Singulärwertzerlegung

Zu jeder $m \times n$-Matrix A existieren orthonormale Basen $\{u_1, \ldots, u_m\}$ und $\{v_1, \ldots, v_n\}$ bezüglich derer die lineare Abbildung $L: x \mapsto Ax$ Diagonalform hat:

$$v_k \mapsto Av_k = s_k u_k, \quad k = 1, \ldots, r = \operatorname{Rang} A\,,$$

mit $s_1 \geq \cdots \geq s_r > 0$ den sogenannten Singulärwerten von A.

Mit den unitären Matrizen $U = (u_1, \ldots, u_m)$ und $V = (v_1, \ldots, v_n)$ besitzt A die Faktorisierung

$$A = USV^*, \quad S = \begin{pmatrix} s_1 & & \mathbf{O} \\ & s_2 & \\ \mathbf{O} & & \ddots \end{pmatrix},$$

mit S einer $m \times n$-Diagonalmatrix und $V^* = \bar{V}^{\mathrm{t}}$ der adjungierten Matrix zu V ($V^* = V^{\mathrm{t}}$ für eine reelle Matrix). Entsprechend hat die lineare Abbildung L die Darstellung

$$x \mapsto Ax = \sum_{k=1}^{r} u_k s_k v_k^* x\,.$$

Daraus folgt insbesondere, dass $Av_k = (0, \dots, 0)^t$ für $k = r + 1, \dots, n$ und $Ax \in \operatorname{span}\{u_1, \dots, u_r\}$, d.h.

$$\operatorname{Kern} A = \operatorname{span}\{v_{r+1}, \dots, v_n\}, \quad \operatorname{Bild} A = \operatorname{span}\{u_1, \dots, u_r\}\,.$$

Schließlich ist $\|A\|_2 = s_1$ und $\|A\|_F^2 = \sum_{j,k} |a_{j,k}|^2 = s_1^2 + \cdots + s_r^2$.
Die Singulärwertzerlegung lässt sich durch Lösen eines Eigenwertproblems bestimmen. Die Singulärwerte s_k sind die positiven Eigenwerte der symmetrischen positiv semidefiniten $n \times n$-Matrix A^*A und die Vektoren v_k sind die zugehörigen Eigenvektoren. Die Vektoren $u_1, \dots, u_r$ sind die Eigenvektoren der $m \times m$-Matrix AA^* zu den gleichen Eigenwerten. Die Vektoren $u_{r+1}, \dots, u_m$ und $v_{r+1}, \dots, v_n$ sind für die Faktorisierung von A irrelevant. Sie ergänzen $u_1, \dots, u_r$ und $v_1, \dots, v_r$ zu orthonormalen Basen und spannen die Eigenräume zum Eigenwert 0 der Matrizen AA^* und A^*A auf.

Alternativ kann man u_k auch durch Normierung der Spalten $1, \dots, r$ von $AV = US = (u_1 s_1, \dots, u_r s_r, 0, \dots, 0)$ bestimmen und durch Vektoren $u_{r+1}, \dots, u_m$ zu einer orthonormalen Basis ergänzen.

Beweis

(i) Konstruktion:

A^*A hermitesch und positiv semidefinit $\implies$

$\exists$ orthonormale Basis $\{v_1, \ldots, v_n\}$ aus Eigenvektoren zu den nicht-negativen Eigenwerten $\lambda_j = s_j^2$, d.h.

$$V^*A^*AV = \operatorname{diag}(s_1^2, \ldots, s_k^2, 0, \ldots, 0) = S^{\mathrm{t}}S, \quad V = (v_1, \ldots, v_n),\ V^*V = E$$

(Eigenwerte s_j^2 absteigend sortiert)

Spalten von AV orthogonal mit Norm s_j $\implies$

$$AV = (s_1 u_1, \ldots, s_k u_k, \underbrace{\mathbf{0}}_{\text{Spalten } k+1\ldots m}) = US$$

mit einer unitären Matrix U; die Spalten $u_{k+1}, \ldots, u_m$ ergänzen $u_1, \ldots, u_k$ zu einer orthonormalen Basis

$\rightsquigarrow$ Darstellung

$$A = USV^* \iff U^*AV = S$$

(ii) Rang:
Invarianz des Rangs einer Matrix unter unitären Transformationen $\implies$

$$\text{Rang } A = \text{Rang } S = k$$

(iii) $Av_j = s_j u_j$:
folgt aus

$$A = USV^*, \quad V^* v_j = e_j,\, Se_j = s_j e_j,\, Ue_j = u_j$$

mit e_j dem j-ten Einheitsvektor

(iv) $y = \sum_j s_j (v_j^* x) u_j$:
folgt aus (iii) und

$$x = \sum_j (v_j^* x) v_j$$

(Darstellung bzgl. einer orthonormalen Basis)

(v) $\|A\|_2 = s_1$, $\|A\|_F^2 = s_1^2 + \cdots + s_k^2$:
folgt aus der Invarianz der Euklidischen Norm und der Frobenius-Norm unter unitären Transformationen

Beispiel

Berechnung der Singulärwert-Zerlegung von

$$A = \begin{pmatrix} 6 & -5 & 8 \\ 6 & 5 & 8 \\ 6 & -5 & 8 \\ 6 & 5 & 8 \end{pmatrix}$$

(i) Bestimmung von V und S:

$$A^{\mathrm{t}}A = \begin{pmatrix} 144 & 0 & 192 \\ 0 & 100 & 0 \\ 192 & 0 & 256 \end{pmatrix}$$

Eigenwert 100 mit Eigenvektor $(0, 1, 0)^{\mathrm{t}}$
Spalte $3 = (4/3) \times$ Spalte 1
$\rightsquigarrow$ Eigenwert 0 mit Eigenvektor $(4, 0, -3)^{\mathrm{t}}/5$
Spur $A = 500$
$\rightsquigarrow$ Eigenwert $500 - 100 - 0 = 400$ mit orthogonalem Eigenvektor

absteigende Sortierung der singulären Werte s_j (Wurzeln der Eigenwerte von $A^{\mathrm{t}}A$) $\quad\rightsquigarrow$

$$V = \begin{pmatrix} 3/5 & 0 & 4/5 \\ 0 & 1 & 0 \\ 4/5 & 0 & -3/5 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 20 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(ii) Bestimmung von U:

$$AV = \begin{pmatrix} 10 & -5 & 0 \\ 10 & 5 & 0 \\ 10 & -5 & 0 \\ 10 & 5 & 0 \end{pmatrix}$$

Normierung (Division durch s_1, s_2) $\quad\rightsquigarrow\quad$ Spalten 1 und 2 von U:

$$u_1 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}, \quad u_2 = \begin{pmatrix} -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

Ergänzung zu einer orthogonalen Basis $\rightsquigarrow$

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

Probe $A \overset{!}{=} USV^{\mathrm{t}}$

$$A = \begin{pmatrix} 6 & -5 & 8 \\ 6 & 5 & 8 \\ 6 & -5 & 8 \\ 6 & 5 & 8 \end{pmatrix}$$

$$USV^{\mathrm{t}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 20 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 & 0 & 4 \\ 0 & 5 & 0 \\ 4 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

$\checkmark$