ha a közelítés hibáját az $\|A - A_k\|$ mennyiséggel mérjük, ahol $\|\cdot\|$ egy tetszőleges unitér-invariáns mátrixnorma.*

A feltételben szereplő unitér-invariancia fogalmát a következő szakaszban vezetjük be, de megjegyezzük, hogy az eddig használt Frobenius-norma rendelkezik ezzek a tulajdonsággal. Ebben a tanulmányban a tételnek a Frobenius- és a 2-normára vonatkozó speciális esetét fogjuk igazolni, az általánosabb gondolatmenethez lásd: [1].

1.1. Vektorok és mátrixok normája

A $\nu\colon \mathsf{R}^{n\times m} \to \mathsf{R}$ leképezést *mátrixnormának* nevezzük, ha tetszőleges $A, B \in \mathsf{R}^{n\times m}$ mátrixszal és $\alpha \in \mathsf{R}$ számmal kielégíti az alábbi három összefüggést:

$$A \neq 0 \Longrightarrow \nu(A) > 0$$
$$\nu(\alpha A) = |\alpha|\nu(A)$$
$$\nu(A + B) \leq \nu(A) + \nu(B)$$

A mátrixnorma $m = 1$ speciális eseteként adódik a *vektornorma*, először néhány szót ejtünk erről és utána a mátrixokéról. Vektorok *2-normáját* az alábbi egyenlőséggel definiáljuk, ahol v egy n-dimenziós vektor:

$$\|v\|_2 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |v_i|^2} = \sqrt{v^T v}\,.$$

Az első két norma-axióma nyilvánvalóan teljesül, a háromszög-egyenlőtlenség pedig a Cauchy-egynlőtlenség felhasználásával igazolható. A Cauchy-egyenlőtlenség vektorok skaláris szorzata és 2-normája közti kapcsolatot ír le:

$$|x^T y| \leq \|x\|_2 \, \|y\|_2 \,,$$

ahol egyenlőség pontosan akkor van, ha x és y lineárisan összefüggők.

Vektornormákat más módon is definiálhatnánk, például négyzetgyökvonás és négyzetre emelés helyett tekinthetnénk $1/p$-ik illetve p-ik hatványt is. Azonban a 2-normát egy fontos tulajdonság tünteti ki a lehetséges vektornormák közül. Egy vektornormát *unitér-invariánsnak* nevezünk, ha tetszőleges x vektor és U ortogonális mátrix esetén

$$\|x\| \; = \|Ux\| \; .$$

Először megmutatjuk, hogy a 2-norma rendelkezik a fenti tulajdonsággal:

$$\|x\|_2{}^2 = x^T x = x^T U^T U x = (Ux)^T (Ux) = \|Ux\|_2{}^2,$$

tetszőleges x vektorral és U ortogonális mátrixszal, ahonnan adódik az állítás. Másrészt a fordított irányhoz legyen $\|\cdot\|$ egy tetszőleges unitér-invariáns norma, és x_1 egy olyan vektor, melyre $\|x_1\| \; = 1$. Ekkor az $\{\, x \mid \|x\| \; = 1\,\}$ halmaz elemei felírhatóak Ux_1 alakban valamely U ortogonális mátrixszal. Az előző egyenlőséglánc felhasználásával e halmaz elemeinek 2-normája megegyezik $\|x_1\|_2$ mennyiséggel. Ezzel igazoltuk a következő állítást:

1.2. állítás. *Egy $\|\cdot\|$ vektornorma pontosan akkor unitér-invariáns, ha valamely $c \geq 0$ konstanssal $\|\cdot\| \; = c\|\cdot\|_2$, azaz ha megegyezik a 2-norma konstansszorosával.*

Az unitér-invariancia fogalma a vektorok és normák geometriai jelentésével is jól magyarázható. A vektort egy irányított szakasznak képzeljük, a normája megegyezik annak „hosszával". Az ortogonális mátrixszal való szorzás pedig a forgatás fogalmát általánosítja magasabb dimenziókban. Így egy norma unitér-invarianciája azt a tulajdonságot írja le, hogy a vektor hossza forgatás közben nem változik.

Most áttérünk mátrixok normájának tárgyalására. Két különböző mátrixnormát fogunk bevezetni és használni. Először a vektorok 2-normájához hasonló módon definiálunk mátrixnormát:

$$\|A\|_F \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} A_{ij}^2}\,,$$

amelyet *Frobenius-normának* nevezünk.

A Frobenius-norma a Cauchy-egynlőtlenséghez hasonló összefüggést is kielégít:

1.3. állítás. *Tetszőleges $A \in \mathsf{R}^{n\times m}, B \in \mathsf{R}^{m\times p}$ mátrixok esetén*

$$\|AB\|_F \; \leq \|A\|_F \, \|B\|_F \, .$$

A bizonyítás elemi lépésekkel végezhető a Cauchy-egyenlőtlenség felhasználásával. Egy mátrixnormát *konzisztensnek* nevezünk, ha összeszorozható mátrixok és szorzatuk kielégíti a fenti egyenlőtlenséget. Ezzel a tulajdonsággal nem minden mátrixnorma rendelkezik, pedig a konzisztenciára nagy szükség van iterációs algoritmusok hibabecslésénél. Ilyen eljárásokban az n-ik lépés hibavektorát az $n-1$-ikből egy iterációs mátrix szorzásával kapjuk. Ha például az összes iterációs mátrix normája kisebb $\frac{1}{2}$-nél, akkor a norma konzisztenciájából adódik a hiba $(\frac{1}{2})^n$ sebességű lecsengése.

A második általunk használt mátrixnormát úgy definiáljuk, hogy az konzisztens legyen a vektorok 2-normájával, azaz szeretnénk ha minden x vektorra és A mátrixra teljesülne a következő egyenlőtlenség:

$$\|Ax\|_2 \leq \|A\| \, \|x\|_2 \, .$$

A egyenlőtlenségből adódik egy alsó becslés $\|A\|$ értékére, ezzel az alsó becsléssel definiáljuk mátrixok *2-normáját*, más néven *spektrálnormáját*:

$$\|A\|_2 \stackrel{\text{def}}{=} \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 \, .$$

A képletet röviden úgy értelmezhetjük, hogy egy A mátrix esetén $\|A\|_2$ egy x vektor A mátrixszal történő szorzásával elérhető „legnagyobb nyújtás” mértékét határozza meg. A norma-axiómák teljesülése mindkét esetben egyszerűen ellenőrizhető a vektorok 2-normájának tulajdonságaiból.

Most néhány olyan összefüggést mutatunk, melyek szintén meghatározzák az eddig megismert mátrixnormákat. Tetszőleges $A \in \mathsf{R}^{n\times m}$ mátrix esetén az A^TA mátrix szimmetrikus és pozitív szemidefinit, ezért sajátértékei nem negatív valós számok, melyeket $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_m \geq 0$ jelöl.

1.4. állítás.

$$\|A\|_F = \sqrt{\operatorname{tr}(A^TA)} \tag{1a}$$

$$\|A\|_F = \sqrt{\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_m} \tag{1b}$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_1} \tag{1c}$$

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1,\, \|y\|_2=1} |y^TAx| \tag{1d}$$

$$\|A\|_2 = \left\|A^T\right\|_2 \tag{1e}$$

Bizonyítás: Az A^TA mátrix főátlójában szereplő j-ik elem megegyezik az A mátrix j-ik oszlopában előforduló elemek négyzetösszegével. Így $\operatorname{tr}(A^TA)$ nem más mint A összes elemének négyzetösszege, ezzel igazoltuk az első egyenlőtlenséget. A második összefüggés pedig az első következménye, hiszen egy mátrix nyoma megegyezik sajátértékeinek összegével. A harmadik összefüggéshez:

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \sqrt{|x^TA^TAx|} = \sqrt{\lambda_1} \, .$$

A negyedik egyenlőség esetén a $\geq$ irány a Cauchy-egyenlőtlenségből adódik, mert

$$\|Ax\|_2 = \|y\|_2 \|Ax\|_2 \geq |y^T Ax| ,$$

tetszőleges y és x vektorra, melynél $\|x\|_2 = \|y\|_2 = 1$. Legyen x_1 az $\|Ax\|_2$ maximumát beállító vektor, ezt behelyettesítve az előző egyenlőtlenségbe kapjuk a $\geq$ irányt. Másrészt x_1 és $y_1 := \frac{1}{\|Ax_1\|_2} Ax_1$ választással

$$|y_1^T Ax_1| = \|Ax_1\|_2 = \|A\|_2$$

adódik, amivel a $\leq$ irányt is beláttuk. Végül az utolsó összefüggés a negyedik következménye, hiszen a szimmetrikus kifejezésben szereplő A lecserélhető A^T-ra. □

Mátrixok normájához is társítható a vektorokéhoz hasonló geometriai jelentés. Tetszőleges A mátrix esetén az

$$E_A \stackrel{\text{def}}{=} \{ Ax \mid \|x\|_2 = 1 \}$$

egy ellipszoidot határoz meg, melynek dimenziója $\mathrm{rk}(A)$. A mátrix normája szemléletesen ennek az ellipszoidnak a „nagyságát" jelenti. Az ellipszoidot körbevehetjük egy olyan $\mathrm{rk}(A)$-dimenziós téglatesttel, melynek élei párhuzamosak a főtengelyekkel, és az élek hossza megegyezik a főtengelyek hosszával. Ekkor a Frobenius-norma megegyezik a téglatest leghosszabb testátlójával, a 2-norma pedig annak leghosszabb élével vagyis a legnagyobb főtengely hosszával. Ez az 1b. és az 1c. egyenlőségből adódik felhasználva, hogy az ellipszoid főtengelyeinek hossza megegyezik $A^T A$ sajátértékeivel (utóbbi bizonyításához lásd: [2]).

Ha egy A mátrixot az U^T és a V ortogonális mátrixokkal szorzunk, akkor E_A-ból forgatással nyerjük az $E_{U^T AV}$ ellipszoidot. A mátrix normájától azt várnánk, hogy ne változzon e művelet hatására. E tulajdonság azonban nem igaz tetszőleges normára.

1.5. definíció. *Egy $\|\cdot\|$ mátrixnormát* unitér-invariánsnak *mondunk, ha tetszőleges U és V ortogonális mátrixokkal*

$$\|U^T AV\| = \|A\| .$$

1.6. állítás. *A Frobeinus és a 2-normák unitér-invariánsak.*

Bizonyítás: A 2-normára már korábban beláttuk, a Frobenius-normára pedig nyilvánvaló, hogy egy mátrix és transzponáltja esetén megegyezik, ezért elég azt megmutatni, hogy egy ortogonális mátrixszal balról szorozva nem változik a norma. Utóbbi a 2-norma esetén abból adódik, hogy a maximalizálandó $\|Ax\|_2 = \|U^T Ax\|_2$ bármely x esetén. A Frobenius-norma unitér-invarianciája szintén visszavezethető vektorok 2-normájáéra, hiszen az U mátrixszal szorozhatunk oszloponként, és a normát is számíthatjuk az oszlopokéból. □

Az unitér-invariáns normák karakterizálása nehezebb probléma mint a vektorokról szóló 1.2. állítás, az erről szóló Neumann Jánostól származó tételhez lásd: [1].

A dolgozat hátralevő részében vektorok 2-normájára egyszerűen a $\|\cdot\|$ jelölést, mátrixokéra pedig a $\|\cdot\|_2$ jelölést, Frobenius-normára a $\|\cdot\|_F$ jelölést használjuk.

1.2. Szinguláris felbontás

Egy nem szükségszerűen négyzetes $A \in \mathsf{R}^{n\times m}$ mátrix *szinguláris felbontásán (singular value decomposition, SVD)* az olyan

$$A = U\Sigma V^T$$

szorzattá bontást értjük, ahol $U \in \mathsf{R}^{n\times n}$, $V \in \mathsf{R}^{m\times m}$ ortogonális mátrixok, továbbá a Σ mátrix A-val megegyező méretű és a bal felső sarokból 45°-ban lefele elhelyezkedő $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$ pozitív számokat csupa 0 követ és a többi elem szintén 0. A σ_i számokat *szinguláris értékeknek* nevezzük, és a $\sigma_i := 0$ választással terjesztjük ki az $i > r$ esetre. A felbontásból látható, hogy $\mathrm{rk}(A) = \mathrm{rk}(\Sigma) = r$. Az U és a V oszlopait *bal-* illetve *jobboldali szinguláris vektoroknak* mondjuk. Felszínesen nézve a felbontást arra gondolhatnánk, hogy mátrixok diagonalizálásának általánosításáról van szó, ugyanakkor az alábbi tétel bizonyításaiból látható, hogy a szinguláris felbontás visszavezethető szimmetrikus mátrix spektrálfelbontására. Megjegyezzük, hogy a kapcsolat fordítva is fenn áll: egy szimmetrikus mátrix SVD-jéből egyszerű változtatással megkapható spektrálfelbontása.

1.7. tétel. *Tetszőleges $A \in \mathsf{R}^{n\times m}$ mátrixhoz léteznek $U \in \mathsf{R}^{n\times n}$, $V \in \mathsf{R}^{m\times m}$ ortogonális mátrixok, melyekkel*

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

ahol

$$\Sigma \in \mathsf{R}^{n\times m}, \qquad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \Sigma_+ = \mathrm{diag}\langle \sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r \rangle,$$

továbbá $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$.

Az állításra három bizonyítást is mutatunk, melyek az U, V és Σ mátrixok illetve σ_i számok jelentését több oldalról is megvilágítják.
1. bizonyítás: Teljes indukciót alkalmazunk $\min\{n, m\}$ mennyiségre. Ha $\min\{n, m\} = 1$, akkor az A mátrix egyetlen $a := A$ vektorból áll és feltesszük, hogy ez oszlopvektor. Az a vektorhoz biztosan található olyan ortogonális mátrix, mellyel $U^T a = \|a\| e_1$, vagyis $\Sigma = \|a\| e_1$ és $V = (1)$ választással adódik az állítás.

A továbbiakban a $\min\{n, m\} > 1$ esetet vezetjük vissza egy $(n-1) \times (m-1)$ méretű mátrix felbontására. Feltesszük, hogy $A \neq 0$ különben a felbontás triviális.

$$\sigma_1 := \|A\|_2 = \max_{\|v\|=1} \|Av\| \qquad v_1 := \operatorname{argmax}_{\|v\|=1} \|Av\| \qquad u_1 := \frac{1}{\sigma_1} Av_1$$

Egészítsük ki továbbá az u_1 és v_1 vektorokat $U_1 := (u_1\, u_2\, \ldots\, u_n)$ és $V_1 := (v_1\, v_2\, \ldots\, v_m)$ ortogonális mátrixokká. Ekkor a w, z és A_2 jelöléseket bevezetve

$$U_1^T A V_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1 & w^T \\ z & A_2 \end{pmatrix}, \quad U_1^T A v_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ z \end{pmatrix}, \quad V_1^T A^T u_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ w \end{pmatrix}.$$

Az 1.4. állítás szerint $\sigma_1 = \|A\|_2 = \|A^T\|_2$, ezért az $\|u_1\| = \|v_1\| = 1$ vektorok esetén $\|Au_1\| \leq \sigma_1$ és $\|A^T v_1\| \leq \sigma_1$. Innen a vektornorma unitér-invarianciáját felhasználva kapjuk, hogy

$$\left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ z \end{pmatrix} \right\| \leq \sigma_1 \qquad \text{és} \qquad \left\| \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ w \end{pmatrix} \right\| \leq \sigma_1.$$

Ez viszont csak úgy lehetséges, ha $z = w = 0$, vagyis igazoltuk, hogy

$$U_1^T A V_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}.$$

Indukciós feltevésünk alapján az $(n-1) \times (m-1)$ méretű A_2 mátrixhoz találhatók U_2 és V_2 ortogonális mátrixok, melyekkel $U_2^T A_2 V_2 = \Sigma_2$. Az

$$U^T := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2^T \end{pmatrix} U_1^T \qquad \text{és} \qquad V^T := V_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V_2 \end{pmatrix}$$

választással kapjuk a kívánt felbontását A-nak:

$$U^T A V = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \Sigma_2 \end{pmatrix} = \Sigma.$$

□

2. bizonyítás: Az $A^T A$ mátrix szimmetrikus és pozitív szemidefinit, ezért ortogonális transzformációval diagonalizálható, és a sajátértékek nem negatív valós számok. A sajátértékek legyenek $\sigma_1^2 \geq \sigma_2^2 \geq \cdots \geq \sigma_r^2 > 0$. Az ezekhez tartozó sajátvektorokból alkotott ortogonális mátrixot jelölje V, ekkor

$$V^T A^T A V = \begin{pmatrix} \Sigma_+^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

A mátrixot két részre osztva $V = (V_r\, V_2)$, ahol $V_r \in \mathsf{R}^{m \times r}$ a pozitív sajátértékhez tartozó sajátvektorokat tartalmazza. Vagyis

$$V_r^T A^T A V_r = \Sigma_+^2$$

Vezessük be az

$$U_r := AV_r\Sigma_+^{-1}$$

jelölést, ekkor

$$A = U_r\Sigma_+V_r^T.$$

Az U_r vektorai ortogonális vektorrendszert alkotnak, ezt kiegészítve az $U := (U_r\, U_2)$ ortogonális mátrixszá

$$A = U\begin{pmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}V^T.$$

□

3. bizonyítás: Tekintsük az alábbi $(n+m)\times(n+m)$ mértű mátrixot:

$$M := \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix},$$

amely szimmetrikus, ezért ortogonális tramszformációval diagonalizálható és sajátértékei valósak. Vezessük be a következő jelöléseket:

- $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$ jelölje M összes pozitív sajátértékét;
- az ezen értékekhez tartozó sajátvektorok teljes ortogonális vektorrendszerét jelölje $w_1, w_2, \ldots w_r$;
- $\begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix} := w_i$, ahol $u_i \in \mathsf{R}^n$ és $v_i \in \mathsf{R}^m$;
- $U_r := (u_1\, u_2\, \ldots\, u_r)$ és $V_r := (v_1\, v_2\, \ldots\, v_r)$, ahol $U_r \in \mathsf{R}^{n\times r}$ és $V_r \in \mathsf{R}^{m\times r}$ mátrixok;
- $\Sigma_+ := \operatorname{diag}\langle\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r\rangle$.

A bevezetett jelölésekkel

$$\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_r \\ V_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_r \\ V_r \end{pmatrix}\Sigma_+,$$

ahonnan

$$AV_r = U_r\Sigma_+\,, \tag{3}$$

$$A^TU_r = V_r\Sigma_+\,. \tag{4}$$

Elég volna belátnunk, hogy $U_r^TU_r = V_r^TV_r = \frac{1}{2}I$, mert akkor $U_r' := \sqrt{2}\,U_r'$ és $V_r' := \sqrt{2}\,V_r'$ választással a 3 egyenlőségből $A = U_r'\Sigma_+V_r'$ is adódna. A tétel bizonyítását pedig úgy kapnánk, hogy az U_r' és V_r' mátrixokat kibővítenénk az U és V ortogonális mátrixokká, melyekkel

$$A = U\begin{pmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}V^T.$$

A továbbiakban tehát az $U_r^T U_r = V_r^T V_r = \frac{1}{2}I$ állítást igazoljuk. Egyrészt tudjuk, hogy

$$I = (U_r^T \, V_r^T) \begin{pmatrix} U_r \\ V_r \end{pmatrix} = U_r^T U_r + V_r^T V_r \,, \tag{5}$$

hiszen az M mátrix sajátvektoraiból alkotott ortogonális vektororrendszerről van szó. Másrészt a 3. és a 4. egyenlőség felhasználásával

$$\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_r \\ -V_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -AV_r \\ A^T U_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -U_r \Sigma_+ \\ V_r \Sigma_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_r \\ -V_r \end{pmatrix} (-\Sigma_+) \,,$$

vagyis az $\begin{pmatrix} U_r \\ -V_r \end{pmatrix}$ oszlopai valamely $-\sigma_i < 0$ negatív sajátértékhez tartozó sajátvektorok. Viszont a szimmetrikus M mátrix különböző sajátértékeihez tartozó sajátvektorai ortogonálisak, ezért

$$0 = (U_r^T \; -V_r^T) \begin{pmatrix} U_r \\ V_r \end{pmatrix} = U_r^T U_r - V_r^T V_r \,.$$

Ebből és az 5 egyenlőségből kapjuk, hogy $U_r^T U_r = V_r^T V_r = \frac{1}{2}I$, amiből már láttuk, hogy következik az állítás. □

A három bizonyításban eltérő módon jutottunk el az SVD felbontáshoz, ezekből kiderültek az alábbi fontos tulajdonságok, melyeket később gyakran hivatkozás nélkül is használni fogunk.

- Az u_1 és v_1 szinguláris vektorok az $|x^T Ay|$ értékét maximalizálják. Az u_k és v_k vektorok szintén az $|x^T Ay|$ mennyiséget maximalizálják azzal a további megkötéssel, hogy u_k a már meghatározott $u_1, u_2, \ldots, u_{k-1}$ vektorok és v_k a $v_1, v_2, \ldots, v_{k-1}$ szinguláris vektorokkal együtt ortogonális rendszert alkosson. A szinguláris értékek pedig megegyeznek a felvett függvényértékkel, vagyis $\sigma_i = |u_i^T A v_i|$.
- Az $A = U^T \Sigma V$ felbontásban U oszlopai az AA^T mátrix, és V oszlopai az $A^T A$ mátrix sajátvektoraiból alkotott teljes ortogonális vektorrendszerek. A szinguláris értékek pedig az AA^T illetve az AA^T mátrix sajátértékeinek négyzetgyökei.
- Egy A mátrix szinguláris értékei az $\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^T & 0 \end{pmatrix}$ mátrix pozitív sajátérékeivel egyeznek meg. A szinguláris vektorpárokat az ezekhez tartozó sajátvektorok partícionálásával nyerjük.

A tétel bizonyításából az is látható, hogy a szinguláris értékek és maga a Σ mátrix egyértelmű. A szinguláris vektorok egyértelműségéről pedig annyi igaz, hogy tetszőleges c konstanssal megegyező szinguláris értékhez tartozó bal- és jobboldali vektorok által generált tér egyértelmű. A nem egyértelműség egyik forrása, hogy az u_i,v_i párt mindig helyettesíthetjük a $-u_i$,$-v_i$ párral. A másik forrás abból adódik, hogy a c nem szükségszerűen egyszeres szinguláris érték, ilyenkor több ortogonális vektorrendszer is választható bázisnak.

Végül rátérünk az SVD geometriai jelentésére, és ezen a ponton derül ki az is, hogy milyen szoros kapcsolat áll fenn az SVD és a mátrixnormák között (pontosabban az unitér-invariáns normák között.) Idézzük fel az $E_A \stackrel{\text{def}}{=} \{ Ax \mid \|x\|_2 = 1 \}$ ellipszoidot. Az E_A ellipszoidnak E_Σ elforgatottja, viszont utóbbiból a főtengelyek hossza könnyen számítható, azok megegyeznek a σ_i értékekkel. A geometriai szemléletből és algebrailag is látható, hogy egy unitér-invariáns $\|\cdot\|$ norma esetén $\|A\| = \|\Sigma\|$, vagyis a szinguláris értékekből számítható $\|A\|$. Példaként említjük a Frobenius- illetve a 2-normát:

$$\|A\|_2 = \|\Sigma\|_2 = \sigma_1, \tag{6}$$

$$\|A\|_F = \|\Sigma\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{r} \sigma_i^2}. \tag{7}$$

1.3. A szinguláris értékek meghatásozása normákkal

Az előző szakasz utolsó két egyenlőségét fogjuk általánosítani, melyekben megmutattuk, hogy a 2- és a Frobenius-normák hogyan számíthatók a szinguláris értékekből. Most a fordított irányú kapcsolattal foglalkozunk, vagyis a többi szinguláris értéket a normákkal meghatározó formulákról lesz szó.

Először szimmetrikus mátrixok sajátérékeit karakterizáló összefüggést mutatunk, mely egyszerűen átvihető lesz a szinguláris értékekre.

1.8. tétel (Courant-Fischer). *Legyen $A \in \mathsf{R}^{n\times n}$ egy szimmetrikus mátrix, melynek sajátértékei a $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ számok, ekkor*

$$\lambda_k = \max_{\dim(\mathcal{S})=k} \min_{\substack{x\in\mathcal{S} \\ \|x\|=1}} x^T A x,$$

$$\lambda_k = \min_{\dim(\mathcal{S})=n-k+1} \max_{\substack{x\in\mathcal{S} \\ \|x\|=1}} x^T A x,$$

ahol $\mathcal{S}$ a R^n megfelelő dimenziós alterét jelöli.

Bizonyítás: Az A mátrix spektrálfelbontásában a $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ sajátértékekhez tartozó sajátvektorokat jelölje $q_1, q_2, \ldots, q_n$.

Az első egyenlőségben a maximalizáláskor választhatjuk az $\mathcal{S}' := \operatorname{span}\{q_1, q_2, \ldots, q_k\}$ alteret, ekkor bármely $x \in \mathcal{S}'$, $\|x\| = 1$ vektorra $x^T A x \geq \lambda_k$, tehát

$$\lambda_k \leq \max_{\dim(\mathcal{S})=k} \min_{\substack{x\in\mathcal{S} \\ \|x\|=1}} x^T A x.$$

Másrészt megmutatjuk, hogy a jobb oldali mennyiség λ_k-nál nem nagyobb. Legyen $\mathcal{S}$ egy tetszőleges k-dimenziós altér, ekkor

$$\mathcal{S} \cap \operatorname{span}\{q_k, q_{k+1}, \ldots, q_n\} \neq \emptyset,$$

mert $\dim(\text{span}\{q_k, q_{k+1}, \ldots, q_n\}) = n - k + 1$. Legyen x' egy $\|x'\| = 1$ vektor a metszetben, erre a vektorra $x'^T A x' \leq \lambda_k$. Vagyis bármely $\mathcal{S}$ altér esetén

$$\lambda_k \geq \min_{\substack{x \in \mathcal{S} \\ \|x\|=1}} ,$$

amivel a $\geq$ irányt is igazoltuk az első egyenlőséghez.

A második egyenlőséget nagyon hasonló módon igazoljuk. Egyrészt a $\geq$ irány adódik az $\mathcal{S}' := \text{span}\{q_k, q_{k+1}, \ldots, q_n\}$ választással. Másrészt egy tetszőleges $n - k + 1$-dimenziós S altér esetén

$$S \cap \text{span}\{q_1, q_2, \ldots, q_k\} \neq \emptyset,$$

ahonnan a $\leq$ irány is látható. □

1.9. következmény. *Tetszőleges $A \in \mathsf{R}^{n \times m}$ mátrix σ_k szinguláris értékére*

$$\sigma_k = \max_{\dim(\mathcal{S})=k} \min_{\substack{x \in \mathcal{S} \\ \|x\|=1}} \|Ax\| , \quad (8)$$

$$\sigma_k = \min_{\dim(\mathcal{S})=m-k+1} \max_{\substack{x \in \mathcal{S} \\ \|x\|=1}} \|Ax\| , \quad (9)$$

ahol $\mathcal{S}$ a R^n megfelelő dimenziójú altere.

Bizonyítás: Az 1.8. tételt alkalmazva az $A^T A$ mátrixra kapjuk a két egyenlőséget. □

A 9. egyenlőségben az $\mathcal{S}$ altér vektorait felírhatjuk egy $(n - k + 1)$-elemű bázisában, mely ortogonális vektorrendszert alkot. Innen kapjuk a 6. egyenlőség általánosítását:

1.10. következmény. *Az $A \in \mathsf{R}^{n \times m}$ mátrix esetén*

$$\sigma_k = \min_U \|AU\|_2 ,$$

ahol a minimumot az összes $m \times (m - k + 1)$ méretű U mátrix fölött vesszük, melynek sorai ortogonális vektorrendszert alkotnak.

Most áttérünk a 7. egyenlőség általánosítására. Ha az $A \in \mathsf{R}^{n \times m}$ mátrixot egy $W \in \mathsf{R}^{m \times m}$ ortogonális mátrixszal szorozzuk, akkor a Frobenius-norma változatlan marad, vagyis $\|A\|_F = \|AW\|_F$. A továbbiakban arra fogunk törekedni, hogy az elemek négyzetösszegének nagy része az első k oszlopban koncentrálódjon. Az első k oszlop kiválasztását egy mátrixszorzással helyettesítjük. Bevezetjük az $I_{m,k} := (e_1\, e_2\, \ldots\, e_k)$ jelölést, ahol $e_i \in \mathsf{R}^m$ az i-ik egységvektor. Egy m oszlopból álló M mátrixra, $MI_{m,k}$ az első k oszlopból álló mátrixszal egyezik meg. A jelölést felhasználva a W ortogonális mátrix választásával célunk az $\|AWI_{k,m}\|_F$ mennyiség maximalizálása.

1.11. tétel. *Tetszőleges $A \in \mathsf{R}^{n\times m}$ mátrix esetén*

$$f(A,k) := \max_{\substack{W\in\mathsf{R}^{m\times m} \\ W \text{ ortogonális}}} \|AWI_{k,m}\|_F = \sqrt{\sigma_1^2+\sigma_2^2+\cdots+\sigma_k^2},$$

ahol σ_i az A mátrix i-ik szinguláris értéke.

Bizonyítás: Az A mátrix SVD-je legyen $A = U\Sigma V^T$. Ekkor felhasználva a Frobenius-norma unitér-invarianciáját, majd $W' = V^T W$ helyettesítést alkalmazva,

$$\begin{aligned} f^2(A,k) &= \max_{W \text{ortogonális}} \|AWI_{k,m}\|_F{}^2 \\ &= \max_{W \text{ortogonális}} \left\|\Sigma V^T W I_{k,m}\right\|_F{}^2 \\ &= \max_{W' \text{ortogonális}} \|\Sigma W' I_{k,m}\|_F{}^2. \end{aligned}$$

A legutolsó mennyiséget fogjuk alulról és felülről is becsülni. Egyrészt a $W' = I$ választással kapjuk, hogy $f^2(A,k) \geq \sigma_1^2+\sigma_2^2+\cdots+\sigma_k^2$. Másrészt legyen W' egy tetszőleges ortogonális mátrix. Ekkor $W'I_{k,m}$ oszlopainak normája egységnyi, ezért $\|W'I_{k,m}\|_F{}^2 = k$. Jelölje α_i a $W'I_{k,m}$ mátrix i-ik sorában lévő elemek abszolút négyzetösszegét. E számokra $0 \leq \alpha_i \leq 1$ és $\sum_{i=1}^m \alpha_i = \|W'Ik,m\|_F{}^2 = k$. Ezek felhasználásával

$$\begin{aligned} \|\Sigma W'Ik,m\|_F{}^2 &= \sigma_1^2\alpha_1+\cdots+\sigma_m^2\alpha_m \\ &\leq \sigma_1^2\alpha_1+\cdots+\sigma_{k-1}^2\alpha_{k-1}+\sigma_k^2(\alpha_k+\cdots+\alpha_m) \\ &= \sigma_1^2\alpha_1+\cdots+\sigma_{k-1}^2\alpha_{k-1}+\sigma_k^2(k-\alpha_1-\cdots-\alpha_{k-1}) \\ &\leq \sigma_1^2+\sigma_2^2+\cdots+\sigma_k^2. \end{aligned}$$

□

1.4. Az SVD alkalmazásai

A következő szakaszokban fontos a gyakorlatban is felmerülő számítási problémákra mutatunk példákat, melyek a szinguláris felbontás ismeretében egyszerűen megoldhatók. Közelítésekről lesz szó, ahol a „távolságot” valamely unitér-invariáns normával mérjük. A közelítések során a feladat egyszerűsítésére (pontosabban a feladatban szereplő mátrix szerkezetének egyszerűsítésére) két kulcslépésünk lesz: az egyik az ortogonális mátrixszal történő szorzás, a másik a változónak valamely ortogonális transzformáltjával való helyettesítése.

1.4.1. Pszeudoinverz

Adott R^n egy $\mathcal{A}$ altere és egy $b \in C^n$ pont. Feladatunk $\mathcal{A}$ altér b-hez legközelebbi pontját megtalalálni, illetve b távolságát meghatározni $\mathcal{A}$-tól. Formálisan a

$$\operatorname{dist}(\mathcal{A},b) \overset{\text{def}}{=} \min_{a\in\mathcal{A}} \|b-a\|$$

mennyiséget és a minimumot beállító vektort keressük. Ha az altér valamely $a_1, a_2, \ldots, a_m$ pontok által feszített térként adott, akkor az $A := (a_1\, a_2\, \ldots\, a_m)$ jelöléssel élve a probléma a

$$\min_{x \in C^m} \|Ax - b\|$$

feladattal ekvivalens. A második probléma akkor is felmerül, ha egy $Ax = b$ egyenletrendszernek nincs megoldása, ezért az $\|Ax - b\|$ hiba minimális értékét mint közelítő megoldást keressük. A szokásos jelöléssel az A mátrix SVD-je $A = U\Sigma V^T$. Ezt beírva az egyenletbe, majd az U^T mátrixszal balról szorozva, illetve az $y = V^T x$ új változó bevezetésével,

$$\begin{aligned}
\min_{x \in C^m} \|Ax - b\|^2 &= \min_{x \in C^m} \left\|U\Sigma V^T x - b\right\|^2 \\
&= \min_{x \in C^m} \left\|\Sigma V^T x - U^T b\right\|^2 \\
&= \min_{y \in C^m} \left\|\Sigma y - U^T b\right\|^2,
\end{aligned}$$

ahol felhasználtuk a 2-norma unitér-invarianciáját. Az utolsó mennyiségben szereplő mátrix viszont speciális szerkezetű, csak az első r sorában szerepelnek nullától különböző számok, ahol $r = \mathrm{rk}(A)$, ezért bármely y esetén

$$\left\|\Sigma y - U^T b\right\|^2 \geq \sum_{j=r+1}^{n} [U^T b]_j^2 .$$

Másrészt ez el is érhető az alábbi y' választással:

$$y_i' := \begin{cases} \frac{1}{\sigma_i}[U^T b]_i & \text{ha } i \leq r, \\ 0 & \text{különben.} \end{cases}$$

Visszatérve az $x' = Vy'$ változóra kapjuk a keresett x-et. A $\Sigma_+ = \mathrm{diag}\langle \sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r \rangle$ jelölés felhasználásával az alább foglaljuk össze a bizonyított állítást.

1.12. tétel. *Az* $A = U \begin{pmatrix} \Sigma_+ & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} V^T$ *szinguláris felbontással rendelkező* A *mátrixhoz*

$$A^\dagger := V \begin{pmatrix} \Sigma_+^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U^T .$$

A $\min_{x \in C^m} \|Ax - b\|$ *feladatban a minimumot az* $x' := A^\dagger b$ *helyettesítés állítja be, továbbá*

$$\min_{x \in C^m} \|Ax - b\| = \sqrt{\sum_{j=r+1}^{n} [U^T b]_j^2} ,$$

ahol r *az* A *mátrix rangja.*

1.13. következmény. *Ha az r-rangú $A \in \mathsf{R}^{n\times m}$ mátrix oszlopai $\mathcal{A} \in \mathsf{R}^n$ alteret generálják, akkor bármely $b \in \mathsf{R}^n$ pontra*

$$\mathrm{dist}(\mathcal{A}, b) = \sqrt{\sum_{j=r+1}^{n} [U^T b]_j^2}\,.$$

Adósak vagyunk még a szakasz címének indoklásával. Ha az A mátrix kvadratikus lenne és $\det(A) \neq 0$ is teljesülne, akkor az $Ax = b$ megoldását az $x = A^{-1}b$ vagyis az inverzzel történő szorzás adná. Rögtön látható, hogy az $A^\dagger$ ezt a fogalmat általánosítja arra az esetre, amikor a mátrix nem négyzetes vagy nincs megoldása az egyenletnek, ezért $A^\dagger$-t *pszeudoinverznek* nevezik. Megjegyezzük ugyanakkor, hogy a pszeudoinverznek az irodalomban elterjedt bevezetése és definíciója az itt leírtaktól különbözik, lásd: [2].

1.4.2. Közelítés kis rangú mátrixszal

Adott $a_1, a_2, \ldots, a_m \in C^n$ ponthalmaz és egy $k > 0$ egész szám, célunk megkeresni a pontokat legjobban közelítő legfeljebb k-dimenziós alteret. Az $n = 2$ és $k = 1$ az a speciális eset, amelyben egy síkon lévő ponthalmazra illesztünk egy origón átmenő egyenest. A feladat megoldásához először rögzítjük, hogy mit értünk egy közelítés „jóságán”. Egy altér és egy pont távolságát már az előző szakaszban bevezettük, egy ponthalmaznak egy $\mathcal{A}'$ altértől való távolsága

$$\mathrm{dist}(\mathcal{A}', \{a_1, a_2, \ldots, a_m\}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \mathrm{dist}^2(\mathcal{A}', a_i)}\,.$$

Az alábbi állítással jutunk el a mátrixok kis rangú mátrixszal vett közelítésének feladatához.

1.14. állítás. *Az $A := \{a_1, a_2, \ldots, a_m\}$ jelölést bevezetve*

$$\min_{\dim(\mathcal{A}') \le k} \mathrm{dist}(\mathcal{A}', \{a_1, a_2, \ldots, a_m\}) = \min_{\mathrm{rk}(A') \le k} \|A - A'\|_F\,.$$

Bizonyítás: Egyrészt A bármely k rangú A' mátrixszal történő közelítésekor $\mathcal{A}' := \mathrm{Im}(A')$ altér távolsága a ponthalmaztól legfeljebb $\|A - A'\|_F$, innen adódik a $\le$ irány. Másrészt egy tetszőleges $\mathcal{A}'$ altérhez legyen A' az a_i pontok vetületeiből alkotott mátrix. Ekkor $\mathrm{dist}^2(\mathcal{A}', \{a_1, a_2, \ldots, a_m\}) = \|A - A'\|_F^{\ 2}$, ahonnan látható a $\ge$ irány is. □

Mátrixok legfeljebb k-rangú mátrixszal történő közelítése más problémákból is előkerülhet, és mátrixok hasonlóságát más normában is vizsgálhatjuk, például a 2-normában. Az $A = U\Sigma V^T$ szinguláris felbontás esetén jelölje a szinguláris értékeket $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r$, ahol $r = \mathrm{rk}(A)$, továbbá $i > r$ esetén $\sigma_i := 0$. Az $A = U\Sigma V^T$ felbontás diádok összegeként is felírható:

$$A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^T\,.$$

Az összegben az i-ik diád súlya (Frobenius-normája) σ_i-vel egyezik meg. Innen az ötlet, hogy egy legfeljebb k-rangú mátrixba válasszuk a k legnagyobb súlyú diádot, azaz

$$A_k := \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T .$$

Az A_k-val való közelítés hibája könnyen számítható, hiszen az $A - A_k$ mátrix SVD-je diádok összegeként felírva

$$A - A_k := \sum_{i=k+1}^{n} \sigma_i u_i v_i^T .$$

A 6. és a 7. egyenlőségekből

$$\begin{aligned} \|A - A_k\|_2 &= \sigma_{k+1} , \\ \|A - A_k\|_F &= \sqrt{\sum_{i=k+1}^{n} \sigma_i^2} . \end{aligned}$$

A következő tétel azt mondja ki, hogy ennél kisebb hiba nem érhető el.

1.15. tétel. *Tetszőleges $A \in \mathsf{R}^{n\times m}$ mátrix és $k \leq \min\{n,m\}$ esetén a fent bevezetett jelölésekkel*

$$\begin{aligned} \min_{\mathrm{rk}(A')\leq k} \|A - A'\|_2 &= \|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1} , \\ \min_{\mathrm{rk}(A')\leq k} \|A - A'\|_F &= \|A - A_k\|_F = \sqrt{\sum_{i=k+1}^{n} \sigma_i^2} . \end{aligned}$$

Bizonyítás: A jobb oldali egyenlőségeket és a bal oldaliakból a $\leq$ irányt már igazoltuk. A továbbiakban azt mutatjuk meg, hogy a közelítések nem javíthatóak. Ha A' egy legfeljebb k rangú mátrix, akkor $\dim(\mathrm{Ker}(A')) \geq n - k$. Válasszunk egy $\mathcal{T} \subseteq \mathrm{Ker}(A')$ alteret, melynek dimenziója pontosan $n-k$, ekkor

$$\begin{aligned} \|A - A'\|_2 &\geq \max_{\substack{x\in\mathcal{T} \\ \|x\|=1}} \|(A - A')x\| \\ &= \max_{\substack{x\in\mathcal{T} \\ \|x\|=1}} \|Ax\| \\ &\geq \sigma_{k+1} , \end{aligned}$$

ahol az utolsó egyenlőtlenség a 9. összefüggésből következik. Így a tétel felső egyenlőségét igazoltuk.

A tétel alsó egyenlőségében a $\geq$ irányhoz szintén induljunk ki egy tetszőleges A' mátrixból, melyre $\mathrm{rk}(A') \leq k$. Továbbá az A' mátrix SVD-je: $A' = U'\Sigma'V'^T$. Valamint bevezetjük az $I^{n,k} \stackrel{\mathrm{def}}{=} (e_1, e_2, \ldots, e_k)^T$ jelölést, ahol $e_i \in \mathsf{R}^n$ az i-ik egységvektor. Ha egy M mátrixnak n sora van, akkor $I^{n,k}M$ a mátrix első k oszlopát tartalmazza.

$$
\begin{aligned}
\|A - A'\|_F{}^2 &\geq \sum_{i=1}^{m} \mathrm{dist}^2(\mathrm{Im}(A'), A_{(i)}) && \text{a definíciók miatt} \\
&\geq \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=k+1}^{n} [U'A_{(i)}]_j^2 && \text{az 1.13 következményből;} \\
&= \sum_{j=k+1}^{n} \left\| (U'A)^{(j)} \right\|^2 && \\
&= \|U'A\|_F{}^2 - \left\| I^{n,k} U'A \right\|_F{}^2 && \\
&\geq \|U'A\|_F{}^2 - \sum_{i=1}^{k} \sigma_i^2 && \text{az 1.11. tétel miatt;} \\
&\geq \|A\|_F{}^2 - \sum_{i=1}^{k} \sigma_i^2 && \text{mivel } \|\cdot\|_F \text{ unitér-invariáns;} \\
&= \sum_{i=k+1}^{n} \sigma_i^2 && \text{a 7 egyenlőségből.}
\end{aligned}
$$

□

Jelölések

$A, B, \ldots$	Mátrix.
$a, b, \ldots$	Vektor.
$\mathcal{A}, \mathcal{B}, \ldots$	Altér.
$\lambda_1, \lambda_2, \ldots$	Sajátérték.
$\sigma_1, \sigma_2, \ldots$	Szinguláris érték.
$\lambda_{max}(M)$	Az M négyzetes mátrix legnagyobb sajátértéke.
$M^{(i)}$	Az M mátrix i-ik sora.
$M_{(i)}$	Az M mátrix i-ik oszlopa.
$[v]_i$	A v vektor i-ik eleme.
I	Egységmátrix.
e_i	Az i-ik egységvektor.
$I^{n,k}$	Az az $n \times k$ méretű mátrix, melynek i-ik oszlopa e_i.
$I_{m,k}$	Az a $k \times m$ méretű mátrix, melynek i-ik sora e_i^T.
$\Vert\cdot\Vert$	Vektor vagy mátrix norma, alapértelmezésben vektorok 2-normája.
$\Vert\cdot\Vert_2$	Vektor vagy mátrix 2-normája.
$\Vert\cdot\Vert_F$	Mátrix Frobenius-normája.
$\mathrm{tr}(M)$	A négyzetes M mátrix főátlójában lévő elemek összege.
$\mathrm{rk}(M)$	Az M mátrix rangja.
$\mathrm{Im}(M)$	Az M mátrix oszlopai által feszített vektortér.
$\mathrm{Ker}(M)$	Azon x vektorok halmaza, melyekre $Mx = 0$.
$\mathrm{span}\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$	A $v_1, v_2, \ldots, v_n$ vektorok által feszített tér.
$M^\dagger$	Az M mátrix pszeudoinverze.
$\mathrm{diag}\langle\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n\rangle$	Az az $n \times n$ méretű diagonális mátrix, melynek főátlójában az $\alpha_1, \alpha_2 \ldots, \alpha_n$ számok szerepelnek.
$\mathrm{dist}(\mathcal{A}, b)$	A b pont távolsága az $\mathcal{A}$ altártől.
$\mathrm{dist}(\mathcal{A}, \{a_1, a_2, \ldots, a_m\})$	Az $\mathcal{A}$ altér távolsága az $\{a_1, a_2, \ldots, a_m\}$ ponthalmaztól.
M^T	Az M mátrix transzponáltja.
M^*	Az M mátrix transzponált-konjugáltja (adjungáltja).

Alapfogalmak

Szimmetrikus mátrix	Olyan négyzetes M mátrix, melyre $M^T = M$. Többször támaszkodunk arra a tényre, hogy szimmetrikus mátrixok ortogonális transzformációval diagonalizálhatók és sajátértékei valósak.
ortogonális vektorrendszer	Olyan $u_1, u_2, \ldots, u_k$ vektorrendszer, melyre $u_i^T u_j = \begin{cases} 1 & \text{ha } i = j, \\ 0 & \text{különben.} \end{cases}$
teljes ortogonális vektorrendszer	n-dimenziós vektorokból alkotott n-elemű ortogonális vektorrendszer. Többször felhasználjuk majd, hogy ortogonális vektorrendszer kiegészíthető teljessé.
ortogonális mátrix	Olyan U mátrix, melynek oszlopai teljes ortogonális vektorrendszert alkotnak, másképp mondva $U^T U = I$. Megjegyezzük, hogy ha U és V ortogonális, akkor U^T és UV is ortogonális.

Hivatkozások

[1] G. W. Stewart és J.-g. Sun, Matrix Perturbation Theory, Academic Press, San Diego, California, 1990.

[2] Rózsa Pál. Lineáris algebra és alkalmazásai, Műszaki Könyvkiadó, 1976.

[3] H. Wilkinson. The Algebraic Eigenvalue Problem. Clarendon Press, Oxford, England, 1965. 33

[4] Carlo Tomasi. Mathematical Methods for Robotics and Vision. *http://www.stanford.edu/class/cs205/notes/book/book.html*