Singular value decompositions και πολικές αναπαραστάσεις με πίνακες

Έστω A ένας $m \times n$ πίνακας με μιγαδικά στοιχεία. Τότε ο A^*A είναι θετικά ημι-ορισμένος $n \times n$ πίνακας. Έστω ορθομοναδιαίος (unitary) $n \times n$ πίνακας U τέτοιος ώστε $A^*A = UDU^*$, με τον D διαγώνιο $n \times n$ και τέτοιον ώστε $D_{ii} \neq 0$ για κάθε $i \in \{1, \dots, r\}$, για κάποιο $r \in \{1, \dots, n\}$, και $D_{ii} = 0$ για $i \in \{r+1, \dots, n\}$, αν $r < n$. Τότε ο U γράφεται ως $[U_1, U_2]$ με τον U_1 τον $n \times r$ πίνακα που αποτελείται από τις πρώτες r στήλες του U και τον U_2 τον $n \times (n-r)$ πίνακα που αποτελείται από τις στήλες $r+1$ έως nτου U, αν $r < n$. Τότε

$$A^*A = [U_1, U_2] \begin{bmatrix} D_1 & 0_{r\times(n-r)} \\ 0_{(n-r)\times r} & 0_{(n-r)\times(n-r)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^* \\ U_2^* \end{bmatrix} = U_1 D_1 U_1^*,$$

όπου D_1 ο $r \times r$ διαγώνιος πίνακας με διαγώνια στοιχεία τα μη μηδενικά $D_{11}, \dots D_{rr}$. Επίσης,

$$\begin{bmatrix} D_1 & 0_{r\times(n-r)} \\ 0_{(n-r)\times r} & 0_{(n-r)\times(n-r)} \end{bmatrix} = D = U^*A^*AU = \begin{bmatrix} U_1^* \\ U_2^* \end{bmatrix} A^*A[U_1, U_2] = \begin{bmatrix} U_1^*A^*AU_1 & U_1^*A^*AU_2 \\ U_2^*A^*AU_1 & U_2^*A^*AU_2 \end{bmatrix}$$

και άρα $U_2A^*AU_2 = 0_{(n-r)\times(n-r)}$, οπότε

$$\|AU_2z\|_2^2 = \langle AU_2z, AU_2z\rangle = \langle U_2^*A^*AU_2z, z\rangle = 0$$

για κάθε $z \in \mathbb{C}^{n-r}$, οπότε $AU_2 = 0_{(n-r)\times(n-r)}$· αυτό είναι απλά αντικατοπτρίζει το γεγονός ότι οι στήλες του U_2 είναι ιδιοδιανύσματα του A^*A που αντιστοιχούν στις μηδενικές ιδιοτιμές $D_{r+1\ r+1}, \dots, D_{nn}$, όταν $r < n$.

Ορίζουμε τώρα $V_1 = AU_1D_1^{-1/2}$. Παρατηρούμε ότι

$$AA^*V_1 = AA^*AU_1D_1^{-1/2} = AU_1D_1D_1^{-1/2} = AU_1D_1^{-1/2}D_1 = V_1D_1,$$

και άρα οι στήλες του V_1 είναι ιδιοδιανύσματα του AA^* με αντίστοιχες ιδιοτιμές $D_{11}, \dots D_{rr}$, και επιπλέον

$$V_1^*V_1 = D_1^{-1/2}U_1^*A^*AU_1D_1^{-1/2} = D_1^{-1/2}U_1^*U_1D_1U_1^*U_1D_1^{-1/2} = D_1^{-1/2}D_1D_1^{-1/2} = I_{r\times r},$$

δηλαδή οι στήλες του V_1 αποτελούν ορθοκανονικό σύνολο. Συμπληρώνουμε τον V_1 με έναν V_2 ώστε οι στήλες του $V := [V_1, V_2]$ να αποτελούν ορθοκανονική βάση του m διάστατου μιγαδικού Ευκλείδειου χώρου αποτελούμενη από ιδιοδιανύσματα του AA^*. Παρατηρούμε με την ευκαιρία, ότι

$$AA^*V_2 = 0_{(m-r)\times(m-r)}.$$

αυτό γιατί οι μη μηδενικές ιδιοτιμές των A^*A και AA^* είναι οι ίδιες[1], άρα οι ιδιοτιμές του AA^* πέραν των $D_{11}, \dots D_{rr}$ είναι όλες μηδέν. Παρατηρούμε τώρα ότι

$$\begin{aligned} V \begin{bmatrix} D_1^{1/2} & 0_{r\times(n-r)} \\ 0_{(m-r)\times r} & 0_{(m-r)\times(n-r)} \end{bmatrix} U^* &= [V_1, V_2] \begin{bmatrix} D_1^{1/2} & 0_{r\times(n-r)} \\ 0_{(m-r)\times r} & 0_{(m-r)\times(n-r)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^* \\ U_2^* \end{bmatrix} \\ &= V_1D_1^{1/2}U_1^* = AU_1D_1^{-1/2}D_1^{1/2}U_1^* = AU_1U_1^* = A. \end{aligned}$$

[1] Αν $A^*Az = \lambda z$ για κάποιο $z \neq 0$ στον n-διάστατο μιγαδικό Ευκλείδειο χώρο και $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, τότε $AA^*Az = A\lambda z$ και άρα το διάνυσμα Az είναι ιδιοδιάνυσμα του AA^* για την ίδια ιδιοτιμή λ, αφού $Az \neq 0$ επειδή αλλιώς θα είχαμε ότι $A^*Az = 0 = \lambda z$ και τότε αναγκαστικά $\lambda = 0$, αφού $z \neq 0$. Όμοια αν $AA^*z = \lambda z$ για κάποιο $z \neq 0$ στον m-διάστατο μιγαδικό Ευκλείδειο χώρο, και $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, τότε το A^*z είναι ιδιοδιάνυσμα του A^*A για την ίδια ιδιοτιμή λ.

Δηλαδή, $A = V\Sigma U^*$, με

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1 & & \\ & \ddots & \\ & & s_r \end{bmatrix} & 0_{r\times(n-r)} \\ 0_{(m-r)\times r} & 0_{(m-r)\times(n-r)} \end{bmatrix},$$

όπου $s_i := \sqrt{D_{ii}}$, $i \in \{1, \dots, r\}$, και $D_{11}, \dots, D_{rr}$ οι μη μηδενικές ιδιοτιμές του A^*A· δηλαδή, $s_1, \dots, s_r$ είναι οι μη μηδενικές ιδιάζουσες τιμές (singular values) του A, και με τους U και V εξ' ορισμού ορθομοναδιαίους (unitary). Αυτή είναι η singular value decomposition του A.

Παρατηρούμε τώρα επίσης ότι, όταν $n = m$, τότε $\Sigma = D^{1/2}$ και

$$(UV^*)A = UV^*V\Sigma U^* = U\Sigma U^* = UD^{1/2}U^* = (A^*A)^{1/2} = |A|,$$

και ο UV^* είναι ορθομοναδιαίος, επειδή οι ορθομοναδιαίοι πίνακες αποτελούν ομάδα. Η αναπαράσταση $A = W|A|$, με τον $W = VU^*$ ορθομοναδιαίο εδώ, είναι μία πολική αναπαράσταση του A.

Singular value decompositions και πολικές αναπαραστάσεις με γραμμικές απεικονίσεις

Έστω A ένας γραμμικός τελεστής μεταξύ μιγαδικών Ευκλείδειων χώρων διάστασης n και m αντίστοιχα. Τότε ο τελεστής A^*A είναι θετικά ημι-ορισμένος και από το φασματικό θεώρημα υπάρχουν διανύσματα u_i, $i \in \{1, \dots, n\}$, τέτοια ώστε το $\{u_1, \dots, u_n\}$ να αποτελεί πλήρες ορθοκανονικό σύστημα, και μη αρνητικοί αριθμοί $d_1, \dots, d_n$ ώστε

$$A^*A = \sum_{i=1}^{n} d_i u_i u_i^*,$$

όπου για ένα διάνυσμα u, u^* είναι η απεικόνιση $u^*(z) := \langle u, z\rangle$. Έστω πάλι ότι έχουμε επιλέξει την αρίθμηση της βάσης έτσι ώστε $d_1, \dots, d_r$ να είναι οι μη μηδενικές ιδιοτιμές του A^*A και

$$d_{r+1} = \cdots = d_n = 0$$

αν $r < n$. Αν $r < n$ και $i \in \{r+1, \dots, n\}$, δηλαδή για i με $d_i = 0$, έχουμε ότι $A^*Au_i = 0$ και άρα

$$\|Au_i\|^2 = \langle Au_i, Au_i\rangle = \langle A^*Au_i, u_i\rangle = 0$$

και άρα $Au_i = 0$· δηλαδή $u_i \in \ker(A)$ για τα i με $d_i = 0$.

Ορίζουμε $v_i := d_i^{-1/2}Au_i$ για $i \in \{1, \dots, r\}$ και παρατηρούμε ότι

$$AA^*v_i = d^{-1/2}AA^*Au_i = d_i^{-1/2}Ad_iu_i = d_iv_i,$$

$i \in \{1, \dots, r\}$· επιπλέον, $v_i \neq 0$ για $i \in \{1, \dots, r\}$, γιατί αλλιώς $Au_i = 0$ και τότε $A^*Au_i = 0$ και τότε θα είχαμε $d_i = 0$. Άρα τα v_i, $i \in \{1, \dots, r\}$, είναι ιδιοδιανύσματα για τον AA^* που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $d_1, \dots, d_r$. Συμπληρώνουμε τα $v_1, \dots, v_r$ με διανύσματα $v_{r+1}, \dots, v_m$ έτσι ώστε το σύνολο $\{v_1, \dots, v_m\}$ να αποτελεί ορθοκανονική βάση του m-διάστατου Ευκλείδειου χώρου αποτελούμενη από ιδιοδιανύσματα του AA^*. Τότε

$$Az = \sum_{i=1}^{n}\langle u_i, z\rangle Au_i = \sum_{i=1}^{r}\langle u_i, z\rangle Au_i = \sum_{i=1}^{r}\langle u_i, z\rangle d_i^{1/2}v_i,$$

για κάθε διάνυσμα z στον χώρο και άρα

$$A = \sum_{i=1}^{r} s_i v_i u_i^*,$$

με $s_i := \sqrt{d_i}$, $i \in \{1, \ldots, r\}$, τα μη μηδενικά singular values του A και με τα $u_1, \ldots, u_r$ και $v_1, \ldots, v_r$ να αποτελούν, ξεχωριστά το καθένα, ορθοκανονικό σύστημα. Αυτή είναι η singular value decomposition του A.

Έστω τώρα ότι $m = n$ και U ο τελεστής

$$U := \sum_{i=1}^{n} u_i v_i^*$$

στον n-διάστατο μιγαδικό Ευκλείδειο χώρο. Τότε

$$UAz = \sum_{i=1}^{n} u_i \langle v_i, Az \rangle = \sum_{i=1}^{n} u_i \left\langle v_i, \sum_{j=1}^{n} s_j v_j \langle u_j, z \rangle \right\rangle = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} u_i s_j \langle u_j, z \rangle \langle v_i, v_j \rangle = \sum_{i=1}^{n} s_i u_i \langle u_i, z \rangle,$$

για κάθε διάνυσμα z, οπότε

$$UA = \sum_{i=1}^{n} s_i u_i u_i^* = (A^* A)^{1/2}.$$

Επιπλέον,

$$\begin{aligned} U^* U(z) &= \sum_{i=1}^{n} v_i u_i^* (Uz) \\ &= \sum_{i=1}^{n} v_i \langle u_i, Uz \rangle \\ &= \sum_{i=1}^{n} v_i \left\langle u_i, \sum_{j=1}^{n} u_j \langle v_j, z \rangle \right\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} v_i \langle v_j, z \rangle \langle u_i, u_j \rangle \\ &= \sum_{i=1}^{n} v_i \langle v_i, z \rangle \\ &= z, \end{aligned}$$

για κάθε διάνυσμα z του χώρου και άρα $U^* U = I$. Έπεται ότι ο U είναι ορθομοναδιαίος. Η αναπαράσταση $A = W|A|$, με τον $W = U^*$ ορθομοναδιαίο εδώ, είναι μία πολική αναπαράσταση του A.

Αντίστροφοι Moore–Penrose

Έστω πάλι A ένας γραμμικός τελεστής μεταξύ μιγαδικών Ευκλείδειων χώρων διάστασης n και m αντίστοιχα και έστω

$$A = \sum_{i=1}^{r} s_i v_i u_i^*$$

το singular value decomposition του, με τα $s_1, \ldots, s_r$ να είναι οι μη μηδενικές ιδιάζουσες τιμές του. Ο αντίστροφος Moore–Penrose του A είναι ο τελεστής

$$A^+ = \sum_{i=1}^{r} s_i^{-1} u_i v_i^*.$$

Ο αντίστροφος Moore–Penrose ενός τελεστή A χαρακτηρίζεται από τις εξής ιδιότητες. Είναι ο μοναδικός τελεστής για τον οποίο $AA^+A = A$, $A^+AA^+ = A^+$ και οι AA^+ και A^+A είναι και οι δύο ερμιτιανοί. Πράγματι, για z αυθαίρετο διάνυσμα του n-διάστατου μιγαδικού Ευκλείδειου χώρου, έχει κανείς ότι

$$\begin{aligned}
A^+A(z) &= \sum_{i=1}^{r} s_i^{-1} u_i v_i^*(Az) \\
&= \sum_{i=1}^{r} s_i^{-1} u_i \langle v_i, (Az)\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{r} s_i^{-1} u_i \left\langle v_i, \sum_{j=1}^{r} s_j v_j u_j^*(z) \right\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{r} \sum_{j=1}^{r} s_i^{-1} s_j u_i u_j^*(z) \langle v_i, v_j\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{r} s_i^{-1} s_i u_i u_i^*(z) \\
&= \sum_{i=1}^{r} u_i u_i^*(z) \\
&= \sum_{i=1}^{r} u_i \langle u_i, z\rangle \\
&= \Pi_{R(A^*)}(z),
\end{aligned}$$

όπου $\Pi_{R(A^*)}(z)$ η ορθογώνια προβολή του z στην εικόνα $R(A^*)$ του A^*. Πράγματι, έχουμε δει ότι $u_i \in \ker(A)$ για κάθε $i \in \{r+1, \ldots, n\}$, όταν $r < n$, και $u_i \notin \ker(A)$ για $i \in \{1, \ldots, r\}$, αφού αλλιώς θα είχαμε $Au_i = 0$ οπότε και $A^*Au_i = 0$ και θα έπρεπε $d_i = s_i^2 = 0$· επομένως τα $u_1, \ldots, u_r$ παράγουν τον $(\ker(A))^\perp = R(A^*)$. Από εδώ τώρα έπεται άμεσα ότι $A^+AA^+ = A^+$, αφού για οποιοδήποτε διάνυσμα z, $A^+z \in R(A^*)$, αφού εξ' ορισμού του A^+, $A^+(z) \in \operatorname{span}(\{u_1, \ldots, u_r\})$, και άρα $\Pi_{R(A^*)}\big(A^+z\big) = A^+z$. Όμοια,

$$\begin{aligned}
AA^+(z) &= \sum_{i=1}^{r} s_i v_i u_i^*\big(A^+z\big) \\
&= \sum_{i=1}^{r} s_i v_i \langle u_i, \big(A^+z\big)\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{r} s_i v_i \left\langle u_i, \sum_{j=1}^{r} s_j^{-1} u_j v_j^*(z) \right\rangle
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{i=1}^{r}\sum_{j=1}^{r} s_i s_j^{-1} v_i v_j^*(z)\langle u_i, u_j\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{r} s_i s_i^{-1} v_i v_i^*(z) \\
&= \sum_{i=1}^{r} v_i v_i^*(z) \\
&= \sum_{i=1}^{r} v_i \langle v_i, z\rangle \\
&= \Pi_{R(A)}(z),
\end{aligned}
$$

όπου $\Pi_{R(A)}(z)$ η ορθογώνια προβολή του z στην εικόνα $R(A)$ του A. Πράγματι, αυτό έπεται όπως παραπάνω, αντικαθιστώντας τον A με τον A^*, οπότε τα διανύσματα $u_1, \ldots, u_n$ αντικαθίστανται από τα $v_1, \ldots, v_m$, ενώ οι μη μηδενικές ιδιάζουσες τιμές $s_1, \ldots, s_r$ είναι οι ίδιες για τους A και A^*, αφού οι μη μηδενικές ιδιοτιμές $d_i = s_i^2$, $i \in \{1, \ldots, r\}$, για τους A^*A και AA^* είναι οι ίδιες. Από εδώ τώρα έπεται άμεσα ότι $AA^+A = A$, αφού για οποιοδήποτε διάνυσμα z, $Az \in R(A)$, και άρα $\Pi_{R(A)}(Az) = Az$.

Από τους παραπάνω υπολογισμούς έπεται και άμεσα ότι οι $A^+A = \Pi_{R(A^*)}$ και $AA^+ = \Pi_{R(A)}$ είναι ερμιτιανοί. Πράγματι, αν Π είναι ορθογώνια προβολή σε κάποιον κλειστό γραμμικό υπόχωρο σε έναν μιγαδικό Ευκλείδειο χώρο, και για αυθαίρετα διανύσματα u και v στον χώρο αυτό, έχουμε ότι

$$\langle u, \Pi v\rangle = \langle \Pi u + (u - \Pi u), \Pi v\rangle = \langle \Pi u, \Pi v\rangle + \langle u - \Pi u, \Pi v\rangle = \langle \Pi u, \Pi v\rangle$$

αφού $u - \Pi u$ είναι κάθετο στον χώρο στον οποίο προβάλουμε και το Πv ανήκει σε αυτόν, και επίσης

$$\langle \Pi u, v\rangle = \langle \Pi u, \Pi v + (v - \Pi v)\rangle = \langle \Pi u, \Pi v\rangle + \langle \Pi u, v - \Pi v\rangle = \langle \Pi u, \Pi v\rangle$$

και πάλι, αφού $v - \Pi v$ είναι κάθετο στον χώρο στον οποίο προβάλουμε και το Πu ανήκει σε αυτόν.

Η μοναδικότητα, όπως ήδη αναφέρθηκε, είναι απόρροια των σχέσεων $AA^+A = A$, $A^+AA^+ = A^+$ και οι AA^+ και A^+A είναι και οι δύο ερμιτιανοί, που ικανοποιεί ο A^+. Πράγματι, αν A^{++} είναι άλλος τελεστής που ικανοποιεί τις $AA^{++}A = A$, $A^{++}AA^{++} = A^{++}$ και οι AA^{++} και $A^{++}A$ είναι και οι δύο ερμιτιανοί, τότε

$$
\begin{aligned}
A^+ &= A^+AA^+ = (A^+A)^*A^+ = A^*(A^+)^*A^+ = (AA^{++}A)^*(A^+)^*A^+ \\
&= A^*(A^{++})^*A^*(A^+)^*A^+ = (A^{++}A)^*(A^+A)^*A^+ = A^{++}AA^+AA^+ \\
&= A^{++}AA^+ = A^{++}AA^{++}AA^+ = A^{++}(AA^{++})^*(AA^+)^* \\
&= A^{++}(A^{++})^*A^*(A^+)^*A^* = A^{++}(A^{++})^*(AA^+A)^* \\
&= A^{++}(A^{++})^*A^* = A^{++}(AA^{++})^* = A^{++}AA^{++} = A^{++}.
\end{aligned}
$$

Στην περίπτωση που $n = m$ πάλι και ο A είναι φυσιολογικός (normal) τελεστής, δηλαδή ικανοποιεί $A^*A = AA^*$, ο A^+ γράφεται και ως

$$A^+ = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i^{-1} w_i w_i^*,$$

με τα u_i και τα v_i ίδια δηλαδή, όπου εδώ όμως τα $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ είναι οι μη μηδενικές ιδιοτιμές του A και τα $w_1, \ldots, w_n$ είναι ιδιοδιανύσματα του A που αποτελούν μία ορθοκανονική βάση του n-διάστατου

μιγαδικού Ευκλείδειου χώρου. Αυτό το βλέπει κανείς χρησιμοποιώντας το φασματικό θεώρημα για τον ίδιο τον A και μετά ελέγχοντας ότι πράγματι ο $B := \sum_{i=1}^{r} \lambda_i^{-1} w_i w_i^*$ που έχει οριστεί έτσι ικανοποιεί τις $ABA = A$, $BAB = B$ και οι AB και BA είναι και οι δύο ερμιτιανοί.

Όταν ο A είναι θετικά ημι-ορισμένος, οι δύο αυτές αναπαραστάσεις του A^+ συμπίπτουν, δηλαδή μπορούμε να γράψουμε

$$A^+ = \sum_{i=1}^{r} s_i u_i u_i^*$$

με τα $s_1, \dots s_r$ να είναι οι θετικές ιδιάζουσες τιμές του A και τα $u_1, \dots, u_r$ αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα του A^*A. Πράγματι, αν τα $u_1, \dots, u_r$ είναι τα ιδιοδιανύσματα του $A^*A = A^2$ που αντιστοιχούν στις μη μηδενικές ιδιοτιμές του A^*A και $v_i = s_i^{-1} A u_i$ για $i \in \{1, \dots, r\}$, με τα $s_1, \dots, s_r$ να είναι οι μη μηδενικές ιδιάζουσες τιμές του A, δηλαδή οι θετικές τετραγωνικές ρίζες των μη μηδενικών ιδιοτιμών του A^*A, τότε $v_i = u_i = w_i$ και $s_i = \lambda_i$ για $i \in \{1, \dots, r\}$, γιατί οι ιδιάζουσες τιμές $s_1, \dots, s_r$ είναι ιδιοτιμές του A με αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα τα ιδιοδιανύσματα $u_1, \dots, u_r$ του A^*A. Πράγματι, στην περίπτωση που ο A είναι θετικά ημι-ορισμένος, αν $\sigma > 0$ είναι μια ιδιοτιμή του $A^2 = A^*A$ με αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα u, και αν $\lambda = \sqrt{\sigma}$ είναι η θετική τετραγωνική ρίζα του σ, τότε

$$A^2 u = \sigma u \;\Leftrightarrow\; (A + \lambda I)(A - \lambda I)u = 0$$

και αυτό συμβαίνει είτε αν $Au = \lambda u$, οπότε το λ είναι ιδιοτιμή του A με ιδιοδιάνυσμα u, είτε όταν $A(Au - \lambda u) + \lambda(Au - \lambda u) = 0$, οπότε το $-\lambda < 0$ είναι ιδιοτιμή του A με ιδιοδιάνυσμα $Au - \lambda u$, που φυσικά δεν γίνεται αφού ο A είναι θετικά ημι-ορισμένος.

Δημήτρης Γατζούρας