Matriisin singulaariarvohajotelma

Jaakko Kirsilä

Matematiikan pro gradu
Jyväskylän yliopisto
Matematiikan ja tilastotieteen laitos
kevät 2021

Tiivistelmä: Jaakko Kirsilä, *Matriisin singulaariarvohajotelma* (engl. Singular Value Decomposition), matematiikan pro gradu -tutkielma, 55 s., Jyväskylän yliopisto, Matematiikan ja tilastotieteen laitos, syksy 2020.

Tämän tutkielman tarkoituksena on esitellä ja todistaa matriisin singulaariarvohajotelma, jonka mukaan jokainen $m \times n$ matriisi A voidaan esittää muodosssa $A = U\Sigma V^T$, missä matriisit U ja V ovat ortogonaalisia ja Σ on diagonaalimatriisi. Tuloksen muotoa voidaan verrata matriisin diagonalisoituvuuteen. Diagonalisoituvuudesta puhuttaessa matriisin täytyy kuitenkin olla neliömatriisi ja lisäksi kaikki neliömatriisit eivät ole diagonalisoituvia. Singulaariarvohajotelma on olemassa kaikille $m \times n$ matriiseille.

Tutkielmassa tarvittavia tuloksia esitellään tutkielman alussa lineaarialgebran ja matriisiteorian kannalta merkittävien neljän aliavaruuden avulla. Lisäksi tutustutaan näiden aliavaruuksien rooliin matriisin A toiminnassa. Singulaariarvohajotelmaan liittyy olennaisena osana matriisin A singulaariarvot, jotka ovat matriisin $A^T A$ ominaisarvojen neliöjuuret. Ennen singulaariarvohajotelman esittelyä tutkielmassa tutustutaankin matriisin $A^T A$ ominaisuuksiin, joita tarvitaan myöhemmin singulaariarvohajotelman todistuksessa.

Tarkoituksena on myös esitellä matriisin singulaariarvohajotelman sovelluksia. Ensimmäisenä sovelluksena on matriisin pseudoinverssi, jota voidaan pitää käänteismatriisin yleistyksenä. Pseudoinverssin avulla voidaan ratkaista lineaarisia yhtälöryhmiä, jotka ovat muotoa $Ax = b$. Tällä yhtälöryhmällä ei kuitenkaan aina ole ratkaisua. Tällöin voidaan kuitenkin etsiä vektoria $\tilde{x}$, joka minimoi lausekkeen $||b - A\tilde{x}||^2$. Tätä vektoria $\tilde{x}$ kutsutaan pienimmän neliösumman ratkaisuksi. Osoittautuu, että pseudoinverssin avulla löydetään myös pienimmän neliösumman ratkaisu. Singulaariarvohajotelman sovelluksena on myös matriisin approksimointi alemman asteen matriisilla. Tarkoituksena on esitellä tulos, jonka mukaan matriisin singulaariarvohajotelman avulla matriisille saadaan paras alemman asteen approksimaatio Frobenius normin suhteen. Tutkielman lopuksi sovelletaan matriisin alemman asteen approksimaatiota valokuvan häviöllisessä pakkaamisessa.

Sisältö

Johdanto

Tämä tutkielman päätarkoituksena on esitellä ja todistaa matriisin singulaariarvohajotelma, jonka mukaan jokainen $m \times n$ matriisi A voidaan esittää muodosssa $A = U\Sigma V^T$, missä matriisit U ja V ovat ortogonaalisia ja Σ on diagonaalimatriisi. Lisäksi esitellään matriisin singulaariarvohajotelman sovelluksia. Tutkielman päälähteinä on käytetty Steven J. Leonin kirjaa *Linear Algerbra with Applications* [2] ja Gilbert Strangin artikkelia *The Fundamental Theorem of Linear Algebra* [4]. Osaan tutkielmassa olevista todistuksista on käytetty apuna lähteistä löytyviä todistuksia, jotka on mainittu kunkin todistuksen yhteydessä. Lähteiden todistuksia on muokattu tutkielmaan sopiviksi ja niihin on lisätty välivaiheita.

Tutkielman ensimmäisessä kappaleessa esitellään tutkielmassa myöhemmin tarvittavia ja suurimmaksi osaksi lukijalle ennestään tunnettuksi oletettuja esitietoja. Toisen kappaleen aluksi esitellään ja todistetaan lineaarialgebran merkittäviä ja työssä myöhemmin tarvittavia tuloksia, kuten *dimensiolause* ja *astelause*. Toisen kappaleen päätarkoituksena on kuitenkin tutustuttaa lukija lineaarialgebran ja singulaariarvohajotelman kannalta olennaisiin neljään aliavaruuteen. Nämä neljä aliavaruutta ovat yleiseen $m \times n$ matriisiin A liittyvät *riviavaruus* $\mathrm{Row}\,(A)$, *sarakeavaruus* $\mathrm{Col}\,(A)$, sekä *ytimet* $N(A)$ ja $N(A^T)$.

Kolmannessa kappaleessa lähdetään edellisten kappaleiden tuloksien avulla johtamaan aputuloksia, joita tarvitsemme matriisin singulaariarvohajotelman ja sen sovelluksiin liittyvien tulosten todistamisessa. Mukana on kuitenkin sellaisenaankin mielenkiintoisia aputuloksia kuten lause, jonka mukaan matriisin *aste* ei muutu, kun sitä kerrotaan kääntyvällä matriisilla.

Kappaleessa neljä esitellään ja todistetaan tutkielman päätulos eli matriisin singulaariarvohajotelma. Lisäksi perehdytään tarkemmin aiemmin mainittujen neljän aliavaruuden ja singulaariarvohajotelman yhteyteen. Kappaleessa viisi käsitellään ensimmäistä tutkielmassa esiintyvää singulaariarvohajotelman sovellusta. Tämä on *pseudoinverssi*, jota voidaan pitää käänteismatriisin yleistyksenä. Tähän liittyen kuudennessa kappaleessa käsitellään yhtälöryhmän $Ax = b$ ratkaisemista. Riippuen matriisista A ja vektorista b voi kuitenkin käydä myös niin, että yhtälöryhmällä ei ole ratkaisua. Tällöin etsitään vektoria, joka on lähimpänä. Eli vektoria $\tilde{x}$, joka minimoi lausekkeen $||b - A\tilde{x}||^2$. Tätä vektoria $\tilde{x}$ kutsutaan *pienimmän neliösumman ratkaisuksi*. Osoittautuu, että matriisin pseudoinverssin avulla löydämme pienimmän neliösumman ratkaisun tai yhtälöryhmän $Ax = b$ varsinaisen ratkaisun, mikäli se on olemassa.

Kappaleessa seitsemän käsitellään toista matriisin singulaariarvohajoelman sovellusta eli matriisin approksimointia alemman asteen matriisilla. Tässä yhteydessä määritellään matriiseihin liittyvä *Frobenius normi*. Kappaleen päätuloksen mukaan Frobenius normin mielessä matriisia parhaiten approksimoiva alemman asteen matriisi löydetään matriisin singulaariarvohajotelman avulla. Kappaleessa kahdeksan käytetään matriisin approksimointia valokuvan häviölliseen pakkaamiseen. Tämä on yksi merkittävimpiä matriisin singulaariarvohajotelman sovelluksia. MATLAB ohjelmaa apuna käyttäen tehdään esimerkkikuvalle eri asteisia approksimaatioita.

1 Esitietoja

Esitellään aluksi tässä tutkielmassa käytettäviä merkintöjä ja määritelmiä, joista suurin osa oletetaan lukijalle jo ennestään tunnettuna.

Määritelmä 1.1. Määritellään avaruuden $\mathbb{R}^n$ euklidinen sisätulo $(\cdot \mid \cdot) : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ asettamalla

$$(x \mid y) = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

kaikille $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ ja $y = (y_1, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$.

Määritelmä 1.2. Olkoon $S = \{v_1, v_2, \dots, v_m\}$ avaruuden $\mathbb{R}^n$ vektorijoukko. Tällöin joukon S vektoreiden $v_1, v_2, \dots, v_m$ *virittämä* aliavaruus eli *lineaarinen verho* on

$$\langle S \rangle = \langle v_1, v_2, \dots, v_m \rangle = \{\lambda_1 v_1 + \lambda_2 v_2 + \dots + \lambda_m v_m \mid \lambda_i \in \mathbb{R}\}.$$

Määritelmä 1.3. Olkoon V joukon $\mathbb{R}^n$ osajoukko ja $(\cdot \mid \cdot)$ avaruuden $\mathbb{R}^n$ sisätulo. Tällöin joukon V *ortogonaalikomplementti* $V^\perp$ on

$$V^\perp = \{x \in \mathbb{R}^n \mid (x \mid v) = 0 \quad \text{kaikille } v \in V\}.$$

$V^\perp$ on siis joukko, jonka vektorit ovat kohtisuorassa jokaisen joukon V vektorin kanssa. Toistensa kanssa kohtisuorassa olevia vektoreita sanotaan *ortogonaalisiksi*. Lisäksi pätee $(V^\perp)^\perp = V$.

Määritelmä 1.4. Olkoon $\mathbb{R}^n$ euklidinen avaruus ja $(\cdot \mid \cdot)$ sen sisätulo. Tällöin avaruuden $\mathbb{R}^n$ vektorit $\{v_1, \dots, v_n\}$ ovat *ortogonaalisia* mikäli

$$\left(v_i \mid v_j\right) = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ \neq 0, & i = j \end{cases},$$

ja *ortonormaaleja* mikäli

$$\left(v_i \mid v_j\right) = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}.$$

Määritelmä 1.5. Olkoon A $m \times n$ matriisi

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}.$$

Tällöin matriisin A *transpoosi* A^T on $n \times m$ matriisi

$$A^T = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{m2} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}.$$

Sanotaan, että $n \times n$ matriisi A on *symmetrinen*, jos se ei muutu transponoitaessa eli $A^T = A$.

Määritelmä 1.6. $n \times n$ matriisia Q sanotaan *ortogonaaliseksi*, mikäli se on kääntyvä ja $Q^{-1} = Q^T$.

Ortogonaalisen matriisin sarakevektorit ovat ortonormaaleja. Lisäksi ortogonaalisella matriisilla on kaksi kuvauksen kannalta olennaista ominaisuutta, sillä se säilyttää vektorien pituudet ja niiden väliset kulmat. Todistetaan näistä kahdesta ominaisuudesta vektorien pituuksien säilyvyys seuraavassa lauseessa.

Lause 1.7. *Olkoon $n \times n$ matriisi Q ortogonaalinen. Lisäksi olkoon x ja y avaruuden $\mathbb{R}^n$ vektoreita. Tällöin*

$$(Qx \mid Qy) = (x \mid y) \qquad \textit{ja} \qquad \|Qx\| = \|x\|.$$

Todistus. Käyttäen sisätulon, transpoosin ja ortogonaalisen matriisin ominaisuuksia saadaan

$$\begin{aligned} (Qx \mid Qy) &= (Qx)^T Qy \\ &= x^T Q^T Qy \\ &= x^T I y \\ &= x^T y \\ &= (x \mid y). \end{aligned}$$

Tällöin erityisesti

$$\begin{aligned} \|Qx\|^2 &= (Qx \mid Qx) \\ &= (x \mid x) \\ &= \|x\|^2, \end{aligned}$$

josta seuraa, että $\|Qx\| = \|x\|$. □

Koska ortogonaalinen matriisi säilyttää vektoreiden pituudet ja sisätulot, niin se kuvaa ortonormaalit kannat ortonormaaleiksi kannoiksi. Ortogonaalinen matriisi on siis erikoistapaus kannanvaihtomatriisista.

2 Neljä aliavaruutta

Tämän kappaleen tarkoituksena on tutustua neljään $m \times n$ matriisiin A liittyvään aliavaruuteen. Kappaleen laatimisessa on käytetty apuna Gilbert Strangin artikkelia [4]. Esitellään aluksi muutama jatkossa käytettävä merkintä.

Määritelmä 2.1. Olkoon A $m \times n$ matriisi. Tällöin matriisin A *sarakeavaruus* $\mathrm{Col}\,(A)$ on sen sarakevektoreiden virittämä avaruus

$$\mathrm{Col}\,(A) = \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\}.$$

Matriisin A *riviavaruus* $\mathrm{Row}\,(A)$ on sen rivivektoreiden virittämä avaruus

$$\mathrm{Row}\,(A) = \mathrm{Col}\,(A^T).$$

Matriisin A *ydin* $N(A)$ on

$$N(A) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid Ax = 0\}.$$

Matriisin A *aste* $\mathrm{rank}\,(A)$ on sen sarakeavaruuden *dimensio* $\dim \mathrm{Col}\,(A)$.

Avaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$ dimensio vastaa matriisin A lineaarisesti riippumattomien sarakkeiden lukumäärää. Pidetään myös yleisesti tunnettuna, että $n \times n$ neliömatriisi on kääntyvä, jos ja vain jos sen aste on n. Tämän tuloksen todistuksen voi halutessaan lukea kirjan [1] sivulta 358.

Riviavaruus $\mathrm{Row}\,(A)$ ja matriisin A ydin $N(A)$ ovat avaruuden $\mathbb{R}^n$ aliavaruuksia. Sarakeavaruus $\mathrm{Col}\,(A)$ ja neljäs tarvittava aliavaruus, matriisin A^T ydin $N(A^T)$ ovat puolestaan avaruuden $\mathbb{R}^m$ aliavaruuksia. Aloitetaan näiden aliavaruuksien esittely yhdellä lineaarialgebran tärkeimmistä tuloksista eli aliavaruuksien $\mathrm{Col}\,(A)$ ja $N(A)$ dimensioiden välille liittyvästä dimensiolauseesta. Lauseen mukaan aliavaruuksien $\mathrm{Col}\,(A)$ ja $N(A)$ dimensioiden summa vastaa matriisin A sarakkeiden lukumäärää.

Lause 2.2. *(Dimensiolause) Olkoon A $m \times n$ matriisi. Tällöin*

$$\dim \mathrm{Col}\,(A) + \dim N(A) = n.$$

Todistus. Olkoon $\dim N(A) = k$ ja $\{u_1, \ldots, u_k\}$ avaruuden $N(A)$ kanta. Koska $N(A)$ on avaruuden $\mathbb{R}^n$ aliavaruus, niin voimme laajentaa tämän kannan avaruuden $\mathbb{R}^n$ kannaksi $\{u_1, \ldots, u_k, v_1, \ldots, v_l\}$. Tällöin $n = k+l = \dim N(A)+l$. Riittää siis näyttää, että $\dim \mathrm{Col}\,(A) = l$.

Osoitetaan, että vektorit $Av_1, \ldots, Av_l$ muodostavat avaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$ kannan. Tästä seuraa, että $\dim \mathrm{Col}\,(A) = l$, sillä vektoreita on l kappaletta. Näytetään aluksi, että vektorit $Av_1, \ldots, Av_l$ virittävät avaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$. Matriisitulon lineaarisuuden nojalla lineaariselle verholle

$\langle Au_1, \ldots, Au_k, Av_1, \ldots, Av_l \rangle$ pätee

$$\begin{aligned}
&\langle Au_1, \ldots, Au_k, Av_1, \ldots, Av_l \rangle \\
&= A\langle u_1, \ldots, u_k, v_1, \ldots, v_l \rangle \\
&= A(\mathbb{R}^n) \\
&= \mathrm{Col}\,(A).
\end{aligned}$$

Kuitenkin $Au_1 = \ldots = Au_k = 0$, sillä $u_1, \ldots, u_k \in N(A)$. Siispä vektorit $Av_1, \ldots, Av_l$ virittävät avaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$. Tämä ei kuitenkaan vielä riitä näyttämään, että $\dim \mathrm{Col}\,(A) = l$. Näiden virittäjävektoreiden joukossa voi nimittäin olla myös lineaarisesti riippuvia vektoreita, jolloin todellisuudessa voisi olla $\dim \mathrm{Col}\,(A) < l$. Osoitetaan siis, että vektorit $Av_1, \ldots, Av_l$ ovat lineaarisesti riippumattomia ja siten muodostavat avaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$ kannan. Olkoon siis

$$\sum_{i=1}^{l} \alpha_i A v_i = 0,$$

joillekin $\alpha_1, \ldots, \alpha_l \in \mathbb{R}$. Matriisitulon lineaarisuuden nojalla saadaan

$$A\left(\sum_{i=1}^{l} \alpha_i v_i\right) = 0.$$

Tällöin $\sum_{i=1}^{l} \alpha_i v_i \in N(A)$. Eli on olemassa esitys

$$\sum_{i=1}^{l} \alpha_i v_i = \sum_{i=1}^{k} \beta_i u_i,$$

joillekin $\beta_1, \ldots, \beta_k \in \mathbb{R}$. Vektorit $u_1, \ldots, u_k, v_1, \ldots, v_l$ ovat lineaarisesti riippumattomia, jolloin yhtäsuurus on mahdollista vain, jos $\alpha_1 = \ldots = \alpha_l = \beta_1 = \ldots = \beta_k = 0$. Erityisesti siis $\alpha_1 = \ldots = \alpha_l = 0$, jolloin vektorit $Av_1, \ldots, Av_l$ ovat lineaarisesti riippumattomia. □

Dimensiolauseen yhteydessä esille tulee usein myös seuraava lineaarialgebran merkittävä tulos, jonka mukaan matriisin A sarakeavaruudella ja riviavaruudella on sama dimensio. Vastaavasti jos tulos muotoillaan käyttäen matriisin asteen määritelmää, niin matriisilla A ja sen transpoosilla A^T on sama aste.

Lause 2.3. *(Astelause) Olkoon A $m \times n$ matriisi. Tällöin on*

$$\dim \mathrm{Col}\,(A) = \dim \mathrm{Row}\,(A).$$

Yhtäpitävästi matriisin asteen ja transpoosin määritelmien nojalla $\mathrm{rank}\,(A) = \mathrm{rank}\,(A^T)$.

Todistus. Olkoon matriisin A paikalla ij oleva alkio a_{ij} ja matriisin A rivivektorit $r_1, r_2, \ldots, r_m$. Olkoon lisäksi $\dim \mathrm{Row}\,(A) = k$ ja $\{u_1, u_2, \ldots, u_k\}$ avaruuden $\mathrm{Row}\,(A)$ kanta. Tällöin voimme kirjoittaa jokaisen matriisin A rivin avaruuden $\mathrm{Row}\,(A)$ kantavektoreiden avulla lineaarikombinaatioina

$$\begin{cases} r_1 = \alpha_{11}u_1 + \alpha_{12}u_2 + \cdots + \alpha_{1k}u_k \\ r_2 = \alpha_{21}u_1 + \alpha_{22}u_2 + \cdots + \alpha_{2k}u_k \\ \vdots \\ r_m = \alpha_{m1}u_1 + \alpha_{m2}u_2 + \cdots + \alpha_{mk}u_k\,, \end{cases} \tag{1}$$

joillekin $\alpha_{ij} \in \mathbb{R}$. Merkitään paikalla i olevaa kantavektoria $u_i = (u_{i1}, u_{i2}, \ldots, u_{in})$. Tällöin yhtälöt (1) voidaan kirjoittaa muotoon

$$\begin{cases} r_1 = \alpha_{11}(u_{11}, u_{12}, \ldots, u_{1n}) + \alpha_{12}(u_{21}, u_{22}, \ldots, u_{2n}) + \cdots + \alpha_{1k}(u_{k1}, u_{k2}, \ldots, u_{kn}) \\ r_2 = \alpha_{21}(u_{11}, u_{12}, \ldots, u_{1n}) + \alpha_{22}(u_{21}, u_{22}, \ldots, u_{2n}) + \cdots + \alpha_{2k}(u_{k1}, u_{k2}, \ldots, u_{kn}) \\ \vdots \\ r_m = \alpha_{m1}(u_{11}, u_{12}, \ldots, u_{1n}) + \alpha_{m2}(u_{21}, u_{22}, \ldots, u_{2n}) + \cdots + \alpha_{mk}(u_{k1}, u_{k2}, \ldots, u_{kn})\,. \end{cases}$$

Nyt rivivektorin r_i paikalla j oleva komponentti on matriisin A alkio a_{ij}. Jos poimimme ylempien yhtälöiden molemmilta puolilta paikalla j olevat komponentit, niin saadaan yhtälöt

$$\begin{cases} a_{1j} = \alpha_{11}u_{1j} + \alpha_{12}u_{2j} + \cdots + \alpha_{1k}u_{kj} \\ a_{2j} = \alpha_{21}u_{1j} + \alpha_{22}u_{2j} + \cdots + \alpha_{2k}u_{kj} \\ \vdots \\ a_{mj} = \alpha_{m1}u_{1j} + \alpha_{m2}u_{2j} + \cdots + \alpha_{mk}u_{kj}\,. \end{cases}$$

Nämä voidaan kirjoittaa muotoon

$$\begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{pmatrix} = u_{1j}\begin{pmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{21} \\ \vdots \\ \alpha_{m1} \end{pmatrix} + u_{2j}\begin{pmatrix} \alpha_{12} \\ \alpha_{22} \\ \vdots \\ \alpha_{m2} \end{pmatrix} + \cdots + u_{kj}\begin{pmatrix} \alpha_{1k} \\ \alpha_{2k} \\ \vdots \\ \alpha_{mk} \end{pmatrix}.$$

Merkitään vektoria $\alpha_i = \begin{pmatrix} \alpha_{1i} \\ \alpha_{2i} \\ \vdots \\ \alpha_{mi} \end{pmatrix}$, jolloin ylempi yhtälö voidaan kirjoittaa muotoon

$$\begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{pmatrix} = u_{1j}\alpha_1 + u_{2j}\alpha_2 + \cdots + u_{kj}\alpha_k.$$

Tästä huomataan, että yhtälön vasen puoli on matriisin A paikalla j oleva sarake. Siispä jokainen matriisin A sarake voidaan kirjoittaa lineaarikombinaationa vektoreiden $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k$ avulla. Tällöin vektorit $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k$ virittävät avaruuden $\operatorname{Col}(A)$, jolloin

$$\dim \operatorname{Col}(A) \leq k = \dim \operatorname{Row}(A). \tag{2}$$

Toisaalta epäyhtälö (2) pätee mille tahansa matriisille A, joten se pätee erityisesti myös matriisille A^T. Siispä saadaan $\dim \operatorname{Col}(A^T) \leq \dim \operatorname{Row}(A^T)$. Tästä seuraa, että

$$\dim \operatorname{Row}(A) \leq \dim \operatorname{Col}(A). \tag{3}$$

Tällöin epäyhtälöistä (2) ja (3) saadaan, että $\dim \operatorname{Row}(A) = \dim \operatorname{Col}(A)$. □

Seuraavan neljää aliavaruutta koskevan tuloksen mukaan ydin $N(A)$ ja riviavaruus ovat toisiaan vasten kohtisuorassa. Lisäksi ydin $N(A^T)$ ja sarakeavaruus ovat toisiaan vasten kohtisuorassa. Tämä kohtisuoruus antaa osaltaan myös selityksen sille, miksi ydin $N(A^T)$ on juuri tarvitsevamme neljäs aliavaruus.

Lause 2.4. *Olkoon A $m \times n$ matriisi. Tällöin $N(A) = \operatorname{Row}(A)^\perp$ ja $N(A^T) = \operatorname{Col}(A)^\perp$.*

Todistus. Näytetään aluksi, että $N(A) = \operatorname{Row}(A)^\perp$. Osoitetaan, että $N(A)$ on kohtisuorassa avaruuden $\operatorname{Row}(A)$ kanssa. Täytyy siis näyttää, että jokainen avaruuden $N(A)$ vektori on ortogonaalinen jokaisen avaruuden $\operatorname{Row}(A)$ vektorin kanssa. Olkoon siis $x \in N(A)$ ja $y \in \operatorname{Row}(A)$. Tällöin vektoreille x ja y on voimassa

$$\begin{cases} Ax = 0 \\ y = A^T z, \text{ jollekin } z \in \mathbb{R}^m \end{cases}.$$

Saadaan siis

$$\begin{aligned}(x \mid y) &= x^T y \\ &= x^T A^T z \\ &= (Ax)^T z \\ &= 0^T z \\ &= 0.\end{aligned}$$

Tästä seuraa, että $N(A) \subseteq \operatorname{Row}(A)^\perp$. Toisaalta jos vektori $v \in \operatorname{Row}(A)^\perp$, niin v on ortogonaalinen jokaisen matriisin A^T sarakevektorin kanssa eli $Av = 0$. Siispä $v \in N(A)$ ja siten $\operatorname{Row}(A)^\perp \subseteq N(A)$. Tällöin täytyy olla $N(A) = \operatorname{Row}(A)^\perp$. Tulos $N(A^T) = \operatorname{Col}(A)^\perp$ seuraa tästä, sillä

$$N(A^T) = \operatorname{Row}(A^T)^\perp = \operatorname{Col}(A)^\perp.$$

□

Tiedämme nyt, että ydin $N(A)$ ja riviavaruus ovat toistensa ortogonaalikomplementteja. Vastaavasti ydin $N(A^T)$ ja sarakeavaruus ovat toistensa ortogonaalikomplementteja. Seuraava ortogonaalikomplementtien dimensioita ja niiden ortonormaaleja kantoja koskeva tulos luo lisää ymmärrystä näiden neljän aliavaruuden merkityksestä.

Lause 2.5. *Olkoon V avaruuden $\mathbb{R}^n$ aliavaruus. Tällöin* $\dim V + \dim V^\perp = n$. *Lisäksi jos $\{v_1, \ldots, v_r\}$ on aliavaruuden V ortonormaali kanta ja $\{v_{r+1}, \ldots, v_n\}$ on aliavaruuden $V^\perp$ ortonormaali kanta, niin $\{v_1, \ldots, v_r, v_{r+1}, \ldots, v_n\}$ on avaruuden $\mathbb{R}^n$ ortonormaali kanta.*

Todistus. Jos $V = \{0\}$, niin $V^\perp = \mathbb{R}^n$. Tällöin $\dim V + \dim V^\perp = 0 + n = n$. Jos $V \neq \{0\}$, niin olkoon $\{v_1, \ldots, v_r\}$ avaruuden V kanta. Olkoon Q $n \times r$ matriisi, jolle $Q = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_r \end{pmatrix}$. Sarakevektorit $v_1, \ldots, v_r$ ovat kantavektoreina lineaarisesti riippumattomia, jolloin $\dim \operatorname{Col}(Q) = r$ ja lisäksi $\operatorname{Col}(Q) = V$. Tällöin Lauseen 2.4 mukaan $V^\perp = \operatorname{Col}(Q)^\perp = N(Q^T)$. Nyt dimensiolause 2.2 sovellettuna $r \times n$ matriisille Q^T antaa

$$\dim \operatorname{Col}(Q^T) + \dim N(Q^T) = n.$$

Astelauseen 2.3 nojalla $\dim \operatorname{Col}(Q^T) = \dim \operatorname{Col}(Q)$, jolloin $\dim \operatorname{Col}(Q) + \dim N(Q^T) = n$. Koska $V = \operatorname{Col}(Q)$ ja $V^\perp = N(Q^T)$, niin

$$\dim V + \dim V^\perp = n.$$

Näytetään vielä, että $\{v_1, \ldots, v_r, v_{r+1}, \ldots, v_n\}$ on avaruuden $\mathbb{R}^n$ ortonormaali kanta. Osoitetaan aluksi, että vektorit $v_1, \ldots, v_r, v_{r+1}, \ldots, v_n$ ovat lineaarisesti riippumattomia. Olkoon

$$\alpha_1 v_1 + \ldots + \alpha_r v_r + \alpha_{r+1} v_{r+1} + \ldots + \alpha_n v_n = 0,$$

joillekin $\alpha_1, \ldots, \alpha_r, \alpha_{r+1}, \ldots, \alpha_n \in \mathbb{R}$. Merkitään $x = \alpha_1 v_1 + \ldots + \alpha_r v_r$ ja $y = \alpha_{r+1} v_{r+1} + \ldots + \alpha_n v_n$. Nyt siis $x + y = 0$ eli $x = -y$. Lisäksi $x \in V$ ja $y \in V^\perp$, joten $(x \mid y) = 0$. Tästä seuraa, että $(x \mid x) = (x \mid -y) = -(x \mid y) = 0$ ja vastaavasti $(y \mid y) = (y \mid -x) = -(y \mid x) = 0$. Tämä on mahdollista vain, jos $x = 0$ ja $y = 0$. Siispä saadaan

$$\begin{cases} \alpha_1 v_1 + \ldots + \alpha_r v_r = 0 \\ \alpha_{r+1} v_{r+1} + \ldots + \alpha_n v_n = 0 \end{cases}.$$

Nyt $v_1, \ldots, v_r$ ovat avaruuden V kantavektoreina lineaarisesti riippumattomia. Vastaavasti vektorit $v_{r+1}, \ldots, v_n$ ovat avaruuden $V^\perp$ kantavektoreina lineaarisesti riippumattomia, jolloin täytyy olla $\alpha_1 = \cdots = \alpha_r = 0$ ja $\alpha_{r+1} = \cdots = \alpha_n = 0$. Tällöin vektorit $v_1, \ldots, v_r, v_{r+1}, \ldots, v_n$ ovat lineaarisesti riippumattomia ja niitä on n kappaletta, jolloin ne muodostavat avaruuden $\mathbb{R}^n$ kannan. Osoitetaan vielä, että tämä kanta on ortonormaali. Nyt vektorit

$v_1, \ldots, v_r \in V$ ovat oletuksen nojalla ortonormaaleja ja vastaavasti myös vektorit $v_{r+1}, \ldots, v_n \in V^{\perp}$ ovat ortonormaaleja. Lisäksi avaruudet V ja $V^{\perp}$ ovat toisiaan vastaan kohtisuorassa. Tällöin kaikki vektorit $v_1, \ldots, v_r, v_{r+1}, \ldots, v_n$ ovat keskenään ortonormaaleja ja muodostavat avaruuden $\mathbb{R}^n$ ortonormaalin kannan. □

Jos yhdistämme Lauseen 2.4 ja edellisen Lauseen 2.5 dimensioita koskevan tuloksen, niin saamme kaksi tärkeää näiden aliavaruuksien dimensioita koskevaa tulosta:

$$\dim \operatorname{Row}(A) + \dim N(A) = n \quad \text{ja} \quad \dim \operatorname{Col}(A) + \dim N(A^T) = m. \tag{4}$$

Tämä dimensioita koskeva tulos on selityksenä sille, miksi $N(A^T)$ on neljäs tarvitsemamme aliavaruus. Lisäksi aliavaruuksien $\operatorname{Row}(A)$ ja $N(A)$ ortonormaalien kantojen yhdiste muodostaa ortonormaalin kannan avaruudelle $\mathbb{R}^n$. Vastaavasti aliavaruuksien $\operatorname{Col}(A)$ ja $N(A^T)$ ortonormaalien kantojen yhdiste muodostaa ortonormaalin kannan avaruudelle $\mathbb{R}^m$. Näiden neljän aliavaruuden ortonormaalit kannat ovat merkittävässä roolissa myöhemmin esiteltävässä matriisin singulaariarvohajotelmassa.

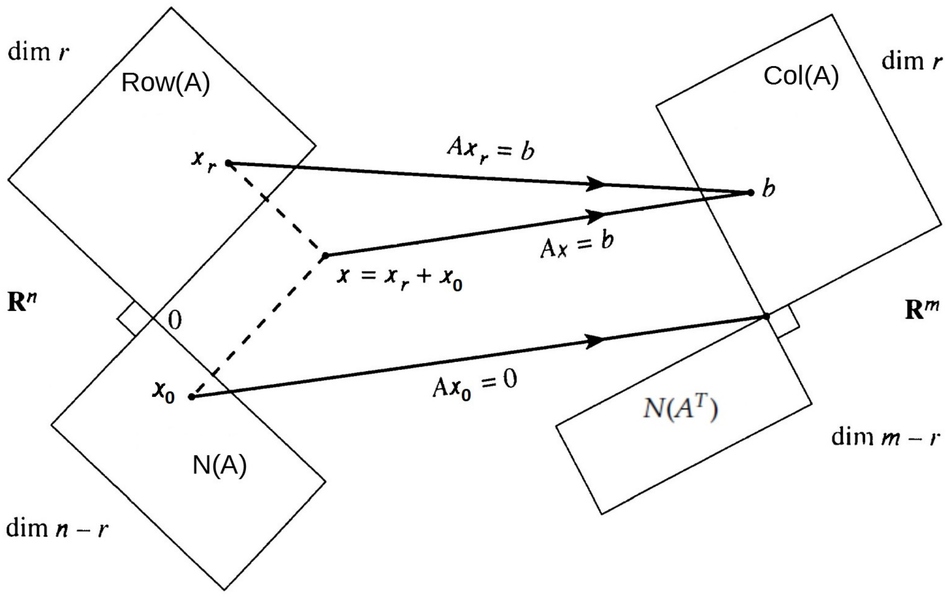
Ymmärtääksemme paremmin näiden neljän aliavaruuden yhteyttä matriisiin A tarkastellaan lineaarista yhtälöryhmää $Ax = b$ ja sen ratkaisun löytämistä. Yhtälöryhmän $Ax = b$ ratkaiseminen vastaa kaikkien niiden kertoimien $x_1, x_2, \ldots, x_n$ löytämistä, jotka yhdessä matriisin A sarakkeiden kanssa muodostavat vektorin b sarakeavaruudessa $\operatorname{Col}(A)$:

$$Ax = \underbrace{\begin{pmatrix} | & | & \cdots & | \end{pmatrix}}_{\text{matriisin } A \text{ sarakkeet}} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = x_1(1.\ \text{sarake}) + \cdots + x_n(n.\ \text{sarake}) = b.$$

Ydin $N(A)$ puolestaan sisältää kaikki ratkaisut homogeeniseen yhtälöön $Ax = 0$. Mikäli vektori b kuuluu sarakeavaruuteen $\operatorname{Col}(A)$, niin yhtälöllä $Ax = b$ on olemassa ratkaisu. Yksittäinen ratkaisu x_r on riviavaruudessa $\operatorname{Row}(A)$ ja homogeenisen yhtälön ratkaisu x_0 on ytimessä $N(A)$. Näistä muodostuu yleinen ratkaisu $x = x_r + x_0$. Tilanteen hahmottamiseen auttaa Kuva 1. Kuva on lainattu samasta artikkelista [4], mutta sen merkintöjä on hieman muutettu vastaamaan tässä tutkielmassa käytettäviä merkintöjä.

Kuvasta 1 nähdään kuinka matriisi A vie vektorin x_r sarakeavaruuteen ja ytimestä $N(A)$ olevan vektorin x_0 nollavektoriksi. Vektori x_r on ortogonaalinen vektorin x_0 kanssa. Tämä seuraa siitä, että aliavaruudet $\operatorname{Row}(A)$ ja $N(A)$ ovat Lauseen 2.4 mukaan toistensa ortogoonalikomplementteja. Vastaavasti aliavaruudet $\operatorname{Col}(A)$ ja $N(A^T)$ ovat toistensa ortogonaalikomplementteja. Tämä ilmenee myös kuvasta, sillä vastaavat aliavaruudet ovat kohtisuorassa keskenään.

Kuvasta 1 näkyy myös Lauseen 2.3 tulos, sillä riviavaruudella ja sarakeavaruudella on sama dimensio r. Lisäksi ytimien $N(A)$ ja $N(A^T)$ dimensiot on laskettu yhtälöiden (4) avulla ja merkitty kuvaan.



Kuva 1: Yhtälö $Ax = b$ ja siihen liittyvät neljä aliavaruutta.

3 Matriisin $A^T A$ ominaisuuksia

Tämän kappaleen tarkoituksena on edellisen kappaleen tuloksia apuna käyttäen edetä kohden seuraavassa kappaleessa esiteltävää matriisin singulaariarvohajotelmaa. Erityisesti matriisi $A^T A$ tulee olemaan singulaariarvohajotelman kannalta olennainen ja tarkoituksena on esitellä tähän matriisiin liittyviä myöhemmin tarvittavia tuloksia.

Määritelmä 3.1. Olkoon A $n \times n$ matriisi. Jos vektorille $v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ ja luvulle $\lambda \in \mathbb{R}$ pätee

$$Av = \lambda v,$$

niin luku λ on matriisin A *ominaisarvo* ja vektori v siihen liittyvä *ominaisvektori*.

Yhtäpitävästi matriisin A ominaisarvot saadaan yhtälöstä

$$\det(A - \lambda I) = 0,$$

jossa $\det(A - \lambda I)$ on niin sanottu matriisin A *karakteristinen polynomi*. Karakteristisen polynomin juuren monikertaa sanotaan ominaisarvon *algebralliseksi kertaluvuksi*.

Esitellään seuraavaksi matriisin ominaisarvojen yhteydessä diagonaalimatriisin ominaisarvoja koskeva aputulos, sekä *similaaristen* matriisien määritelmä ja siihen liittyvä aputulos, joita tarvitsemme myöhemmin kappaleessa 7.

Lemma 3.2. *Olkoon D $n \times n$ diagonaalimatriisi, jonka diagonaalialkiot ovat $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$. Tällöin matriisin D diagonaalialkiot ovat sen ominaisarvot algebralliset kertaluvut huomioiden.*

Todistus. Nyt matriisin D karakteristinen polynomi on

$$\begin{aligned}\det(D - \lambda I) &= \det\begin{pmatrix}\lambda_1 - \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_n - \lambda\end{pmatrix} \\ &= (\lambda_1 - \lambda)\cdots(\lambda_n - \lambda).\end{aligned}$$

Tästä muodosta nähdään, että matriisin D diagonaalialkiot $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ ovat karakteristisen polynomin juuret, jolloin ne ovat matriisin D ominaisarvot algebralliset kertaluvut huomioiden. □

Määritelmä 3.3. Olkoon A ja B $n \times n$ matriiseja. Matriisit A ja B ovat *similaariset*, jos on olemassa kääntyvä $n \times n$ matriisi C siten, että

$$B = C^{-1}AC.$$

Tällöin merkitään $A \sim B$.

Lemma 3.4. *Olkoon A, B ja D $n \times n$ matriiseja. Lisäksi olkoon $A \sim B$ ja $A \sim D$. Tällöin*

(i) $B \sim D$,

(ii) matriiseilla A ja B on samat karakteristiset polynomit,

(iii) matriiseilla A ja B on algebralliset kertaluvut huomioiden samat ominaisarvot.

Todistus. Lauseen todistuksessa on käytetty apuna kirjan [1] kappaleen 6.3 Lauseen 1 todistusta.

(*i*) Matriisit A ja B ovat similaariset, joten on olemassa kääntyvä matriisi C, jolle $B = C^{-1}AC$. Lisäksi $A \sim D$, joten on olemassa kääntyvä matriisi P, jolle $A = P^{-1}DP$. Tällöin saadaan

$$\begin{aligned} B &= C^{-1}AC \\ &= C^{-1}(P^{-1}DP)C \\ &= (PC)^{-1}D(PC) \end{aligned}$$

Siispä $B \sim D$.

(*ii*) Matriisit A ja B ovat similaariset, jolloin on olemassa kääntyvä matriisi C, jolle $B = C^{-1}AC$. Tällöin determinantin laskusääntöjä käyttäen matriisin B karakteristiselle polynomille saadaan

$$\begin{aligned} \det(B - \lambda I) &= \det(C^{-1}AC - \lambda I) \\ &= \det(C^{-1}AC - \lambda C^{-1}IC) \\ &= \det(C^{-1}AC - C^{-1}(\lambda I)C) \\ &= \det(C^{-1}(A - \lambda I)C) \\ &= \det(C^{-1})\det(A - \lambda I)\det(C) \\ &= \det(C^{-1})\det(C)\det(A - \lambda I) \\ &= \det(C^{-1}C)\det(A - \lambda I) \\ &= \det(I)\det(A - \lambda I) \\ &= \det(A - \lambda I). \end{aligned}$$

Siispä matriiseilla A ja B on samat karakteristiset polynomit.

(*iii*) Matriisien A ja B karakteristiset polynomit ovat kohdan (*ii*) nojalla samat, joten näiden karakterististen polynomien juuret ovat myös samat. Nämä juuret ovat matriisien A ja B ominaisarvot ja niiden algebralliset kertaluvut ovat samat. $\square$

Ennen matriisiin $A^T A$ liittyvien tuloksien esittelyä tarvitsemme *ortogonaalisesti diagonalisoituvan* matriisin määritelmän ja kaksi apulausetta. Näistä ensimmäisen mukaan symmetrinen matriisi on ortogonaalisesti diagonalisoituva ja toisen mukaan matriisin aste ei muutu mikäli sitä kerrotaan kääntyvällä matriisilla.

Määritelmä 3.5. $n \times n$ matriisi A on *ortogonaalisesti diagonalisoituva*, jos on olemassa ortogonaalinen matriisi Q siten että

$$Q^T A Q = D,$$

missä D on diagonaalimatriisi ja sen diagonaalialkiot $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ ovat matriisin A ominaisarvot algebralliset kertaluvut huomioiden.

Lemma 3.6. *Olkoon A $n \times n$ symmetrinen matriisi. Tällöin A on ortogonaalisesti diagonalisoituva.*

Todistus. Tämän lauseen todistus sivuutetaan tässä työssä. Todistuksen voi halutessaan lukea teoksen [1] kappaleesta 6.4. □

Lemma 3.7. *Olkoon A $m \times n$ matriisi. Lisäksi olkoon B $n \times n$ kääntyvä matriisi ja C $m \times m$ kääntyvä matriisi. Tällöin* $\operatorname{rank}(A) = \operatorname{rank}(AB) = \operatorname{rank}(CA)$.

Todistus. Lauseen todistus on tehty teoksessa [5] olevien Seurauksen 5.4.3 ja Lemman 5.4.3 todistuksien ideoita yhdistämällä. Näytetään aluksi, että $\operatorname{Col}(AB) = \operatorname{Col}(A)$. Olkoon matriisi A muotoa $A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$ ja matriisi B muotoa $B = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{pmatrix}$. Merkitään matriisin B paikalla j olevaa sarakevektoria $b_j = (\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n)$. Tällöin matriisin AB paikalla j oleva sarakevektori on muotoa

$$Ab_j = \beta_1 a_1 + \beta_2 a_2 + \ldots + \beta_n a_n,$$

missä $a_1, a_2, \ldots, a_n \in \operatorname{Col}(A)$ ja $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n \in \mathbb{R}$. Koska $\operatorname{Col}(A)$ on aliavaruus, niin edelleen $Ab_j \in \operatorname{Col}(A)$. Siispä tästä seuraa, että $\operatorname{Col}(AB) \subseteq \operatorname{Col}(A)$.

Toisaalta $\operatorname{Col}(A) = \operatorname{Col}(ABB^{-1}) = \operatorname{Col}\big((AB)B^{-1}\big) \subseteq \operatorname{Col}(AB)$ aiemman kohdan nojalla, sillä matriisi B^{-1} on kääntyvä. Tällöin siis on $\operatorname{Col}(AB) = \operatorname{Col}(A)$ ja siispä $\operatorname{rank}(AB) = \operatorname{rank}(A)$.

Näytetään seuraavaksi, että $\operatorname{Row}(CA) = \operatorname{Row}(A)$. Nyt pätee

$$\begin{aligned} \operatorname{Row}(CA) &= \operatorname{Col}((CA)^T) \\ &= \operatorname{Col}(A^T C^T) \\ &\subseteq \operatorname{Col}(A^T) \\ &= \operatorname{Row}(A), \end{aligned}$$

sillä matriisi C^T on kääntyvä. Matriisin C^T kääntyvyys seuraa matriisin C kääntyvyydestä, sillä $C^T(C^{-1})^T = (C^{-1}C)^T = I^T = I$. Toisaalta myös

$$\begin{aligned}\operatorname{Row}(A) &= \operatorname{Row}(C^{-1}CA)\\ &= \operatorname{Col}\left((C^{-1}CA)^T\right)\\ &= \operatorname{Col}\left((CA)^T(C^{-1})^T\right)\\ &\subseteq \operatorname{Col}\left((CA)^T\right)\\ &= \operatorname{Row}(CA),\end{aligned}$$

sillä matriisi $(C^{-1})^T$ on matriisin C^T käänteismatriisina kääntyvä ja matriisi $(CA)^T$ on $n \times m$ matriisi. Tällöin siis $\operatorname{Row}(CA) = \operatorname{Row}(A)$, jolloin $\dim \operatorname{Row}(CA) = \dim \operatorname{Row}(A)$. Tästä seuraa astelauseen 2.3 nojalla, että $\dim \operatorname{Col}(CA) = \dim \operatorname{Col}(A)$ ja siispä $\operatorname{rank}(CA) = \operatorname{rank}(A)$. □

Esitellään seuraavaksi kaksi matriisiin A^TA liittyvää tulosta, joita tarvitsemme myöhemmin matriisin singulaariarvohajotelman todistuksessa.

Lause 3.8. *Olkoon A $m \times n$ matriisi. Tällöin $n \times n$ matriisilla A^TA on seuraavat ominaisuudet*

(i) *matriisi A^TA on symmetrinen,*

(ii) *matriisin A^TA ominaisarvot ovat ei-negatiivisia,*

(iii) *matriisi A^TA on ortogonaalisesti diagonalisoituva,*

(iv) *matriisin A^TA aste vastaa sen positiivisten ominaisarvojen lukumäärää algebralliset kertaluvut huomioiden.*

Todistus. (i) Symmetrisyyden näyttäminen onnistuu suoralla laskulla transpoosin laskusääntöjä käyttäen

$$(A^TA)^T = A^T(A^T)^T = A^TA.$$

(ii) Olkoon λ matriisin A^TA ominaisarvo ja v sitä vastaava ominaisvektori. Tällöin

$$\begin{aligned}\|Av\|^2 &= (Av)^T(Av)\\ &= v^TA^T(Av)\\ &= v^T(A^TA)v\\ &= v^T(\lambda v)\\ &= \lambda v^Tv\\ &= \lambda\|v\|^2.\end{aligned}$$

Tästä saadaan

$$\lambda = \frac{||Av||^2}{||v||^2} \geq 0.$$

Tällöin nähdään, että matriisin A^TA ominaisarvo λ on ei-negatiivinen.

(*iii*) Kohdan (*i*) mukaan matriisi A^TA on symmetrinen, jolloin Lemman 3.6 nojalla matriisi A^TA on ortogonaalisesti diagonalisoituva.

(*iv*) Kohdan (*iii*) nojalla matriisi A^TA on ortogonaalisesti diagonalisoituva, joten on olemassa ortogonaalinen matriisi Q siten että

$$Q^T(A^TA)Q = D, \tag{5}$$

missä D on diagonaalimatriisi ja sen diagonaalialkiot $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ ovat matriisin A^TA ominaisarvot. Nyt matriisi Q on ortogonaalinen eli se on kääntyvä ja $Q^{-1} = Q^T$. Tällöin kun operoidaan yhtälöä (5) vasemmalta matriisilla Q ja oikealta matriisilla Q^T, niin saadaan

$$A^TA = QDQ^T.$$

Tällöin $\operatorname{rank}(A^TA) = \operatorname{rank}(QDQ^T)$. Lisäksi Lauseen 3.7 nojalla $\operatorname{rank}(QDQ^T) = \operatorname{rank}(D)$, sillä matriisit Q ja Q^T ovat kääntyviä. Siispä saadaan, että $\operatorname{rank}(A^TA) = \operatorname{rank}(D)$. Diagonaalimatriisi D on muotoa

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix},$$

missä luvut $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ ovat matriisin A^TA ominaisarvot. Nyt matriisin D muodosta nähdään, että kaikki matriisin D sarakkeet, joilla on nollasta poikkeava ominaisarvo ovat lineaarisesti riippumattomia. Nämä nollasta poikkeavat ominaisarvot ovat kohdan (*ii*) nojalla positiivisia. Tällöin matriisin D aste vastaa matriisin A^TA positiivisten ominaisarvojen lukumäärää algebralliset kertaluvut huomioiden. Nyt kuitenkin $\operatorname{rank}(A^TA) = \operatorname{rank}(D)$, joten väite on todistettu. □

Seuraavan tuloksen mukaan matriiseilla A ja A^TA on sama aste. Lisäksi niillä on sama ydin.

Lause 3.9. *Olkoon $m \times n$ matriisin A aste* $\operatorname{rank}(A) = r$. *Tällöin myös matriisin A^TA aste on* $\operatorname{rank}(A^TA) = r$. *Lisäksi $N(A) = N(A^TA)$.*

Todistus. Osoitetaan aluksi, että $N(A) = N(A^TA)$. Olkoon $x \in N(A)$. Tällöin $Ax = 0$, josta saadaan $A^TAx = 0$. Tästä seuraa, että $x \in N(A^TA)$. Siispä $N(A) \subseteq N(A^TA)$.

Toisaalta olkoon $x \in N(A^TA)$, jolloin $(A^TA)x = 0$. Tästä saadaan $x^T(A^TA)x = 0$, joka on transpoosin laskusääntöjen nojalla sama kuin $(Ax)^T(Ax) = \|Ax\|^2 = 0$. Täytyy siis olla $Ax = 0$, joten $x \in N(A)$. Näin ollen $N(A^TA) \subseteq N(A)$. Siispä täytyy olla $N(A) = N(A^TA)$. Nyt A on $m \times n$ matriisi ja A^TA on $n \times n$ matriisi, jolloin dimensiolauseen nojalla

$$\begin{cases} \operatorname{rank}(A) + \dim N(A) = n \\ \operatorname{rank}(A^TA) + \dim N(A^TA) = n \end{cases},$$

joten

$$\operatorname{rank}(A) + \dim N(A) = \operatorname{rank}(A^TA) + \dim N(A^TA),$$

ja tästä saadaan

$$\operatorname{rank}(A) = \operatorname{rank}(A^TA).$$

□

4 Matriisin singulaariarvohajotelma

Tässä kappaleessa esitellään tämän työn päätulos, eli matriisin singulaariarvohajotelma. Hajotelman avulla jokainen $m \times n$ matriisi A voidaan esittää muodossa $A = U\Sigma V^T$, missä matriisit U ja V ovat ortogonaalisia ja Σ on diagonaalimatriisi. Lisäksi todistetaan tämä tulos ja lasketaan esimerkki hajotelma konkreettiselle matriisille. Kappaleen lopuksi tutustutaan hajotelman toimintaan.

Määritelmä 4.1. Olkoon A $m \times n$ matriisi. Matriisin A *singulaariarvot* $\sigma_1, \ldots, \sigma_n$ ovat matriisin A^TA ominaisarvojen $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ neliöjuuret $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i} \geq 0$.

Tässä on hyvä huomata, että Lemman 3.8 mukaan matriisin A^TA ominaisarvot ovat ei-negatiivisia, jolloin niiden neliöjuuret eli matriisin A singulaariarvot ovat hyvin määriteltyjä.

Lause 4.2. *Jokainen $m \times n$ matriisi A voidaan esittää muodossa*

$$A = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_m \end{pmatrix} \left(\begin{array}{ccc|c} \sigma_1 & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{r\times(n-r)} \\ 0 & \cdots & \sigma_r & \\ \hline & 0_{(m-r)\times r} & & 0_{(m-r)\times(n-r)} \end{array}\right) \begin{pmatrix} {v_1}^T \\ {v_2}^T \\ \vdots \\ {v_n}^T \end{pmatrix},$$

missä matriisin U sarakevektorit u_i ovat matriisin AA^T ominaisvektoreita. Lisäksi $m\times n$ diagonaalimatriisin Σ järjestyksessä $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0$ olevat diagonaalialkiot ovat matriisin A positiiviset singulaariarvot ja matriisi täydennetään tarvittaessa riittävän suurilla nollamatriiseilla. Matriisin V sarakevektorit v_i ovat matriisin A^TA ominaisvektoreita. Lisäksi matriisit U ja V ovat molemmat ortogonaalisia.

Todistus. Tämän lauseen todistuksessa on käytetty apuna teoksen [2] Lauseen 6.5.1 todistusta. Lemman 3.8 nojalla kaikki matriisin A^TA ominaisarvot ovat reaalisia ja ei-negatiivisia. Lisäksi matriisille A^TA on olemassa sen ortogonaalisesti diagonalisoiva matriisi V.

Nyt siis Lauseen 4.2 matriisit A^TA ja V ovat hyvin määriteltyjä. Näin ollen voidaan matriisin V sarakevektorit eli matriisin A^TA ominaisvektorit järjestää niihin liittyvien ominaisarvojen

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n \geq 0$$

määräämään järjestykseen. Koska nämä ominaisarvot ovat reaalisia ja ei-negatiivisia, niin matriisin A singulaariarvot ovat

$$\sigma_j = \sqrt{\lambda_j} \qquad j = 1, \ldots, n.$$

Olkoon matriisin A aste r. Tällöin Lemman 3.9 mukaan matriisin A^TA aste on myös r. Toisaalta Lauseen 3.8 kohdan (*iv*) nojalla matriisin A^TA aste vastaa sen positiivisten ominaisarvojen lukumäärää algebralliset kertaluvut huomioiden eli ominaisarvoille pätee

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_r > 0 \qquad \text{ja} \qquad \lambda_{r+1} = \lambda_{r+2} = \ldots = \lambda_n = 0.$$

Vastaavasti singulaariarvoille pätee

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0 \qquad \text{ja} \qquad \sigma_{r+1} = \sigma_{r+2} = \ldots = \sigma_n = 0.$$

Esitetään matriisi $V = \begin{pmatrix} V_1 & V_2 \end{pmatrix}$ näihin ominaisarvoihin liittyvien ominaisvektorien avulla siten, että

$$V_1 = \begin{pmatrix} v_1 & \cdots & v_r \end{pmatrix} \qquad \text{ja} \qquad V_2 = \begin{pmatrix} v_{r+1} & \cdots & v_n \end{pmatrix}.$$

Lisäksi olkoon

$$\Sigma_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & \sigma_r \end{pmatrix}$$

$r \times r$ diagonaalimatriisi, jonka diagonaalialkiot ovat positiiviset singulaariarvot $\sigma_1, \ldots, \sigma_r$. Tällöin hajotelman varsinainen $m \times n$ matriisi Σ voidaan muodostaa matriisista Σ_1 täydentämällä se sopivan kokoisilla nollamatriiseilla, jolloin

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Nyt olemme muodostaneet singulaariarvohajotelman matriisit V ja Σ. Tehtävänä on siis vielä muodostaa ortogonaalinen matriisi $U = \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_m \end{pmatrix}$ siten, että

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

tai yhtä pitävästi

$$AV = U\Sigma. \tag{6}$$

Tarkastelemalla muotoa (6) sarakkeeseen r asti huomataan, että

$$Av_j = \sigma_j u_j, \qquad j = 1, \ldots, r.$$

Määritellään tämän avulla

$$u_j = \frac{1}{\sigma_j} Av_j, \qquad j = 1, \ldots, r \tag{7}$$

ja

$$U_1 = \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_r \end{pmatrix}.$$

Tällöin näillä merkinnöillä pätee

$$AV_1 = U_1\Sigma_1. \tag{8}$$

Osoitetaan seuraavaksi, että matriisin U_1 sarakevektorit ovat keskenään ortonormaaleja. Nyt kaikille $1 \leq i \leq r$ ja $1 \leq j \leq r$ pätee

$$\begin{aligned}
\left(u_i \mid u_j\right) &= {u_i}^T u_j \\
&= \left(\frac{1}{\sigma_i} A v_i\right)^T \left(\frac{1}{\sigma_j} A v_j\right) \\
&= \left(\frac{1}{\sigma_i} {v_i}^T A^T\right)\left(\frac{1}{\sigma_j} A v_j\right) \\
&= \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} {v_i}^T (A^T A v_j) \\
&= \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} {v_i}^T (\lambda_j v_j) \qquad (v_j \text{ on matriisin } A^T A \text{ ominaisvektori eli } (A^T A) v_j = \lambda_j v_j) \\
&= \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} {v_i}^T ({\sigma_j}^2 v_j) \\
&= \frac{\sigma_j}{\sigma_i} {v_i}^T v_j \\
&= \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases},
\end{aligned}$$

sillä ortogonaalisen matriisin V_1 sarakevektorit $v_1, \ldots, v_r$ ovat ortonormaaleja. Siispä myös matriisin U_1 sarakevektorit $u_1, \ldots, u_r$ ovat ortonormaaleja.

Lausekkeesta (7) nähdään sarakeavaruuden määritelmän mukaan, että ortonormaalit vektorit $u_1, \ldots, u_r$ kuuluvat matriisin A sarakeavaruuteen $\mathrm{Col}\,(A)$. Tämän sarakeavaruuden dimensio on r, jolloin $\{u_1, \ldots, u_r\}$ muodostaa avaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$ ortonormaalin kannan. Avaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$ ortogonaalikomplementin $\mathrm{Col}\,(A)^\perp$ dimensio on Lauseen 2.5 mukaan $m-r$. Olkoon siis $\{u_{r+1}, \dots, u_m\}$ avaruuden $\text{Col}\,(A)^\perp$ ortonormaali kanta. Määritellään

$$U_2 = \begin{pmatrix} u_{r+1} & \cdots & u_m \end{pmatrix},$$

ja

$$U = \begin{pmatrix} U_1 & U_2 \end{pmatrix}.$$

Edelleen Lauseen 2.5 mukaan $\{u_1, \dots, u_r, u_{r+1}, \dots, u_m\}$ muodostaa avaruuden $\mathbb{R}^m$ ortonormaalin kannan. Tällöin matriisi U on ortogonaalinen.

Meidän täytyy vielä näyttää, että todella

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

Tätä varten tarvitsemme aputuloksen, jonka mukaan

$$A = AV_1{V_1}^T.$$

Näytetään tämä seuraavaksi. Nyt matriisin V_2 sarakevektorit $v_{r+1}, \dots, v_n$ ovat ominaisarvoa $\lambda = 0$ vastaavia ominaisvektoreita, jolloin

$$A^T A v_j = 0 \qquad j = r+1, \dots, n.$$

Tästä nähdään, että vektorit $v_{r+1}, \dots, v_n$ kuuluvat ytimeen $N(A^T A)$. Toisaalta Lemman 3.9 nojalla $N(A^T A) = N(A)$, jolloin samat vektorit kuuluvat myös ytimeen $N(A)$. Tällöin

$$AV_2 = 0.$$

Lisäksi matriisi V on ortogonaalinen, joten

$$I = VV^T = V_1{V_1}^T + V_2{V_2}^T.$$

Tällöin saadaan haluamamme aputulos

$$\begin{aligned} A &= AI \\ &= A(V_1{V_1}^T + V_2{V_2}^T) \\ &= AV_1{V_1}^T + AV_2{V_2}^T \\ &= AV_1{V_1}^T + 0{V_2}^T \\ &= AV_1{V_1}^T. \end{aligned} \tag{9}$$

Tämän jälkeen yhdistämällä kohdat (8) ja (9) saadaan

$$\begin{aligned} U\Sigma V^T &= \begin{pmatrix} U_1 & U_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {V_1}^T \\ {V_2}^T \end{pmatrix} \\ &= U_1 \Sigma_1 {V_1}^T \\ &= AV_1{V_1}^T \\ &= A. \end{aligned}$$

Tällöin

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

Näytetään vielä lopuksi, että matriisin U sarakevektorit u_i ovat matriisin AA^T ominaisvektoreita. Käyttämällä tietoa, että matriisi V on ortogonaalinen eli $V^T V = I$ ja matriisille A todistamaamme hajotelmaa $A = U\Sigma V^T$ saadaan

$$\begin{aligned} AA^T &= U\Sigma V^T \left(U\Sigma V^T\right)^T \\ &= U\Sigma V^T \left((V^T)^T \Sigma^T U^T\right) \\ &= U\Sigma V^T (V\Sigma^T U^T) \\ &= U\Sigma I \Sigma^T U^T \\ &= U\Sigma\Sigma^T U^T. \end{aligned} \tag{10}$$

Tässä matriisi $\Sigma\Sigma^T$ on edelleen diagonaalimatriisi, jonka diagonaalialkiot ovat $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m$. Tällöin matriisi U diagonalisoi matriisin AA^T ortogonaalisesti. Yllä oleva yhtälö $AA^T = U\Sigma\Sigma^T U^T$ voidaan kirjoittaa myös muodossa

$$AA^T U = U\Sigma\Sigma^T,$$

josta saadaan

$$(AA^T)u_i = \beta_i u_i \qquad i = 1, \ldots, m.$$

Nyt nähdään, että matriisin $\Sigma\Sigma^T$ diagonaalialkiot $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m$ ovat matriisin AA^T ominaisarvoja ja vektorit u_i ovat matriisin AA^T ominaisvektoreita. □

Muodostetaan seuraavaksi esimerkkinä singulaariarvohajotelma sopivan yksinkertaiselle matriisille, jotta hajotelman idea on helpompi hahmottaa. Seuraava esimerkki on lainattu teoksen [3] sivulta 616.

Esimerkki 1. Muodosta singulaariarvohajotelma matriisille $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Tarvitsemme aluksi matriisin $A^T A$ ominaisarvot. Laskemalla saadaan matriisiksi

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matriisin $A^T A$ karakteristinen polynomi on

$$\det(A^T A - \lambda I) = -\lambda^3 + 3\lambda^2 - 2\lambda,$$

jolloin tämän polynomin juuret eli matriisin A^TA ominaisarvot ovat $\lambda_1 = 2$, $\lambda_2 = 1$ ja $\lambda_3 = 0$. Näitä ominaisarvoja vastaavien ominaisvektorien selvittäminen on melko mekaanista, mutta työlästä. Tämän vuoksi sivuutetaan näiden laskeminen tässä yhteydessä ja todetaan, että ominaisarvoja vastaavat ominaisvektorit ovat

$$w_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad w_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{ja} \quad w_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Näistä ominaisvektoreista huomataan, että $(w_1 \mid w_2) = 0$, $(w_1 \mid w_3) = 0$ ja $(w_2 \mid w_3) = 0$. Siispä ne ovat ortogonaalisia. Matriisin V muodostamista varten nämä ominaisvektorit täytyy vielä normeerata. Saadaan siis ortonormaalit vektorit

$$v_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{ja} \quad v_3 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Matriisin A singulaariarvot saadaan matriisin A^TA ominaisarvojen neliöjuurina $\sigma_1 = \sqrt{2}$, $\sigma_2 = \sqrt{1} = 1$ ja $\sigma_3 = \sqrt{0} = 0$. Matriisin Σ muodostamisessa on tärkeää huomata, että hajotelman mukaan vain positiiviset singulaariarvot otetaan mukaan. Siispä singulaariarvoa $\sigma_3 = 0$ ei oteta mukaan matriisiin Σ. Nyt voimme muodostaa matriisit V ja Σ. Saadaan

$$V = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{ja} \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Meidän täytyy vielä muodostaa matriisi U. Lasketaan matriisin U sarakevektorit yhtälön (7) avulla. Saadaan

$$u_1 = \frac{1}{\sigma_1} A v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ja

$$u_2 = \frac{1}{\sigma_2} A v_2 = \frac{1}{1} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Tässä on hyvä huomata, että sarakevektoria u_3 ei voida laskea, sillä $\sigma_3 = 0$. Tämä ei kuitenkaan ole tarpeenkaan, sillä vektorit u_1 ja u_2 ovat valmiiksi ortonormaaleja ja muodostavat avaruuden $\mathbb{R}^2$ ortonormaalin kannan. Tällöin matriisiksi U saadaan

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matriisin A singulaariarvohajotelma on siis

$$A = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}.$$

Halutessaan voi laskemalla varmistaa, että näin todella on.

Tarkastellaan vielä singulaariarvohajotelman muodostamista ja toimintaa. Lauseessa 4.2 esiintyvät ortonormaalit kannat $\{v_1, \dots, v_r\}$, $\{v_{r+1}, \dots, v_n\}$, $\{u_1, \dots, u_r\}$ ja $\{u_{r+1}, \dots, u_m\}$ ovat merkittävässä roolissa singulaariarvohajotelman muodostamisessa. Nämä neljä kantaa ovat aiemmin kappaleessa 2 mainittujen neljän aliavaruuden $\mathrm{Row}\,(A)$, $N(A)$, $\mathrm{Col}\,(A)$ ja $N(A^T)$ ortonormaaleja kantoja. Todistetaan tämä seuraavassa lauseessa.

Lause 4.3. *Olkoon A $m \times n$ matriisi ja $A = U\Sigma V^T$ matriisin A singulaariarvohajotelma, missä matriisit*

$$V = \begin{pmatrix} v_1 & \cdots & v_r & v_{r+1} & \cdots & v_n \end{pmatrix}$$

ja

$$U = \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_r & u_{r+1} & \cdots & u_m \end{pmatrix}.$$

ovat ortogonaalisia. Lisäksi olkoon $\sigma_1, \dots, \sigma_r$ matriisin A nollasta poikkeavat singulaariarvot. Tällöin

(i) matriisin A aste on r,

(ii) $\{v_1, \dots, v_r\}$ on aliavaruuden $\mathrm{Row}\,(A)$ ortonormaali kanta,

(iii) $\{v_{r+1}, \dots, v_n\}$ on aliavaruuden $N(A)$ ortonormaali kanta,

(iv) $\{u_1, \dots, u_r\}$ on aliavaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$ ortonormaali kanta,

(v) $\{u_{r+1}, \dots, u_m\}$ on aliavaruuden $N(A^T)$ ortonormaali kanta.

Todistus. Lauseen todistuksessa on käytetty apuna kirjan [3] Lauseen 5.17 todistusta.

(i) Koska matriisit U ja V^T ovat ortogonaalisina kääntyviä, niin Lemman 3.7 nojalla

$$\begin{aligned} \mathrm{rank}\,(A) &= \mathrm{rank}\,(U\Sigma V^T) \\ &= \mathrm{rank}\,(\Sigma V^T) \\ &= \mathrm{rank}\,(\Sigma) \\ &= r. \end{aligned}$$

(iii) Todistetaan tämä kohta ensin, sillä kohta (ii) seuraa tästä. Tiedämme Lauseen 4.2 todistuksesta, että vektorit $v_{r+1}, \ldots, v_n$ kuuluvat matriisin A ytimeen $N(A)$. Nämä vektorit ovat ortogonaalisen matriisin V sarakevektoreina ortonormaaleja ja niitä on $n-r$ kappaletta. Lisäksi dimensiolauseen 2.2 nojalla $\dim N(A) = n - r$, jolloin $\{v_{r+1}, \ldots, v_n\}$ muodostaa aliavaruuden $N(A)$ ortonormaalin kannan.

(ii) Tiedämme, että vektorit $\{v_1, \ldots, v_r, v_{r+1}, \ldots, v_n\}$ muodostavat avaruuden $\mathbb{R}^n$ ortonormaalin kannan. Tästä seuraa, että jokainen vektoreista $v_1, \ldots, v_r$ on kohtisuorassa jokaisen vektorin $v_{r+1}, \ldots, v_n \in N(A)$ kanssa. Tällöin sisätulon lineaarisuuden nojalla vektorit $v_1, \ldots, v_r$ ovat kohtisuorassa kaikkien vektoreista $v_{r+1}, \ldots, v_n$ muodostettujen lineaarikombinaatioiden kanssa. Nyt kuitenkin kohdan (iii) nojalla vektorit $v_{r+1}, \ldots, v_n$ muodostavat aliavaruuden $N(A)$ ortonormaalin kannan, jolloin vektorit $v_1, \ldots, v_r$ ovat kohtisuorassa kaikkien aliavaruuden $N(A)$ vektoreiden kanssa. Lisäksi Lauseen 2.4 nojalla $N(A)^{\perp} = \mathrm{Row}\,(A)$, joten vektorit $v_1, \ldots, v_r \in \mathrm{Row}\,(A)$. Tällöin Lauseen 2.5 mukaan

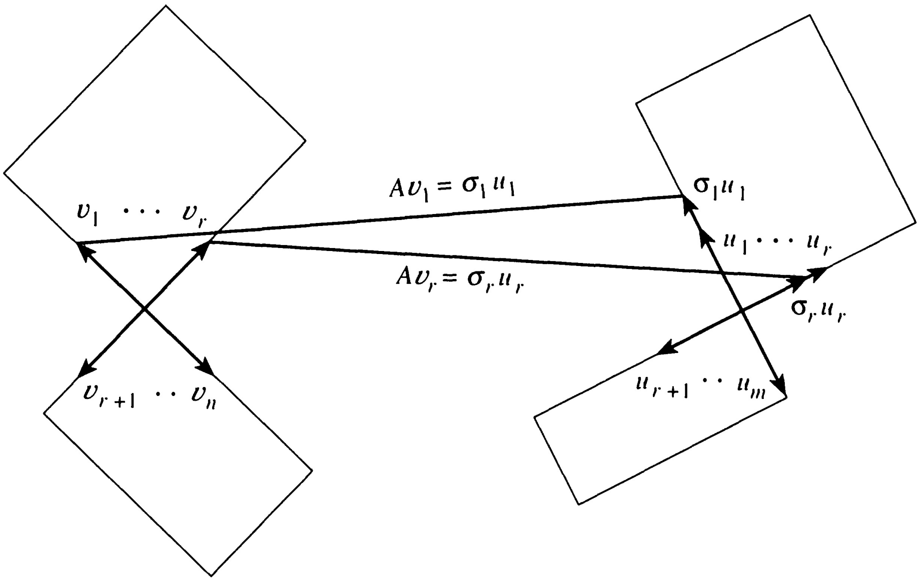
$$\begin{aligned}\dim \mathrm{Row}\,(A) &= \dim \mathbb{R}^n - \dim N(A) \\ &= n - (n - r) \\ &= r.\end{aligned}$$

Nyt vektorit $v_1, \ldots, v_r \in \mathrm{Row}\,(A)$ ovat ortonormaaleja eli ne ovat lineaarisesti riippumattomia. Lisäksi niitä on r kappaletta, jolloin ne muodostavat avaruuden $\mathrm{Row}\,(A)$ ortonormaalin kannan.

(iv) Tämä kohta on todistettu Lauseen 4.2 todistuksen yhteydessä.

(v) Lauseen 4.2 todistuksessa määrittelimme, että $\{u_{r+1}, \ldots, u_m\}$ on aliavaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$ ortogonaalikomplementin ortonormaali kanta. Nyt kuitenkin Lauseen 2.4 nojalla $\mathrm{Col}\,(A)^{\perp} = N(A^T)$. Siispä $\{u_{r+1}, \ldots, u_m\}$ on aliavaruuden $N(A^T)$ ortonormaali kanta. □

Artikkelista [4] lainatusta Kuvasta 2 nähdään kuinka riviavaruuden kantavektoreille $v_1, \ldots, v_r$ ja sarakeavaruuden kantavektoreille $u_1, \ldots, u_r$ on voimassa yhtälö $Av_i = \sigma_i u_i$.



Kuva 2: Neljään aliavaruuteen liittyvät ortonormaalit kannat.

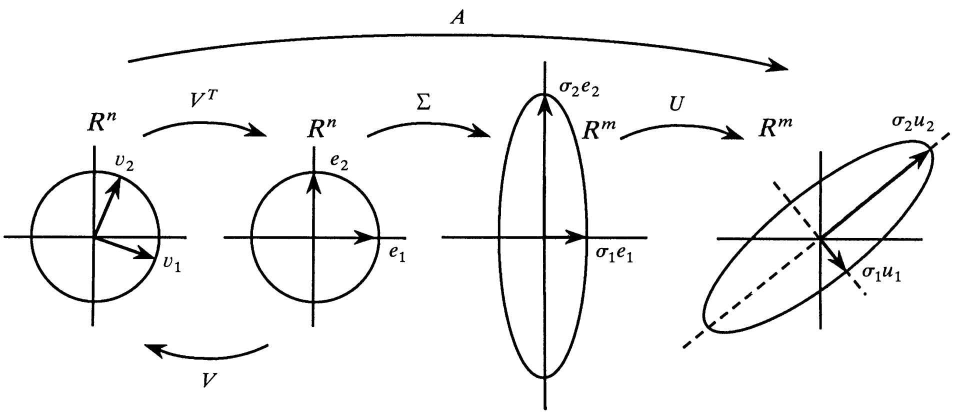
Tarkastellaan seuraavaksi singulaariarvohajotelman toimintaa yleisesti. Mitä kukin matriiseista V, Σ ja U tekevät? Alkuperäisestä matriisista A muodostetaan hajotelma $U\Sigma V^T$, jossa

(1) U on ortogonaalinen $m \times m$ matriisi, jonka sarakkeet $u_1, \ldots, u_r, \ldots, u_m$ ovat aliavaruuksien Col (A) ja $N(A^T)$ kantavektoreita.

(2) Σ on $m \times n$ diagonaalimatriisi, jonka nollasta poikkeavat diagonaalialkiot ovat matriisin A singulaariarvot $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0$.

(3) V on ortogonaalinen $n \times n$ matriisi, jonka sarakkeet $v_1, \ldots, v_r, \ldots, v_n$ ovat aliavaruuksien Row (A) ja $N(A)$ kantavektoreita.

Tarkastellaan artikkelista [4] lainattua Kuvaa 3. Kuvan merkintöjä on hieman muutettu tätä tutkielmaa varten. Kuvan tapauksessa $n = m = 2$. Matriisi V on ortogonaalinen, jolloin myös matriisi V^T on ortogonaalinen. Kuten jo 1. kappaleessa mainittiin, niin ortogonaalinen matriisi ei muuta vektoreiden pituuksia tai niiden välisiä kulmia. Matriisi V^T toimii tällöin kannanvaihtomatriisina, joka muuntaa kantavektorit v_1 ja v_2 standardikannan kantavektoreiksi e_1 ja e_2. Matriisi Σ kuvaa avaruuden $\mathbb{R}^2$ kantavektorit e_1 ja e_2 avaruuden $\mathbb{R}^2$ vektoreiksi $\sigma_1 e_1$ ja $\sigma_2 e_2$. Tässä vaiheessa vektoreiden pituus voi muuttua, kun niitä kerrotaan singulaariarvoilla σ_1 ja σ_2. Tämän jälkeen ortogonaalinen matriisi U tekee uuden kannanvaihdon, jossa kantavektoreista $\sigma_1 e_1$ ja $\sigma_2 e_2$ tulee uuden kannan kantavektorit $\sigma_1 u_1$ ja $\sigma_2 u_2$.



Kuva 3: Matriisin A toiminta singulaariarvohajotelman avulla.

5 Pseudoinverssi

Tämän kappaleen laatimisessa on käytetty apuna kirjan [2] kappaletta 7.7. Yksi matriisin singulaariarvohajotelman sovelluksista on yhtälöryhmän $Ax = b$ ratkaiseminen. Yhtälöryhmän $Ax = b$ ratkaiseminen voi olla haastavaa, sillä matriisi A ei välttämättä ole aina kääntyvä tai edes neliömatriisi. Lisäksi ratkaisua ei ole olemassa lainkaan, mikäli vektori b ei kuulu matriisin A sarakeavaruuteen. Mikäli ratkaisu on olemassa, niin yhtälöryhmä $Ax = b$ voidaan ratkaista käyttäen käänteismatriisin yleistystä, jota kutsutaan pseudoinverssiksi. Pseudoinverssi voidaan määritellä singulaariarvohajotelman avulla. Määritellään tässä kappaleessa matriisin pseudoinverssi ja palataan yhtälöryhmän $Ax = b$ tarkasteluun pseudoinverssin avulla seuraavassa kappaleessa.

Mikäli A on kääntyvä $n \times n$ matriisi, jolla on singulaariarvohajotelma $U\Sigma V^T$, niin tässä tapauksessa Σ on $n \times n$ matriisi. Lisäksi matriisilla Σ on Lemman 3.7 nojalla sama aste kuin matriisilla A. Matriisi A on kääntyvä, jolloin sen aste on n, ja tällöin myös matriisin Σ aste on n ja se on kääntyvä. Lisäksi matriisit U ja V ovat ortogonaalisia, joten matriisin A käänteismatriisi singulaariarvohajotelman mukaan on

$$\begin{aligned} A^{-1} &= (U\Sigma V^T)^{-1} \\ &= (V^T)^{-1}\Sigma^{-1}U^{-1} \\ &= V\Sigma^{-1}U^T. \end{aligned}$$

Tapauksessa, jossa A ei ole kääntyvä tai edes neliömatriisi, voimme määritellä käänteismatriisin yleistyksen eli pseudoinverssin.

Määritelmä 5.1. Olkoon A $m \times n$ matriisi, jonka aste on r. Lisäksi olkoon matriisilla A singulaariarvohajotelma $U\Sigma V^T$, jossa $m \times n$ matriisi Σ on Lauseen 4.2 mukaan muotoa

$$\Sigma = \left(\begin{array}{c|c} \begin{matrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_r \end{matrix} & 0_{r\times(n-r)} \\ \hline 0_{(m-r)\times r} & 0_{(m-r)\times(n-r)} \end{array}\right).$$

Tällöin matriisin A *pseudoinverssi* A^+ on

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

missä $n \times m$ diagonaalimatriisi Σ^+ on muotoa

$$\Sigma^+ = \left(\begin{array}{ccc|c} \frac{1}{\sigma_1} & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{r\times(m-r)} \\ 0 & \cdots & \frac{1}{\sigma_r} & \\ \hline & & & \\ & 0_{(n-r)\times r} & & 0_{(n-r)\times(m-r)} \\ & & & \end{array}\right).$$

Matriisin Σ^+ nollasta poikkeaviksi alkioiksi tulee matriisin A singulaariarvojen käänteisluvut ja matriisista Σ^+ tulee $n \times m$ matriisi, toisin kuin matriisi Σ, joka on $m \times n$ matriisi. Matriisit lohkoittain kertomalla huomataan, että

$$\Sigma\Sigma^+ = \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{r\times(m-r)} \\ 0 & \cdots & 1 & \\ \hline & & & \\ & 0_{(m-r)\times r} & & 0_{(m-r)\times(m-r)} \\ & & & \end{array}\right)$$

on $m \times m$ neliömatriisi, jossa vasemman yläkulman lohkona on $r \times r$ identtinen matriisi. Toisaalta

$$\Sigma^+\Sigma = \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{r\times(n-r)} \\ 0 & \cdots & 1 & \\ \hline & & & \\ & 0_{(n-r)\times r} & & 0_{(n-r)\times(n-r)} \\ & & & \end{array}\right)$$

on $n \times n$ neliömatriisi, jonka vasemman yläkulman lohkona on $r \times r$ identtinen matriisi. Edelleen matriisit lohkoittain kertomalla huomataan, että

$$\Sigma\Sigma^+\Sigma = \Sigma \quad \text{ja} \quad \Sigma^+\Sigma\Sigma^+ = \Sigma^+. \tag{11}$$

Lisäksi matriisien muodoista nähdään, että tulomatriisit $\Sigma\Sigma^+$ ja $\Sigma^+\Sigma$ ovat symmetrisiä. On siis voimassa yhtälöt

$$(\Sigma\Sigma^+)^T = \Sigma\Sigma^+ \quad \text{ja} \quad (\Sigma^+\Sigma)^T = \Sigma^+\Sigma. \tag{12}$$

Pseudoinverssi voidaan määritellä myös algebrallisesti käyttäen niin sanottuja Penrosen ehtoja.

Lause 5.2. *Olkoon A $m \times n$ matriisi. Tällöin on olemassa yksikäsitteinen $n \times m$ matriisi B, joka toteuttaa Penrosen ehdot*

(i) $ABA = A$,

(ii) $BAB = B$,

(iii) $(AB)^T = AB$,

(iv) $(BA)^T = BA$.

Lisäksi matriisi B on muotoa $B = A^+$.

Todistus. Tiedämme Lauseen 4.2 nojalla, että matriisille A on olemassa singulaariarvohajotelma $U\Sigma V^T$. Todistetaan, että lause pätee kun matriisi B on aiemmin määritelty matriisin A pseudoinverssi A^+. Olkoon siis $B = A^+ = V\Sigma^+U^T$. Huomataan, että yhtälöiden (11) ja (12) mukaan matriisit Σ ja Σ^+ toteuttavat Penrosen ehdot. Tätä tietoa apuna käyttäen voimme osoittaa, että myös matriisit A ja $B = A^+$ toteuttavat nämä ehdot. Todistetaan aluksi Penrosen ehdot ja sen jälkeen matriisin $B = A^+$ yksikäsitteisyys.

(i) Yhtälön (11) ja transpoosin laskusääntöjen avulla saadaan

$$\begin{aligned} ABA &= A(V\Sigma^+U^T)A \\ &= U\Sigma V^T(V\Sigma^+U^T)U\Sigma V^T \\ &= U\Sigma\Sigma^+\Sigma V^T \\ &= U\Sigma V^T \\ &= A. \end{aligned}$$

(ii) Yhtälön (11) ja transpoosin laskusääntöjen avulla saadaan

$$\begin{aligned} BAB &= V\Sigma^+U^T(U\Sigma V^T)V\Sigma^+U^T \\ &= V\Sigma^+\Sigma\Sigma^+U^T \\ &= V\Sigma^+U^T \\ &= B. \end{aligned}$$

(iii) Yhtälön (12) ja transpoosin laskusääntöjen avulla saadaan

$$\begin{aligned} (AB)^T &= \left((U\Sigma V^T)(V\Sigma^+U^T)\right)^T \\ &= \left(U(\Sigma\Sigma^+)U^T\right)^T \\ &= U(\Sigma\Sigma^+)^T U^T \\ &= U\Sigma\Sigma^+U^T \\ &= U\Sigma V^T V\Sigma^+U^T \\ &= AB. \end{aligned}$$

(iv) Yhtälön (12) ja transpoosin laskusääntöjen avulla saadaan

$$
\begin{aligned}
(BA)^T &= \Big((V\Sigma^+U^T)(U\Sigma V^T)\Big)^T \\
&= \Big(V(\Sigma^+\Sigma)V^T\Big)^T \\
&= V(\Sigma^+\Sigma)^T V^T \\
&= V\Sigma^+\Sigma V^T \\
&= V\Sigma^+U^T U\Sigma V^T \\
&= BA.
\end{aligned}
$$

Todistetaan vielä lopuksi matriisin B yksikäsitteisyys. Todistuksessa on käytetty apuna kirjan [2] kappaleessa 7.7 sivulla 471 olevaa todistusta. Olkoon matriisin B lisäksi myös matriisi C, joka täyttää Penrosen ehdot. Tällöin Penrosen ehtojen ja transpoosin laskusääntöjen avulla saadaan

$$
\begin{aligned}
B &\overset{(ii)}{=} BAB & C &\overset{(ii)}{=} CAC \\
&\overset{(iv)}{=} (BA)^T B & &\overset{(iii)}{=} C(AC)^T \\
&= A^T B^T B & &= CC^T A^T \\
&\overset{(i)}{=} (ACA)^T B^T B & &\overset{(i)}{=} CC^T (ABA)^T \\
&= A^T C^T A^T B^T B & &= CC^T A^T B^T A^T \\
&= (CA)^T (BA)^T B & &= C(AC)^T (AB)^T \\
&\overset{(iv)}{=} CABAB & &\overset{(iii)}{=} CACAB \\
&\overset{(i)}{=} CAB & &\overset{(i)}{=} CAB.
\end{aligned}
$$

Siispä $B = C$ eli matriisi $B = A^+$ on yksikäsitteinen. □

Tarkastellaan vielä matriisin pseudoinverssin A^+ toimintaa Kuvan 4 avulla. Kuva on lainattu artikkelista [4], mutta sen merkintöjä on hieman muutettu tähän tutkielmaan sopiviksi. Molempien aliavaruuksien $\mathrm{Col}\,(A)$ ja $\mathrm{Row}\,(A)$ dimensio on r, ja näiden aliavaruuksien välillä matriisi A on aina kääntyvä. Tiedämme Lauseen 4.2 todistuksesta, että

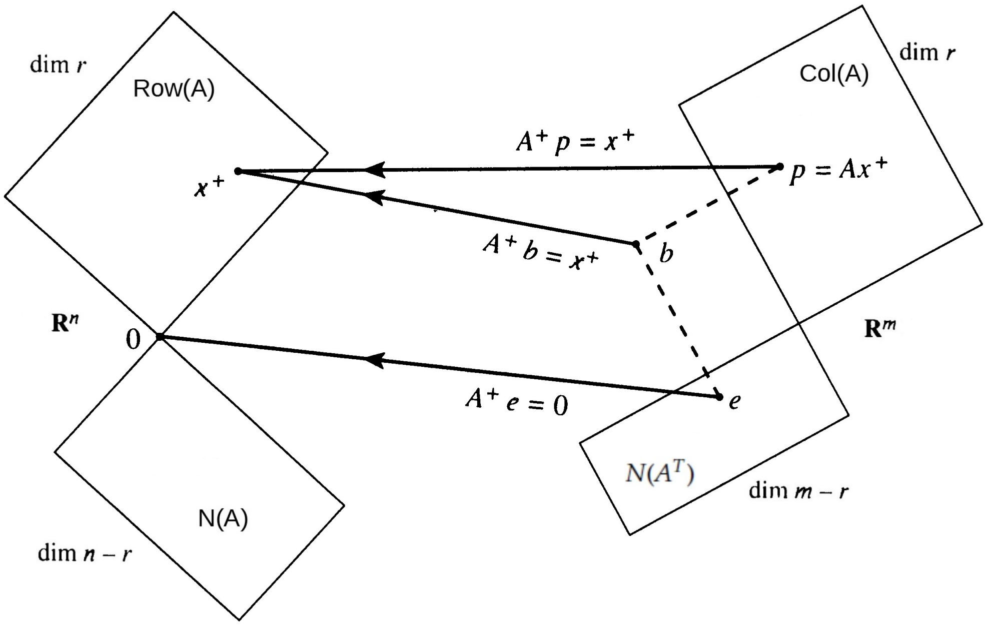
$$
Av_j = \sigma_j u_j, \qquad j = 1, \dots, r.
$$

Tässä $\{v_1, \dots, v_r\}$ on aliavaruuden $\mathrm{Row}\,(A)$ kanta. Lisäksi $\{u_1, \dots, u_r\}$ on aliavaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$ kanta, jolloin myös $\{\sigma_1 u_1, \dots, \sigma_r u_r\}$ on aliavaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$ kanta. Tällöin matriisi A vie aliavaruuden $\mathrm{Row}\,(A)$ kannan aliavaruuden $\mathrm{Col}\,(A)$ kannaksi eli se on kääntyvä näiden kahden aliavaruuden välillä. Nyt vektorit $u_1, \dots, u_m$ ovat ortonormaaleja, jolloin kaikilla $j = 1, \dots, r$

pseudoinverssille $A^+ = V\Sigma^+ U^T$ pätee

$$
\begin{aligned}
A^+ u_j &= V\Sigma^+ U^T u_j, \qquad j = 1, \ldots, r \\
&= \begin{pmatrix} v_1 & \cdots & v_n \end{pmatrix} \left(\begin{array}{ccc|c} \frac{1}{\sigma_1} & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{r\times(m-r)} \\ 0 & \cdots & \frac{1}{\sigma_r} & \\ \hline & & & \\ & 0_{(n-r)\times r} & & 0_{(n-r)\times(m-r)} \\ & & & \end{array}\right) \begin{pmatrix} {u_1}^T \\ \vdots \\ {u_m}^T \end{pmatrix} u_j \\
&= \begin{pmatrix} v_1 & \cdots & v_n \end{pmatrix} \left(\begin{array}{ccc|c} \frac{1}{\sigma_1} & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{r\times(m-r)} \\ 0 & \cdots & \frac{1}{\sigma_r} & \\ \hline & & & \\ & 0_{(n-r)\times r} & & 0_{(n-r)\times(m-r)} \\ & & & \end{array}\right) \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}}_{\text{1 on rivillä } j} \\
&= \begin{pmatrix} v_1 & \cdots & v_n \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{1}{\sigma_j} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}}_{\frac{1}{\sigma_j} \text{ on rivillä } j} \\
&= \frac{1}{\sigma_j} v_j, \qquad j = 1, \ldots, r.
\end{aligned}
$$

Tästä huomataan, että tässä rajoitetussa tilanteessa pseudoinverssi A^+ toimii matriisin A käänteismatriisina, ja vie sarakeavaruuden vektorit takaisin riviavaruuteen. Lisäksi pseudoinverssi A^+ vie aliavaruuden $N(A^T)$ vektorit nollavektoreiksi. Mikäli A on $n \times n$ matriisi ja $\operatorname{rank}(A) = n$, niin A on kääntyvä. Tällöin $\dim N(A) = \dim N(A^T) = 0$ ja pseudoinverssi A^+ yhtyy käänteismatriisin A^{-1} kanssa.



Kuva 4: Pseudoinverssin A^+ toiminta.

6 Pienimmän neliösumman ratkaisu

Mikäli yhtälöryhmällä $Ax = b$ ei ole ratkaisua eli vektori b ei kuulu matriisin A sarakeavaruuteen, niin voimme etsiä vektoria $\tilde{x}$, jolle $A\tilde{x}$ on lähimpänä vektoria b. Etsimme siis vektoria $\tilde{x}$, jolle etäisyys

$$||b - A\tilde{x}||$$

on pienin mahdollinen. Yhtäpitävästi voimme etsiä vektoria $\tilde{x}$, joka minimoi lausekkeen

$$||b - A\tilde{x}||^2.$$

Tällöin vektoria $\tilde{x}$ kutsutaan *pienimmän neliösumman ratkaisuksi*. Mikäli yhtälöryhmällä $Ax = b$ on ratkaisu, niin pienimmän neliösumman ratkaisulle $\tilde{x}$ pätee

$$||b - A\tilde{x}||^2 = 0.$$

Siispä etsimällä pienimmän neliösumman ratkaisua löydämme myös yhtälöryhmän $Ax = b$ ratkaisun, mikäli se on olemassa. Tällöin voimme keskittyä ainoastaan pienimmän neliösumman ratkaisun löytämiseen. Vaikka itse yhtälöryhmän ratkaisua ei olisikaan olemassa, niin usein olemme kiinnostuneita löytämään pienimmän neliösumman ratkaisun. Pienimmän neliösumman ratkaisemisella on merkittäviä sovelluksia esimerkiksi fysiikassa ja tilastotieteessä. Suoran sovittaminen pistejoukkoon on yksi näistä sovelluksista. Pienimmän neliösumman ratkaisun sovelluksista löytyy esimerkkejä kirjan [2] kappaleesta 5.3.

Pienimmän neliösumman ratkaisun löytäminen onnistuu matriisin pseudoinverssin avulla. Päästäksemme itse pienimmän neliösumman ratkaisun löytämiseen tarvitsemme kuitenkin aluksi suoran summan määritelmän ja tähän liittyvän apulauseen.

Määritelmä 6.1. Olkoon U ja V avaruuden $\mathbb{R}^n$ aliavaruuksia. Sanotaan, että avaruus $\mathbb{R}^n$ on avaruuksien U ja V *suora summa*, mikäli jokainen vektori $w \in \mathbb{R}^n$ voidaan kirjoittaa yksikäsitteisesti summana

$$w = u + v,$$

missä $u \in U$ ja $v \in V$. Tällöin merkitään $\mathbb{R}^n = U \oplus V$.

Lemma 6.2. *Olkoon S avaruuden $\mathbb{R}^n$ aliavaruus. Tällöin on*

$$\mathbb{R}^n = S \oplus S^\perp.$$

Todistus. Lauseen todistuksessa on käytetty apuna kirjan [2] Lauseen 5.2.3 todistusta. Mikäli $S = \{0\}$ tai $S = \mathbb{R}^n$, niin tapaus on selvä. Olkoon nyt

$\dim S = r$, missä $0 < r < n$. Tällöin Lauseen 2.5 nojalla jokainen vektori $x \in \mathbb{R}^n$ voidaan kirjoittaa muodossa

$$x = c_1x_1 + \cdots + c_rx_r + c_{r+1}x_{r+1} + \cdots + c_nx_n,$$

missä $c_i \in \mathbb{R}$, $\{x_1, \dots, x_r\}$ on avaruuden S ortonormaali kanta ja $\{x_{r+1}, \dots, x_n\}$ on avaruuden $S^\perp$ ortonormaali kanta. Tällöin voidaan merkitä

$$u = c_1x_1 + \cdots + c_rx_r \qquad \text{ja} \qquad v = c_{r+1}x_{r+1} + \cdots + c_nx_n,$$

jolloin $u \in S$, $v \in S^\perp$ ja $x = u + v$. Täytyy vielä osoittaa, että tämä summa esitys on yksikäsitteinen. Oletetaan, että vektori x voidaan kirjoittaa myös summana $y + z$, missä $y \in S$ ja $z \in S^\perp$. Tällöin

$$u + v = x = y + z,$$

josta saadaan

$$u - y = z - v.$$

Nyt $u - y \in S$ ja $z - v \in S^\perp$, joten kumpikin kuuluu leikkaukseen $S \cap S^\perp$. Kuitenkin $S \cap S^\perp = \{0\}$ jos nimittäin $a \in S \cap S^\perp$, niin $(a \mid a) = 0$ eli $a = 0$. Täytyy siis olla

$$u - y = 0 \qquad \text{ja} \qquad z - v = 0.$$

Tällöin siis

$$u = y \qquad \text{ja} \qquad v = z.$$

□

Mikäli vektori $\tilde{x}$ on yhtälöryhmän $Ax = b$ pienimmän neliösumman ratkaisu ja $p = A\tilde{x}$, niin p on matriisin A sarakeavaruuden vektori, joka on lähimpänä vektoria b. Seuraavan lauseen mukaan tällainen lähimpänä oleva vektori on aina olemassa ja lisäksi se on yksikäsitteinen.

Lause 6.3. *Olkoon S avaruuden $\mathbb{R}^m$ aliavaruus. Jokaiselle vektorille $b \in \mathbb{R}^m$ on olemassa yksikäsitteinen vektori $p \in S$, joka on lähinnä vektoria b eli pätee*

$$||b - y|| > ||b - p||,$$

kaikille $y \in S$, $y \neq p$. Lisäksi vektori $p \in S$ on lähinnä vektoria $b \in \mathbb{R}^m$, jos ja vain jos $b - p \in S^\perp$.

Todistus. Lauseen todistuksessa on käytetty apuna kirjan [2] Lauseen 5.3.1 todistusta. Lemman 6.2 mukaan $\mathbb{R}^m = S \oplus S^\perp$, jolloin jokainen vektori $b \in \mathbb{R}^m$ voidaan kirjoittaa yksikäsitteisesti summana

$$b = p + z,$$

missä $p \in S$ ja $z \in S^{\perp}$. Tällöin mikäli vektori $y \in S$ ja $y \neq p$, niin

$$||b - y||^2 = ||(b - p) + (p - y)||^2.$$

Nyt vektorit $p - y \in S$ ja $b - p = z \in S^{\perp}$ ovat toisiaan vastaan kohtisuorassa, jolloin Pythagoraan lauseen mukaan

$$||b - y||^2 = ||b - p||^2 + ||p - y||^2.$$

Tästä seuraa, että

$$||b - y|| > ||b - p||.$$

Tällöin vektorin b yksikäsitteisessä summaesityksessä $b = p+z$ oleva vektori $p \in S$ on aina olemassa ja se on lähinnä vektoria b, sillä pätee

$$||b - y|| > ||b - p||,$$

kaikille $y \in S$, $y \neq p$.

Osoitetaan vielä, että vektori $p \in S$ on lähinnä vektoria $b \in \mathbb{R}^m$, jos ja vain jos $b - p \in S^{\perp}$. Olkoot vektori $p \in S$ ja $b - p \in S^{\perp}$. Tällöin aikaisemman todistuksen nojalla vektori p on lähinnä vektoria b.

Olkoon vektori $p \in S$ lähinnä vektoria $b \in \mathbb{R}^n$. Täytyy osoittaa, että $b - p \in S^{\perp}$. Nyt Lemman 6.2 mukaan $\mathbb{R}^m = S \oplus S^{\perp}$, jolloin vektori $b \in \mathbb{R}^m$ voidaan kirjoittaa yksikäsitteisesti summana $b = u + v$, missä $u \in S$ ja $v \in S^{\perp}$. Tällöin vektoreille p ja u pätee

$$p = u + (p - u).$$

Tästä saadaan

$$||b - p|| = ||(b - u) + (u - p)||.$$

Vektorit $b - u \in S^{\perp}$ ja $u - p \in S$ ovat toisiaan vastaan kohtisuorassa, joten Pythagoraan lauseen mukaan

$$\begin{aligned} ||b - p||^2 &= ||b - u||^2 + ||u - p||^2 \\ &\geq ||b - u||^2. \end{aligned} \tag{13}$$

Toisaalta vektori $p \in S$ on oletuksen mukaan lähinnä vektoria $b \in \mathbb{R}^m$, joten pätee $||b - p|| \leq ||b - y||$ kaikilla $y \in S$. Tällöin erityisesti vektorille $u \in S$ pätee

$$||b - p|| \leq ||b - u||.$$

Tällöin myös normien neliöille pätee

$$||b - p||^2 \leq ||b - u||^2. \tag{14}$$

Siispä kohdat (13) ja (14) yhdistämällä saadaan

$$\begin{aligned}||b-u||^2 &\geq ||b-p||^2 \\ &= ||b-u||^2 + ||u-p||^2 \\ &\geq ||b-u||^2.\end{aligned}$$

Tällöin on oltava

$$||u-p||^2 = 0,$$

joten täytyy olla $u = p$ ja tällöin vektorille $b \in \mathbb{R}^m$ pätee

$$b = u + v = p + v.$$

Siispä saadaan

$$b - p = v \in S^{\perp}.$$

□

Seuraavan lauseen mukaan yhtälöryhmän $Ax = b$ pienimmän neliösumman ratkaisun löytäminen vastaa niin sanottujen normaaliyhtälöiden ratkaisemista. Tämän lauseen avulla pääsemme pienimmän neliösumman ratkaisun löytämiseen pseudoinverssin avulla.

Lause 6.4. *Olkoon $b \in \mathbb{R}^m$ ja A $m \times n$ matriisi. Tällöin $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ on yhtälöryhmän $Ax = b$ pienimmän neliösumman ratkaisu, jos ja vain jos $\tilde{x}$ toteuttaa normaaliyhtälöt*

$$A^T Ax = A^T b.$$

Todistus. Lauseen todistuksessa on käytetty apuna kirjan [2] kappaletta 5.3. Vektori $\tilde{x}$ on yhtälöryhmän $Ax = b$ pienimmän neliösumman ratkaisu, jos ja vain jos $p = A\tilde{x}$ on matriisin A sarakeavaruuden vektori, joka on lähimpänä vektoria b. Lisäksi Lauseen 6.3 mukaan vektori $p \in \mathrm{Col}\,(A)$ on lähimpänä vektoria $b \in \mathbb{R}^m$, jos ja vain jos vektori

$$b - p = b - A\tilde{x}$$

kuuluu matriisin A sarakeavaruuden ortogonaalikomplementtiin $\mathrm{Col}\,(A)^{\perp}$. Toisaalta Lauseen 2.4 nojalla tiedämme, että $\mathrm{Col}\,(A)^{\perp} = N(A^T)$. Siispä vektori $\tilde{x}$ on pienimmän neliösumman ratkaisu, jos ja vain jos

$$b - A\tilde{x} \in N(A^T).$$

Eli yhtäpitävästi, jos ja vain jos

$$A^T(b - A\tilde{x}) = 0.$$

Tästä seuraa, että vektori $\tilde{x}$ on pienimmän neliösumman ratkaisu, jos ja vain jos

$$A^T A\tilde{x} = A^T b.$$

□

Nyt pääsemme yhtälöryhmän $Ax = b$ pienimmän neliösumman ratkaisun löytämiseen matriisin A pseudoinverssin avulla. Osoitetaan kahden seuraavan lauseen avulla, että pienimmän neliösumman ratkaisu löydetään aina pseudoinverssin avulla. Keskitytään yleiseen $m \times n$ matriisiin A. Tällöin meillä on kaksi mahdollista tapausta riippuen matriiisin A asteesta. Käsitellään seuraavassa lauseessa ensin tapaus, jossa matriisin A aste on täysi eli $\operatorname{rank}(A) = n$. Tässä tapauksessa pienimmän neliösumman ratkaisu on aina olemassa ja lisäksi se on yksikäsitteinen.

Lause 6.5. *Olkoon $b \in \mathbb{R}^m$ ja A $m \times n$ matriisi, jonka aste on $r = n$. Lisäksi olkoon $U\Sigma V^T$ matriisin A singulaariarvohajotelma. Tällöin*

$$\tilde{x} = A^+ b = V\Sigma^+ U^T b$$

minimoi lausekkeen $||b - Ax||^2$ yli vektorien $x \in \mathbb{R}^n$. Lisäksi tämä minimoiva vektori $\tilde{x}$ on yksikäsitteinen.

Todistus. Lauseen todistuksessa on käytetty apuna kirjan [2] sivulta 472 löytyvää todistusta. Olkoon A on $m \times n$ matriisi, jonka aste on n. Tällöin $m \times n$ matriisi Σ ja $n \times m$ matriisi Σ^T ovat muotoa

$$\Sigma = \left(\begin{array}{ccc} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_n \\ \hline & 0_{(m-n)\times n} & \end{array}\right) \quad \text{ja} \quad \Sigma^T = \left(\begin{array}{ccc|c} \sigma_1 & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{n\times(m-n)} \\ 0 & \cdots & \sigma_n & \end{array}\right),$$

joissa $\sigma_j > 0$ kaikille $j \in \{1, \ldots, n\}$. Lisäksi Määritelmän 4 mukaan $n \times m$ matriisi Σ^+ on muotoa

$$\Sigma^+ = \left(\begin{array}{ccc|c} \frac{1}{\sigma_1} & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{n\times(m-n)} \\ 0 & \cdots & \frac{1}{\sigma_n} & \end{array}\right).$$

Nyt matriisit Σ^T ja Σ lohkoittain kertomalla huomataan, että

$$\Sigma^T\Sigma = \begin{pmatrix} {\sigma_1}^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & {\sigma_n}^2 \end{pmatrix}$$

Tästä muodosta nähdään, että matriisilla $\Sigma^T\Sigma$ on n kappaletta lineaarisesti riippumattomia sarakevektoreita eli sen aste on n. Tällöin se on $n \times n$ matriisina kääntyvä ja

$$(\Sigma^T\Sigma)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1{}^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \frac{1}{\sigma_n{}^2} \end{pmatrix}.$$

Tällöin matriisit lohkottain kertomalla huomataan, että

$$(\Sigma^T\Sigma)^{-1}\Sigma^T = \Sigma^+.$$

Lauseen 3.9 nojalla $n \times n$ matriisin A^TA aste on n, jolloin se on kääntyvä. Nyt singulaariarvohajotelmassa $A = U\Sigma V^T$ esiintyvä matriisi V on ortogonaalinen ja matriisit V, V^T ja $(\Sigma^T\Sigma)^{-1}$ ovat kaikki $n \times n$ matriiseja, jolloin käänteismatriisin laskusääntöjen nojalla saadaan

$$\begin{aligned} (A^TA)^{-1} &= \Big((V\Sigma^TU^T)(U\Sigma V^T)\Big)^{-1} \\ &= \Big(V(\Sigma^T\Sigma)V^T\Big)^{-1} \\ &= (V^T)^{-1}(\Sigma^T\Sigma)^{-1}V^{-1} \\ &= V(\Sigma^T\Sigma)^{-1}V^T. \end{aligned}$$

Olkoon $p = A\tilde{x} \in \operatorname{Col}(A)$ vektori, joka on lähimpänä vektoria b. Tämä vektori p on Lauseen 6.3 nojalla olemassa. Tällöin vektori $\tilde{x}$ on yhtälöryhmän $Ax = b$ pienimmän neliösumman ratkaisu ja se toteuttaa Lauseen 6.4 mukaan normaaliyhtälöt, jolloin siis

$$A^TA\tilde{x} = A^Tb.$$

Operoimalla puolittain matriisilla $(A^TA)^{-1}$ saadaan

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= (A^TA)^{-1}A^Tb \\ &= (V(\Sigma^T\Sigma)^{-1}V^T)(V\Sigma^TU^T)b \\ &= V(\Sigma^T\Sigma)^{-1}\Sigma^TU^Tb \\ &= V\Sigma^+U^Tb \\ &= A^+b. \end{aligned}$$

Nyt olemme osoittaneet, että vektori $\tilde{x} = A^+b$ minimoi lausekkeen $\|b - Ax\|^2$. Lisäksi nähdään, että vektori $\tilde{x} = A^+b$ on yksikäsitteinen. □

Toinen mahdollinen tapaus on se, että $m \times n$ matriisin A aste on $r < n$. Tällöin lausekkeen $\|b - Ax\|^2$ minimoivia pienimmän neliösumman ratkaisuja on äärettömän monta. Pseudoinverssi antaa tässä tapauksessa pienimmän neliösumman ratkaisun $\tilde{x}$, jonka normi $\|\tilde{x}\|$ on pienin mahdollinen. Näytetään tämä seuraavassa lauseessa.

Lause 6.6. *Olkoon $b \in \mathbb{R}^m$ ja A $m \times n$ matriisi, jonka aste on $r < n$. Lisäksi olkoon $U\Sigma V^T$ matriisin A singulaariarvohajotelma. Tällöin*

$$\tilde{x} = A^+ b = V\Sigma^+ U^T b$$

minimoi lausekkeen $||b - Ax||^2$ yli vektorien $x \in \mathbb{R}^n$. Lisäksi mikäli jokin muu vektori z minimoi lausekkeen $||b - Ax||^2$, niin tällöin $||z|| > ||\tilde{x}||$.

Todistus. Tämän lauseen todistamisessa on käytetty apuna kirjan [2] Lauseen 7.7.1 todistusta. Olkoon $x \in \mathbb{R}^n$ ja määritellään

$$c = U^T b = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \qquad \text{ja} \qquad y = V^T x = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix},$$

missä $c_1, y_1 \in \mathbb{R}^r$, $c_2 \in \mathbb{R}^{m-r}$ ja $y_2 \in \mathbb{R}^{n-r}$. Lisäksi tehdään merkintä

$$\Sigma = \left(\begin{array}{ccc|c} \sigma_1 & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{r\times(n-r)} \\ 0 & \cdots & \sigma_r & \\ \hline & 0_{(m-r)\times r} & & 0_{(m-r)\times(n-r)} \end{array}\right) = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

missä $\Sigma_1 = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_r \end{pmatrix}$ on $r \times r$ diagonaalimatriisi.

Nyt matriisi U^T on ortogonaalinen, jolloin Lauseen 1.7 nojalla saadaan

$$\begin{aligned} ||b - Ax||^2 &= ||U^T(b - Ax)||^2 \\ &= ||U^T b - U^T(U\Sigma V^T)x||^2 \\ &= ||U^T b - \Sigma(V^T x)||^2 \\ &= ||c - \Sigma y||^2 \\ &= \left\|\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}\right\|^2 \\ &= \left\|\begin{pmatrix} c_1 - \Sigma_1 y_1 \\ c_2 \end{pmatrix}\right\|^2 \\ &= ||c_1 - \Sigma_1 y_1||^2 + ||c_2||^2. \end{aligned}$$

Tässä vektori c_2 ei ole riippuvainen vektorista x, jolloin lausekkeen $||b - Ax||^2$ arvo on pienin mahdollinen, kun

$$||c_1 - \Sigma_1 y_1|| = 0.$$

Tämä on mahdollista, jos ja vain jos

$$\Sigma_1 y_1 = c_1,$$

missä matriisi Σ_1 on kääntyvä ja

$$\Sigma_1{}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \frac{1}{\sigma_r} \end{pmatrix}.$$

Tällöin operoimalla puolittain matriisilla $\Sigma_1{}^{-1}$ saadaan

$$\Sigma_1{}^{-1}\Sigma_1 y_1 = \Sigma_1{}^{-1} c_1,$$

missä $\Sigma_1{}^{-1}\Sigma = I_{r\times r}$ ja $y_1 \in \mathbb{R}^r$. Siispä saadaan, että

$$y_1 = \Sigma_1{}^{-1} c_1.$$

Tällöin vektori x voidaan ratkaista yhtälöstä $y = V^T x = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$, ja saadaan

$$\begin{aligned} x &= Vy \\ &= V \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \\ &= V \begin{pmatrix} \Sigma_1{}^{-1} c_1 \\ y_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Huomataan siis, että vektori x minimoi lausekkeen $||b - Ax||^2$, kun

$$x = V \begin{pmatrix} \Sigma_1{}^{-1} c_1 \\ y_2 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Tällöin erityisesti jos valitaan $y_1 = \Sigma_1{}^{-1} c_1$ ja $y_2 = 0$, niin

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= V \begin{pmatrix} \Sigma_1{}^{-1} c_1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= V \left(\begin{array}{c|c} \begin{matrix} \frac{1}{\sigma_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \frac{1}{\sigma_r} \end{matrix} & 0_{r\times(m-r)} \\ \hline 0_{(n-r)\times r} & 0_{(n-r)\times(m-r)} \end{array} \right) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \\ &= V\Sigma^+ U^T b \\ &= A^+ b \end{aligned}$$

minimoi lausekkeen $||b - Ax||^2$. Todistetaan vielä, että vektorin $\tilde{x}$ normi $||\tilde{x}||$ on pienimmän neliösumman ratkaisuista pienin mahdollinen. Nyt minkä tahansa muun vektorin z, joka minimoi lausekkeen $||b - Ax||^2$ täytyy olla muotoa

$$z = Vy = V \begin{pmatrix} {\Sigma_1}^{-1} c_1 \\ y_2 \end{pmatrix},$$

missä $y_2 \neq 0$. Tässä täytyy olla $y_2 \neq 0$, sillä muuten olisi $z = \tilde{x}$. Matriisi V^T on ortogonaalinen, jolloin

$$||z||^2 = ||V^T z||^2 = ||V^T(Vy)||^2 = ||y||^2 = ||{\Sigma_1}^{-1} c_1||^2 + ||y_2||^2 > ||{\Sigma_1}^{-1} c_1||^2 = ||\tilde{x}||^2.$$

□

Lauseen 6.6 todistuksesta on hyvä huomata, että vektori y_2 voidaan valita yhtälössä (15) äärettömän monella tavalla. Siispä tapauksessa, jossa matriisin A aste on $r < n$ pienimmän neliösumman ratkaisuja on ääretön määrä. Lisäksi Lause 6.5 ja Lause 6.6 pätevät myös neliömatriisin tapauksessa eli, jos $m = n$. Yhtälöryhmän $Ax = b$ pienimmän neliösumman ratkaisu löydetään siis aina matriisin A pseudoinverssin avulla. Lisäksi saadun pienimmän neliösumman ratkaisun $\tilde{x}$ normi $||\tilde{x}||$ on pienin mahdollinen tapauksessa, jossa pienimmän neliösumman ratkaisuja on ääretön määrä.

Lasketaan seuraavaksi esimerkki yhtälön $Ax = b$ pienimmän neliösumman ratkaisemisesta matriisin A pseudoinverssin avulla. Seuraavan esimerkin laatimiseen on käytetty apuna kirjan [3] Esimerkkiä 7.40.

Esimerkki 2. Etsi yhtälölle $Ax = b$ pienimmän neliösumman ratkaisu, kun

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{ja} \qquad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Huomataan, että $\det(A) = 0$ eli matriisi A ei ole kääntyvä. Yhtälö $Ax = b$ vastaa yhtälöparia

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 0 \\ x_1 + x_2 = 1 \end{cases}.$$

Tästä nähdään, että yhtälöllä ei ole ratkaisua. Voimme kuitenkin etsiä pienimmän neliösumman ratkaisun $\tilde{x}$, joka minimoi lausekkeen $||b - Ax||^2$. Tämä ratkaisu $\tilde{x}$ löydetään matriisin A pseudoinverssin A^+ avulla. Tarvitsemme siis ensin matriisin A singulaariarvohajotelman. Jätetään tässä yhteydessä singulaariarvohajotelman yksityiskohtainen muodostaminen tekemättä ja todetaan vain, että matriisin A singulaariarvohajotelmaksi saadaan

$$A = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Tällöin Määritelmän 4 mukaan matriisin A pseudoinverssi on

$$A^+ = V\Sigma^+U^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

Matriisin A sarakevektorit ovat lineaarisesti riippuvia, jolloin matriisin A aste on $1 < 2 = n$. Pienimmän neliösumman ratkaisuja on siis Lauseen 6.6 mukaan ääretön määrä. Tällöin Lauseen 6.6 nojalla etäisyyden $\|b - Ax\|^2$ minimoivaksi pienimmän neliösumman ratkaisuksi saadaan

$$\tilde{x} = A^+b = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

Tämä pienimmän neliösumman ratkaisu $\tilde{x}$ on myös normiltaan $\|\tilde{x}\| = \frac{1}{2\sqrt{2}}$ pienin mahdollinen.

7 Matriisin approksimointi

Tämän kappaleen laatimisessa on käytetty apuna kirjan [2] kappaletta 6.5.1. Matriisia voidaan approksimoida pienemmän asteen matriisilla. Ideana on löytää matriisin singulaariarvohajotelman avulla alemman asteen matriisi, joka on lähimpänä alkuperäistä matriisia. Ensin täytyy kuitenkin määritellä mitä tämä lähimpänä oleminen matriisien tapauksessa tarkoittaa. Määritellään siis matriiseille käytettävä normi, jonka suhteen approksimointi tehdään. Matriisin approksimoinnissa käytetään niin sanottua Frobenius normia. Ennen Frobenius normin määrittelyä tarvitsemme kuitenkin matriiseille määritetyn sisätulon.

Määritelmä 7.1. Olkoot $A = [a_{ij}]$ ja $B = [b_{ij}]$ $m \times n$ matriiseja. Tällöin matriisi sisätuloa merkitään $\langle \cdot, \cdot \rangle$ ja

$$\langle A, B \rangle = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{ij}.$$

Määritelmä 7.2. Olkoon $A = [a_{ij}]$ $m \times n$ matriisi ja $\langle \cdot, \cdot \rangle$ avaruuden $\mathbb{R}^{m \times n}$ matriisi sisätulo. Tällöin matriisin *Frobenius normia* merkitään $\| \cdot \|_F$ ja

$$\|A\|_F = (\langle A, A \rangle)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}{}^2 \right)^{1/2}.$$

Frobenius normin määritelmästä huomataan, että $\|A\|_F = \|A^T\|_F$, sillä matriisin A transponointi vaihtaa vain Frobenius normissa olevien alkioiden summausjärjestystä.

Seuraavan lauseen mukaan alkuperäistä matriisia A pienemmän asteen matriisi X, joka minimoi normin $\|A - X\|_F$, on aina olemassa. Lause on muotoiltu käyttäen apuna kirjan [2] kappaletta 6.5.

Lause 7.3. *Olkoon A $m \times n$ matriisi, jonka aste on r ja $0 < k < r$. Lisäksi olkoon $\mathcal{M}$ kaikkien niiden $m \times n$ matriisien joukko, joiden aste on korkeintaan k. Tällöin on olemassa matriisi $X \in \mathcal{M}$, jolle*

$$\|A - X\|_F \leq \|A - S\|_F,$$

kaikille $S \in \mathcal{M}$.

Todistus. Tämän lauseen todistus sivuutetaan tässä työssä. □

Mikäli kuitenkin oletetaan, että tämä Lauseen 7.3 normin $\|A - X\|_F$ minimoiva matriisi X on olemassa, niin tällöin kyseinen matriisi X voidaan löytää matriisin singulaariarvohajotelman avulla. Ennen tämän tuloksen esittelyä ja todistusta tarvitsemme kaksi Frobenius normiin liittyvää tulosta.

Lemma 7.4. *Olkoon A $m \times n$ matriisi ja Q $m \times m$ ortogonaalinen matriisi. Tällöin*

$$||QA||_F = ||A||_F.$$

Todistus. Tämän lemman todistukseen on käytetty apuna kirjan [2] Lauseen 6.5.2 todistusta. Olkoon $a_1, a_2, \ldots, a_n$ matriisin A sarakevektorit. Matriisi Q on ortogonaalinen, jolloin Lauseen 1.7 mukaan saadaan

$$\begin{aligned}
||QA||_F^2 &= \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} \left((Qa_j)_i\right)^2 \\
&= \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{m} \left|(Qa_j)_i\right|^2 \\
&= \sum_{j=1}^{n} ||Qa_j||^2 \\
&= \sum_{j=1}^{n} ||a_j||^2 \\
&= \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} {a_{ij}}^2 \\
&= ||A||_F^2
\end{aligned}$$

Tällöin täytyy olla myös $||QA||_F = ||A||_F$. □

Lemman 7.4 avulla voimme muotoilla matriisin A Frobenius normin käyttäen matriisin A singulaariarvoja.

Lause 7.5. *Olkoon A $m \times n$ matriisi, jonka aste on r. Lisäksi olkoon $U\Sigma V^T$ matriisin A singulaariarvohajotelma ja $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r$ sen positiiviset singulaariarvot. Tällöin*

$$||A||_F = ({\sigma_1}^2 + {\sigma_2}^2 + \cdots + {\sigma_r}^2)^{1/2}.$$

Todistus. Käytämme apuna jo aiemmin Määritelmän 7.2 yhteydessä todettua tietoa, jonka mukaan yleisesti matriisin S ja sen transpoosin S^T Frobenius normi on sama. Lisäksi matriisin A singulaariarvohajotelmassa olevat matriisit U ja V^T ovat ortogonaalisia, jolloin Lemman 7.4 nojalla

$$\begin{aligned}
||A||_F &= ||U\Sigma V^T||_F \\
&= ||\Sigma V^T||_F \\
&= ||(\Sigma V^T)^T||_F \\
&= ||V\Sigma^T||_F \\
&= ||\Sigma^T||_F \\
&= ||\Sigma||_F \\
&= ({\sigma_1}^2 + {\sigma_2}^2 + \cdots + {\sigma_r}^2)^{1/2}.
\end{aligned}$$

□

Tarvitsemme vielä yhden apuloksen ennenkuin esittelemme tämän kappaleen päätuloksen matriisin approksimoinnista. Seuraava aputulos liittyy matriisin A singulaariarvohajotelman $U\Sigma V^T$ yleiseen muotoon ja siinä esiintyvään diagonaalimatriisiin Σ.

Lemma 7.6. *Olkoon A $m \times n$ matriisi, jolla on esitykset $A = U\Sigma V^T$ ja $A = S\Lambda Y^T$, joissa matriisit U, V, S ja Y ovat ortogonaalisia, ja matriisit Σ ja Λ ovat diagonaalimatriiseja. Tällöin matriisien Σ ja Λ diagonaalialkioiden neliöt ovat järjestystä lukuunottamatta samat.*

Todistus. Nyt Lauseen 4.2 todistuksessa olevan yhtälön (10) mukaan esityksestä $A = U\Sigma V^T$ saadaan

$$AA^T = U(\Sigma\Sigma^T)U^T$$

ja vastaavasti esityksestä $A = S\Lambda Y^T$ saadaan

$$AA^T = S(\Lambda\Lambda^T)S^T.$$

Matriisi U on ortogonaalisena kääntyvä, joten matriisit AA^T ja $\Sigma\Sigma^T$ ovat similaariset. Vastaavasti matriisi S on kääntyvä, joten matriisit AA^T ja $\Lambda\Lambda^T$ ovat similaariset. Tällöin Lemman 3.4 kohdan (i) nojalla diagonaalimatriisit $\Sigma\Sigma^T$ ja $\Lambda\Lambda^T$ ovat similaariset.

Nyt Lemman 3.4 kohdan (iii) nojalla diagonaalimatriiseilla $\Sigma\Sigma^T$ ja $\Lambda\Lambda^T$ on algebralliset kertaluvut huomioiden samat ominaisarvot. Lemman 3.2 nojalla nämä ominaisarvot ovat diagonaalimatriiseille $\Sigma\Sigma^T$ ja $\Lambda\Lambda^T$ niiden diagonaalialkiot. Siispä matriiseilla $\Sigma\Sigma^T$ ja $\Lambda\Lambda^T$ on järjestystä lukuunottamatta samat diagonaalialkiot. Lisäksi nämä diagonaalialkiot ovat matriisien Λ ja Σ diagonaalialkioiden neliöt. Siispä matriisien Σ ja Λ diagonaalialkioiden neliöt ovat järjestystä lukuunottamatta samat. □

Nyt voimme esitellä ja todistaa tuloksen, jonka mukaan Lauseen 7.3 normin $\|A - X\|_F$ minimoiva matriisi X voidaan löytää matriisin A singulaariarvohajotelman avulla.

Lause 7.7. *Olkooon A $m \times n$ matriisi, jonka aste on r ja singulaariarvohajotelma $U\Sigma V^T$. Olkoon lisäksi $\mathcal{M}$ joukko, joka sisältää kaikki korkeintaan astetta k olevat $m \times n$ matriisit, missä $0 < k < r$. Olkoon $A' = U\Sigma' V^T$, missä*

$$\Sigma' = \left(\begin{array}{ccc|c} \sigma_1 & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{k\times(n-k)} \\ 0 & \cdots & \sigma_k & \\ \hline & 0_{(m-k)\times k} & & 0_{(m-k)\times(n-k)} \end{array}\right) = \begin{pmatrix} \Sigma_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ja luvut $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_k > 0$ ovat ensimmäiset k kappaletta matriisin A singulaariarvoja. Tällöin $A' \in \mathcal{M}$ ja

$$\|A - A'\|_F = ({\sigma_{k+1}}^2 + \cdots + {\sigma_r}^2)^{1/2} \leq \|A - S\|_F,$$

kaikille $S \in \mathcal{M}$.

Todistus. Lauseen todistuksessa on käytetty apuna kirjan [2] Lauseen 6.5.3 todistusta. Näytetään aluksi, että

$$\|A - A'\|_F = ({\sigma_{k+1}}^2 + \cdots + {\sigma_r}^2)^{1/2}.$$

Nyt matriisit U ja V ovat ortogonaalisia, jolloin Lemman 7.4 nojalla

$$\begin{aligned}
\|A - A'\|_F &= \|U\Sigma V^T - U\Sigma' V^T\|_F \\
&= \|U(\Sigma - \Sigma')V^T\|_F \\
&= \|(\Sigma - \Sigma')V^T\|_F \\
&= \|((\Sigma - \Sigma')V^T)^T\|_F \\
&= \|V(\Sigma - \Sigma')^T\|_F \\
&= \|(\Sigma - \Sigma')^T\|_F \\
&= \|(\Sigma - \Sigma')\|_F \\
&= ({\sigma_{k+1}}^2 + \cdots + {\sigma_r}^2)^{1/2}.
\end{aligned} \tag{16}$$

Lauseen 7.3 mukaan on olemassa matriisi $X \in \mathcal{M}$, jolle

$$\|A - X\|_F \leq \|A - S\|_F,$$

kaikille $S \in \mathcal{M}$. Matriisin Σ' diagonaalialkiot ovat matriisin A nollasta poikkeavia singulaariarvoja. Tällöin nähdään, että matriisilla Σ' on k kappaletta lineaarisesti riippumattomia sarakevektoreita, jolloin matriisin Σ' aste on k. Lisäksi matriisit U ja V^T ovat ortogonaalisina kääntyviä, jolloin Lauseen 3.7 nojalla matriisin $A' = U\Sigma' V^T$ aste on k. Tällöin $A' \in \mathcal{M}$ ja pätee

$$\|A - X\|_F \leq \|A - A'\|_F = ({\sigma_{k+1}}^2 + \cdots + {\sigma_r}^2)^{1/2}. \tag{17}$$

Riittää siis näyttää, että

$$\|A - X\|_F \geq ({\sigma_{k+1}}^2 + \cdots + {\sigma_r}^2)^{1/2}. \tag{18}$$

Tällöin olisi kohtien (17) ja (18) nojalla $\|A - A'\|_F = \|A - X\|_F$, jolloin

$$\|A - A'\|_F = \|A - X\|_F \leq \|A - S\|_F$$

kaikilla $S \in \mathcal{M}$, ja lause olisi todistettu.

Olkoon $Q\Omega P^T$ matriisin X singulaariarvohajotelma, missä

$$\Omega = \left(\begin{array}{ccc|c} \omega_1 & \cdots & 0 & \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0_{k\times(n-k)} \\ 0 & \cdots & \omega_k & \\ \hline & 0_{(m-k)\times k} & & 0_{(m-k)\times(n-k)} \end{array}\right) = \begin{pmatrix} \Omega_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Tässä matriisin X aste on korkeintaan k, joten joillakin j voi olla $\omega_j = 0$. Määritellään $B = Q^T AP$, jolloin $A = QBP^T$. Matriisit Q ja P ovat ortogonaalisia, joten vastaavasti kuin kohdassa (16) saadaan

$$\begin{aligned} \|A - X\|_F &= \|QBP^T - Q\Omega P^T\|_F \\ &= \|Q(B - \Omega)P^T\|_F \\ &= \|B - \Omega\|_F. \end{aligned}$$

Jaetaan matriisi B samankokoisiin lohkoihin kuin matriisi Ω, jolloin

$$B = \left(\begin{array}{c|c} \overbrace{\quad B_{11} \quad}^{k\times k} & \overbrace{\quad B_{12} \quad}^{k\times(n-k)} \\ \hline \underbrace{\quad B_{21} \quad}_{(m-k)\times k} & \underbrace{\quad B_{22} \quad}_{(m-k)\times(n-k)} \end{array}\right).$$

Tällöin saadaan

$$\begin{aligned} \|A - X\|_F^2 &= \|B - \Omega\|_F^2 \\ &= \|B_{11} - \Omega_k\|_F^2 + \|B_{12}\|_F^2 + \|B_{21}\|_F^2 + \|B_{22}\|_F^2. \end{aligned} \tag{19}$$

Näytetään, että $B_{12} = 0$. Jos olisi $B_{12} \neq 0$, niin määritellään matriisi

$$Y = Q\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}P^T.$$

Matriisien B_{11} ja B_{12} muodoista nähdään, että matriisilla $\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ on korkeintaan k kappaletta lineaarisesti riippumattomia rivivektoreita. Tällöin Astelauseen 2.3 nojalla matriisin $\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ aste on korkeintaan k. Lisäksi matriisit Q ja P^T ovat ortogonaalisina kääntyviä, jolloin Lauseen 3.7 nojalla matriisin $Y = Q\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}P^T$ aste on myös korkeintaan k. Tällöin matriisi

$Y \in \mathcal{M}$ ja $\|B_{12}\|_F^2 > 0$, jolloin saadaan

$$\begin{aligned}
\|A - Y\|_F^2 &= \left\| QBP^T - Q \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} P^T \right\|_F^2 \\
&= \left\| B - \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\|_F^2 \\
&= \|B_{21}\|_F^2 + \|B_{22}\|_F^2 \\
&< \|B_{11} - \Omega_k\|_F^2 + \|B_{12}\|_F^2 + \|B_{21}\|_F^2 + \|B_{22}\|_F^2 \\
&= \|A - X\|_F^2.
\end{aligned}$$

Tämä ei kuitenkaan ole mahdollista, sillä matriisille X pätee

$$\|A - X\|_F \leq \|A - S\|_F, \tag{20}$$

kaikilla $S \in \mathcal{M}$ eli erityisesti myös matriisille $Y \in \mathcal{M}$. Siispä täytyy olla $B_{12} = 0$.

Näytetään, että vastaavasti $B_{21} = 0$. Jos olisi $B_{21} \neq 0$, niin määritellään matriisi

$$C = Q \begin{pmatrix} B_{11} & 0 \\ B_{21} & 0 \end{pmatrix} P^T.$$

Matriisien B_{11} ja B_{21} muodoista voidaan päätellä, että matriisilla $\begin{pmatrix} B_{11} & 0 \\ B_{21} & 0 \end{pmatrix}$ on korkeintaan k kappaletta lineaarisesti riippumattomia sarakevektoreita. Siispä matriisin $\begin{pmatrix} B_{11} & 0 \\ B_{21} & 0 \end{pmatrix}$ aste on korkeintaan k. Lisäksi matriisit Q ja P^T ovat ortogonaalisina kääntyviä, jolloin Lauseen 3.7 nojalla matriisin $C = Q \begin{pmatrix} B_{11} & 0 \\ B_{21} & 0 \end{pmatrix} P^T$ aste on korkeintaan k. Tällöin $C \in \mathcal{M}$ ja $\|B_{21}\|_F^2 > 0$, joten

$$\begin{aligned}
\|A - C\|_F^2 &= \|B_{12}\|_F^2 + \|B_{22}\|_F^2 \\
&< \|A - X\|_F^2.
\end{aligned}$$

Vastaavalla perustelulla kuin kohdassa (20) saadaan, että täytyy olla $B_{21} = 0$. Nyt siis $B_{12} = 0$ ja $B_{21} = 0$, joten yhtälöstä (19) saadaan

$$\begin{aligned}
\|A - X\|_F^2 &= \|B_{11} - \Omega_k\|_F^2 + \|B_{12}\|_F^2 + \|B_{21}\|_F^2 + \|B_{22}\|_F^2 \\
&= \|B_{11} - \Omega_k\|_F^2 + \|B_{22}\|_F^2.
\end{aligned}$$

Näytetään seuraavana, että $B_{11} = \Omega_k$. Määritellään matriisi

$$Z = Q \begin{pmatrix} B_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} P^T.$$

Nyt matriisilla $\begin{pmatrix} B_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ on korkeintaan k kappaletta lineaarisesti riippumattomia sarakevektoreita, joten vastaavasti kuin matriisille C voidaan päätellä, että matriisin Z aste on korkeintaan k. Tällöin $Z \in \mathcal{M}$ ja saadaan

$$\begin{aligned} \|A - Z\|_F^2 &= \|B_{12}\|_F^2 + \|B_{21}\|_F^2 + \|B_{22}\|_F^2 \\ &= \|B_{22}\|_F^2 \\ &\leq \|B_{11} - \Omega_k\|_F^2 + \|B_{22}\|_F^2 \\ &= \|A - X\|_F^2. \end{aligned}$$

Vastaavalla perustelulla kuin kohdassa (20) nähdään, että ei voi olla $\|A - Z\|_F^2 < \|A - X\|_F^2$. Siispä täytyy olla $\|A - Z\|_F^2 = \|A - X\|_F^2$, joten täytyy olla $\|B_{11} - \Omega_k\|_F^2 = 0$ eli $B_{11} = \Omega_k$.

Nyt on näytetty, että $B_{12} = 0$, $B_{21} = 0$ ja $B_{11} = \Omega_k$. Siispä matriisi B on nyt muotoa

$$B = \begin{pmatrix} \Omega_k & 0 \\ 0 & B_{22} \end{pmatrix}.$$

Olkoon matriisin B_{22} singulaariarvohajotelma $U_1 \Lambda V_1^T$, jossa luvut $\lambda_1, \ldots, \lambda_{r-k}$ ovat matriisin Λ nollasta poikkeavat diagonaalialkiot. Olkoot lisäksi matriisit

$$U_2 = \begin{pmatrix} I_{k\times k} & 0 \\ 0 & U_1 \end{pmatrix} \qquad \text{ja} \qquad V_2 = \begin{pmatrix} I_{k\times k} & 0 \\ 0 & V_1 \end{pmatrix}.$$

Tällöin $\Lambda = U_1^T B_{22} V_1$ ja matriisit lohkoittain kertomalla saadaan

$$\begin{aligned} U_2^T (Q^T A P) V_2 &= U_2^T B V_2 \\ &= \begin{pmatrix} I_{k\times k} & 0 \\ 0 & U_1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \Omega_k & 0 \\ 0 & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_{k\times k} & 0 \\ 0 & V_1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I_{k\times k} & 0 \\ 0 & U_1^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Omega_k & 0 \\ 0 & B_{22} V_1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \Omega_k & 0 \\ 0 & U_1^T B_{22} V_1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \Omega_k & 0 \\ 0 & \Lambda \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Tällöin saadaan

$$A = Q U_2 \begin{pmatrix} \Omega_k & 0 \\ 0 & \Lambda \end{pmatrix} (P V_2)^T.$$

Nyt tässä matriisit QU_2 ja PV_2 ovat ortogonaalisia. Tällöin matriisilla A on Lemman 7.6 muotoa olevat esitykset $A = U\Sigma V^T$ ja $A = QU_2\begin{pmatrix}\Omega_k & 0\\ 0 & \Lambda\end{pmatrix}(PV_2)^T$, joten matriisien Σ ja $\begin{pmatrix}\Omega_k & 0\\ 0 & \Lambda\end{pmatrix}$ diagonaalialkioiden neliöt ovat järjestystä lukuunottamatta samat. Tällöin voimme arvioida matriisin Λ diagonaalialkioiden neliöiden summaa ${\lambda_1}^2 + \cdots + {\lambda_{r-k}}^2$ alaspäin matriisin Σ pienimpien diagonaalialkioiden neliöiden summalla. Nämä matriisin Σ pienimmät diagonaalialkiot ovat Lauseen 4.2 mukaan $\sigma_{k+1} + \cdots + \sigma_r$. Tällöin saadaan

$$\begin{aligned}
\|A - X\|_F &= \|B_{22}\|_F \\
&= \|\Lambda\|_F \\
&= ({\lambda_1}^2 + \cdots + {\lambda_{r-k}}^2)^{1/2} \\
&\geq ({\sigma_{k+1}}^2 + \cdots + {\sigma_r}^2)^{1/2}.
\end{aligned}$$

□

8 Kuvan pakkaaminen

Tämän kappaleen kirjoittamisessa on käytetty apuna kirjan [3] kappaletta *Digital Image Compression*. Yksi matriisin singulaariarvohajotelman sovelluksista on kuvan pakkaaminen. Kuvan pakkaamista käytetään pienentämään kuvatiedoston kokoa, jotta se veisi vähemmän tallennustilaa ja olisi kustannustehokkaampi lähettää esimerkiksi sähköpostin kautta.

Otetaan esimerkiksi 473×388 kuvapisteen kokoinen mustavalkokuva, jossa on 256 eri harmaan sävyä. Tämä kuva voidaan tallentaa 473×388 kokoisena matriisina A, jossa jokainen alkio saa arvon väliltä $0 - 255$, riippuen kunkin kuvapisteen sävystä. Tämä tarkoittaa yhteensä 183524 luvun tallentamista. Valokuvat kuitenkin hyvin usein sisältävät kuvapisteitä, jotka eivät ole kuvan hahmottamisen kannalta niin merkittävässä roolissa kuin toiset.

Lauseen 7.7 approksimaation avulla matriisiksi tallennettua kuvaa voidaan pakata. Osoittautuu, että singulaariarvohajotelmassa olevat pienet singulaariarvot ovat kuvan tarkkuuden kannalta vähemmän merkityksellisiä kuin suuremmat singulaariarvot. Ideana on siis jättää hajotelmasta pois pienimpiä singulaariarvoja. Täytyy huomata, että tällöin toki menetämme osan matriisin A sisältämästä informaatiosta eli kuvan tarkkuus huononee. Osoittautuu kuitenkin, että tarvitsemme tallentamiseen huomattavasti vähemmän lukuja, kun pakkaamme kuvan käyttämällä matriisille A Lauseen 7.7 antamaa parasta mahdollista approksimaatiota A'. Matriisit lohkoittain kertomalla huomataan, että

$$
\begin{aligned}
A' = U\Sigma' V^T &= \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_m \end{pmatrix}
\left(\begin{array}{c|c}
\begin{matrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_k \end{matrix} & 0_{k\times(n-k)} \\ \hline
0_{(m-k)\times k} & 0_{(m-k)\times(n-k)}
\end{array}\right)
\begin{pmatrix} {v_1}^T \\ \vdots \\ {v_n}^T \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_k & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}
\left(\begin{array}{c|c}
\begin{matrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_k \end{matrix} & 0_{k\times(n-k)} \\ \hline
0_{(m-k)\times k} & 0_{(m-k)\times(n-k)}
\end{array}\right)
\begin{pmatrix} {v_1}^T \\ \vdots \\ {v_k}^T \\ 0^T \\ \vdots \\ 0^T \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} u_1 & \cdots & u_k \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_k \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} {v_1}^T \\ \vdots \\ {v_k}^T \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

Siispä tarvitsemme ensimmäiset k kappaletta matriisin A singulaariarvoja, matriisin U ensimmäiset k kappaletta sarakkeita ja matriisin V ensimmäiset k kappaletta sarakkeita. Tällöin matriisin approksimaation antamaa kuvanpakkaus menetelmää käyttäen tarvitsemme kuvan tallentamiseen lukuja yhteensä

$$k + km + kn = k(1 + m + n)$$

kappaletta.

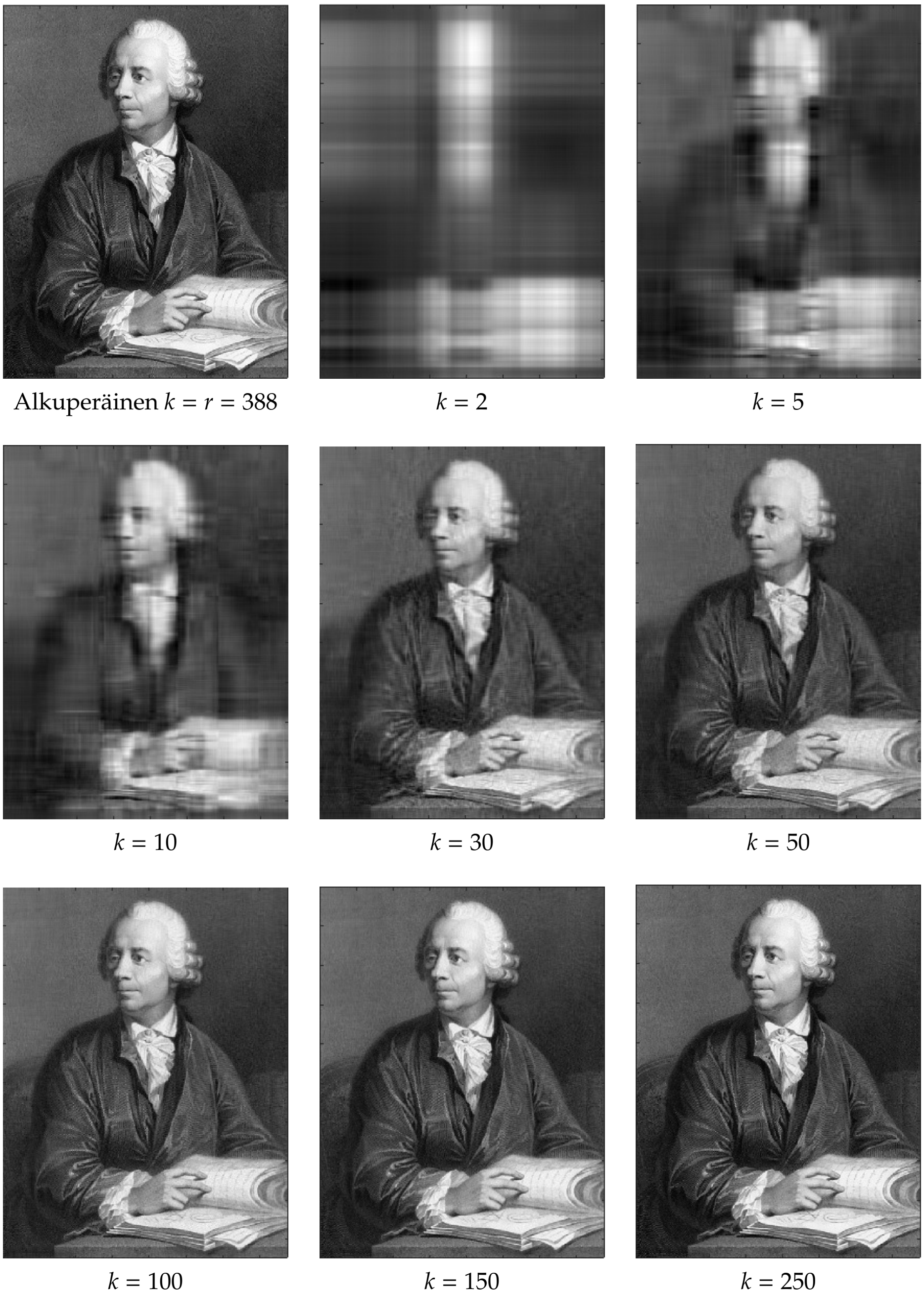
Kuvassa 5 on MATLAB ohjelmalla tehty kuvan pakkaus käyttäen matriisin singulaariarvohajotelmaa. Pakkauksessa on käytetty sveitsiläisen matematiikko Leonhard Eulerin muotokuvaa, ja kuvan koko on 473×388. Vasemmassa yläkulmassa on alkuperäinen kuva, jota vastaavan matriisin A aste on $r = 388$. Kirjan [6] kappaleesta 15.7.1 löytyvän ohjeen mukaan on seuraavalla MATLAB-koodilla tehty alkuperäisestä matriisista approksimaatioita käyttämällä matriisin A singulaariarvohajotelmaa:

```
A = imread('euler.jpg');
A = double(A);
imagesc(A); colormap(gray);
[U S V] = svd(A);
figure(2);
A30 = U(:,1:30)*S(1:30,1:30)*V(:,1:30)';
imagesc(A30); colormap(gray);
```

Luku k kuvastaa kuinka montaa matriisin A järjestyksessä suurinta singulaariarvoa approksimaatioissa on käytetty. Yllä olevassa esimerkki koodissa $k = 30$. Huomataan, että kuva alkaa hahmottumaan nopeasti jo vähäisillä singulaariarvojen määrillä. Arvolla $k = 50$ saadaan jo varsin hyvä approksimaatio alkuperäisestä kuvasta. Tämän approksimaation tallentamiseen tarvitaan lukuja yhteensä

$$k(1 + m + n) = 50(1 + 473 + 388) = 43100$$

kappaletta. Tämä on vain noin 23 prosenttia alkuperäisen kuvan tallentamiseen tarvittavista $mn = 473 \cdot 388 = 183524$ kappaleesta. Säästö on siis merkittävä.



Kuva 5: Kuvan pakkaaminen käyttäen matriisin approksimaatiota. Vasemman yläkulman alkuperäinen kuva on *Jakob Emanuel Handmannin* vuonna 1756 maalama muotokuva *Leonhard Eulerista* [7].

Viitteet

[1] Stanley I. Grossman, *Elementary Linear Algebra* (5th ed.), Brooks/Cole, 1994.

[2] Steven J. Leon, *Linear Algebra with Applications* (9th ed.), Pearson, 2015.

[3] David Poole, *Linear Algebra A Modern Introduction* (3th ed.), Brooks/Cole, 2011.

[4] Gilbert Strang, *The Fundamental Theorem of Linear Algebra*, The American Mathematical Monthly, Vol. 100, No. 9, ss. 848–855, 1993.

[5] W. Keith Nicholson, *Linear Algebra with Applications* (Open ed. 2019 A), lyryx, 2019.

[6] William Ford, *Numerical Linear Algebra with Applications: Using MATLAB* (1st ed.), Elsevier Science & Techonology, 2014.

[7] Jakob Emanuel Handmann, *Leonhard Euler*, 1756. (viitattu 6.12.2020.)
`https://sco.wikipedia.org/wiki/Leonhard_Euler#/media/File:Leonhard_Euler.jpeg`