Pseudo-Inverse

Mit der Singulärwertzerlegung einer $m \times n$-Matrix A, $A = USV^*$, lässt sich die Lösung x des Ausgleichsproblems $|Ax - b| \to \min$ mit minimaler Norm in der Form

$$x = A^+ b, \quad A^+ = VS^+U^*,$$

darstellen mit

$$S^+ = \operatorname{diag}(1/s_1, \ldots, 1/s_r, 0, \ldots, 0), \quad r = \operatorname{Rang} A\,,$$

der $n \times m$-Diagonalmatrix mit den Kehrwerten der Singulärwerte. Für eine reelle Matrix A sind die unitären Matrizen U, V ebenfalls reell und $U^* = \bar{U}^{\mathrm{t}} = U^{\mathrm{t}}$, $V^* = \bar{V}^{\mathrm{t}} = V^{\mathrm{t}}$.

Die Matrix A^+ wird als Pseudo-Inverse bezeichnet. Mit $\|C\|_F = (\sum_{j,k} |c_{j,k}|^2)^{1/2}$ der Frobenius-Norm und $E_{m\times m}$ der $m \times m$-Einheitsmatrix gilt

$$\|E_{m\times m} - AA^+\|_F = \min_X \|E_{m\times m} - AX\|_F\,,$$

was die Namesgebung (Approximation einer Inversen für eine nicht invertierbare Matrix) unterstreicht.

Ist Rang $A = n$, so kann man das Ausgleichsproblem mit Hilfe der Normalengleichungen lösen, $x = (A^*A)^{-1}A^*b$. In diesem Fall ist also

$$A^+ = (A^*A)^{-1}A^*\,,$$

insbesondere $A^+ = A^{-1}$ für eine quadratische, invertierbare Matrix A.

Bezeichnen $\{u_1, \ldots, u_m\}$ und $\{v_1, \ldots, v_n\}$ die orthonormalen Basen aus den Spalten der unitären Matrizen U bzw. V, so lässt sich die lineare Abbildung $b \mapsto x = A^+b$ in der faktorisierten Form

$$x = \sum_{\ell=1}^{r} \frac{1}{s_\ell}\,(u_\ell^* b)v_\ell$$

darstellen. Daraus folgt insbesondere, dass

$$\operatorname{Kern} A^+ = \operatorname{span}\{u_{r+1}, \ldots, u_m\}, \quad \operatorname{Bild} A^+ = \operatorname{span}\{v_1, \ldots, v_r\}$$

und $\|A^+\|_2 = 1/s_r$.

Beweis

(i) Ausgleichsproblem:

Invarianz der Euklidischen Norm unter unitären Transformationen $\implies$

$$|Ax - b| = |U^*(Ax - b)|$$

setze

$$c = U^* b, \quad y = V^* x \quad \iff \quad x = Vy$$

$U^* Ax = U^*(USV^*)Vy = Sy \quad \rightsquigarrow \quad$ äquivalentes Minimierungsproblem

$$|Sy - c| = \left| \begin{pmatrix} s_1 y_1 - c_1 \\ \vdots \\ s_r y_r - c_r \\ -c_{r+1} \\ \vdots \\ -c_m \end{pmatrix} \right| \to \min, \quad S = U^* AV$$

Lösung der ersten r Gleichungen $\quad \rightsquigarrow \quad$ Minimum

$$y_k = c_k / s_k, \; k = 1, \ldots r$$

Normtreue der unitären Matrix V $(|x| = |y|)$ $\quad \rightsquigarrow$

$$y_{r+1} = \cdots = y_n = 0$$

für die Lösung minimaler Norm
Insgesamt folgt

$$y = S^+ c, \quad s^+_{j,k} = \begin{cases} 1/s_j & \text{für } j = k \le r \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

d.h.

$$x = Vy = VS^+ c = \underbrace{VS^+ U^*}_{A^+} b$$

(ii) Approximation der Inversen:

$$\|E_{m\times m} - AX\|_F^2 = \sum_k |e_k - Ax_k|^2$$

mit e_k dem k-ten Einheitsvektor und x_k der k-tex Spalte von X
minimal für $x_k = A^+ e_k$, d.h. x_k ist die k-te Spalte von A^+
$\implies \quad X = A^+$

Beispiel

Lösung des Ausgleichproblems $|Ax - b| \to \min$ für

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -4 & 5 \\ 6 & 0 & 3 \\ 2 & -4 & 5 \\ 6 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

(i) Berechnung der Singulärwert-Zerlegung:

$$A^{\mathrm{t}} A = \begin{pmatrix} 80 & -16 & 56 \\ -16 & 32 & -40 \\ 56 & -40 & 68 \end{pmatrix}$$

Eigenwerte und Eigenvektoren

$$s_1^2 = 144,\ s_2^2 = 36,\ s_3^2 = 0, \qquad V = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2 & 2 & -1 \\ -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\rightsquigarrow \quad S = \begin{pmatrix} 12 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad AV = \begin{pmatrix} 6 & -3 & 0 \\ 6 & 3 & 0 \\ 6 & -3 & 0 \\ 6 & 3 & 0 \end{pmatrix} = US$$

Spalten 1 und 2 von U: Division der entsprechenden Spalten von AV durch die singulären Werte s_1 und s_2 $\quad\rightsquigarrow\quad$ Einheitsvektoren
restliche Spalten: Ergänzen zu einer orthonormalen Basis

$$U = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

(ii) Pseudo-Inverse und Ausgleichslösung:
Zerlegung $A = USV^*$ $\quad\rightsquigarrow$

$$A^+ = V \begin{pmatrix} \frac{1}{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} U^* = \frac{1}{72} \begin{pmatrix} -2 & 6 & -2 & 6 \\ -5 & 3 & -5 & 3 \\ 4 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix}$$

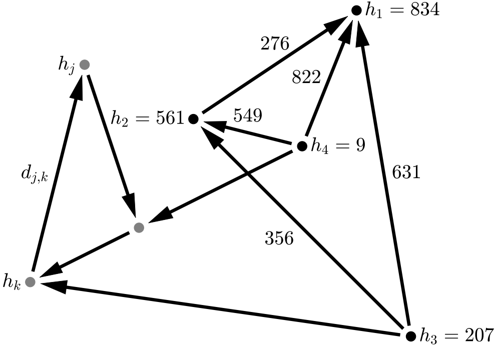
Lösung minimaler Norm: $x = A^+ b = \frac{1}{4}(2, 1, 0)^{\mathrm{t}}$

Beispiel

Kontrolle topographischer Höhendaten h_j durch Messung von Höhendifferenzen $d_{j,k}$

Messfehler $\rightsquigarrow$

$$d_{j,k} \neq h_j - h_k$$



Höhenkorrekturen x_j durch Lösen des Ausgleichsproblems

$$\sum_{(j,k)} \Big(d_{j,k} - \big((h_j + x_j) - (h_k + x_k)\big) \Big)^2 \to \min$$

Höhen und Differenzwerte des abgebildeten Beispiels

$$h = (834, 561, 207, 9)^{\mathrm{t}}, \quad d = (276, 631, 822, 356, 549)^{\mathrm{t}}$$

überbestimmtes System

$$A(h+x) = d, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad d = \begin{pmatrix} d_{1,2} \\ d_{1,3} \\ d_{1,4} \\ d_{2,3} \\ d_{2,4} \end{pmatrix}$$

Lösung minimaler Norm

$$x = A^+(d - Ah) = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & -3 & 1 & -3 & 1 \\ 0 & 1 & -3 & 1 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ -3 \\ 2 \\ -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Minimum-Norm-Lösung $\quad\rightsquigarrow\quad$ kleinstmögliche Korrekturen