§13 Singulärwertzerlegung (SVD) und Rayleigh-Quotient

Gesucht: Normalform für "orthogonale Äquivalenz". Der Satz 12.21 gibt eine Normalform an, für die "orthogonale Ähnlichkeit", vgl. mit den entsprechenden Resultaten für die allgemeine Ähnlichkeit und Äquivalenz in LA 1.

Beachte: Reihenfolge ist jetzt umgekehrt: zuerst Ähnlichkeit dann Äquivalenz.

Definition 1: (a) $A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$ heißen **orthogonal ähnlich,**
wenn mit $P \in \mathcal{O}(n)$ gilt: ${}^{\mathsf{t}}PAP = B$.
(b) $A, B \in \mathbb{R}^{m\times n}$ heißen **orthogonal äquivalent,**
wenn mit $P \in \mathcal{O}(m)$ und $Q \in \mathcal{O}(n)$ gilt $PAQ = B$.
In beiden Fällen handelt es sich um Äquivalenzrelationen.

Die Suche nach entsprechenden Normalformen gehört zu den Grundaufgaben der linearen Algebra. Zusätzliche Motivation durch hohe Anwendungsrelevanz: Simulation / Numerik / Matrizenarithmetik / angewandte Stochastik / Optimierung / Bildkompression / ...

Satz 2: Singulärwertzerlegung. Sei $A \in \mathbb{R}^{m\times n}\backslash\{0\}$.
Dann gibt es $P \in \mathcal{O}(m),\ Q \in \mathcal{O}(n)$ und $s_1, \ldots, s_r \in \mathbb{R}$, derart, dass

$$0 < s_1 \leq \cdots \leq s_r$$

und

$$PAQ = \begin{bmatrix} s_r & & & \cdots & & 0 \\ & \ddots & & & & \\ & & s_1 & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ 0 & & & \cdots & & 0 \end{bmatrix} \qquad (m \times n\text{-Diagonalmatrix})$$

$s_1, \ldots, s_r$ sind durch A **eindeutig** festgelegt und heißen **Singulärwerte von A.** Die Zerlegung $A = {}^{\mathsf{t}}P\mathsf{diag}(s_r, \ldots s_1,\ 0, \ldots){}^{\mathsf{t}}Q$ heißt **Singulärwertzerlegung von A, Singular Value Decomposition "SVD"**

Zum historischen Hintergrund, einigen Anwendungen vor 1992 und der "seltsamen" Namensgebung, siehe "Early history of SVD" G, Stewart, University Maryland (Report).

Beweis: in mehreren Schritten:
Existenz:
(a) Behauptung: Man kann o. E annehmen: $m = n$ und $A \in GL_n(\mathbb{R})$.
Bemerkung: Ein direkter Beweis für beliebige m, n ist unter Umständen "schöner", aber meist schwerer zu verstehen (siehe z.B. D. Serre: Matrices, Springer, 2002; S. 128 ff.). Unser Vorgehen zeigt zugleich, wie man rechnen kann.
Beweis: Wir benutzen die orthogonale Zeilenstufenform von Satz 12.17:
Sei $A \neq 0$.

$$\exists P \in \mathcal{O}(n): \quad PA = \begin{bmatrix} Z \\ 0 \end{bmatrix},\ Z \text{ mit linear unabhängigen Zeilen.}$$
$$\exists Q \in \mathcal{O}(m): \quad {}^{\mathsf{t}}Q{}^{\mathsf{t}}Z \text{ in Zeilenstufenform bzw. } ZQ = [S, 0],\ S \text{ mit linear unabhängigen Spalten.}$$

Insgesamt ergibt dies: $PAQ = \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ mit $S \in \mathbb{R}^{r \times r}$ und $r =$ Rang $A =$ Rang S, insbesondere $S \in Gl(r, \mathbb{R})$. Gelingt es, die Existenz einer SVD für S nachzuweisen, so ergibt sich demnach die Existenz einer SVD auch für A.

Sei ab jetzt: $\boldsymbol{A \in Gl_n(\mathbb{R})}$.

(b) Da $A \in Gl_n(\mathbb{R})$, gilt für $x \in \mathbb{R}^{n \times 1} \backslash \{0\}$: ${}^{\mathsf{t}}x{}^{\mathsf{t}}AAx = \| Ax \|^2 > 0$. Damit folgt: $\sigma({}^{\mathsf{t}}AA) \subset \mathbb{R}_+$, denn ist x ein Eigenvektor zum Eigenwert λ von ${}^{\mathsf{t}}AA$, dann gilt:

$$0 < \| Ax \|^2 = {}^{\mathsf{t}}x \underbrace{({}^{\mathsf{t}}AAx)}_{=\lambda x} = \lambda {}^{\mathsf{t}}xx = \lambda \| x \|^2.$$

Es folgt $\lambda > 0$.

Beachte: nicht alle symmetrischen Matrizen haben positive Eigenwerte; z. B. $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$.

(c) Nach Satz 12.22 ist ${}^{\mathsf{t}}AA$ orthogonal ähnlich zu $\mathsf{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. Zwangsläufig gilt nach (b): $0 < \lambda_i$ für $1 \leq i \leq n$. Mit elementaren Spiegelungen $P_1, \ldots, Ps$ erreicht man noch:

$$Ps \cdots P_1 \mathsf{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n) P_1 \cdots Ps = \mathsf{diag}(\mu_n, \cdots, \mu_1) \text{ mit } 0 < \mu_1 \leq \cdots \leq \mu_n.$$

Setze $s_i := {}_{+}\sqrt{\mu_i}$ und $D := \mathsf{diag}(s_n, \ldots, s_1)$. Zur Erklärung des Vorstehenden sei daran erinnert, dass $P_i^{-1} = P_i$ und das $S(i, j, 0, 1) = P_j^i$.

(d) Sei (vgl. Satz 12.22) $(v_n, \ldots, v_1)$ eine Orthonormalbasis von Eigenvektoren von ${}^{\mathsf{t}}AA$;. Dann ist v_i Eigenvektor zum Eigenwert $s_i^2 = \mu_i$.
Setze $Q := [v_n, \ldots, v_1]$ und $P := D^{-1}{}^{\mathsf{t}}Q{}^{\mathsf{t}}A$. Dann gilt $({}^{\mathsf{t}}A \cdot A)Q = QD^2$ **und**

$$PAQ = (D^{-1}{}^{\mathsf{t}}Q{}^{\mathsf{t}}A)AQ = D^{-1}{}^{\mathsf{t}}Q({}^{\mathsf{t}}AAQ) = D^{-1}{}^{\mathsf{t}}QQD^2 = D$$

Die letzte Gleichung ergibt sich, weil nach Konstruktion ${}^{\mathsf{t}}QQ = E_n$. Dabei ist $Q \in \mathcal{O}(n)$ und, da außerdem

$$P{}^{\mathsf{t}}P = D^{-1}{}^{\mathsf{t}}Q{}^{\mathsf{t}}\underbrace{AAQ}\,D^{-1} = D^{-1}\underbrace{{}^{\mathsf{t}}QQ}_{=E_n}D^2D^{-1} = E_n,$$

also auch $P \in \mathcal{O}(n)$.

Eindeutigkeit: Wenn $PAQ = D$ bzw. $A = {}^{\mathsf{t}}PD{}^{\mathsf{t}}Q$, dann ist ${}^{\mathsf{t}}AA = QD\underbrace{P{}^{\mathsf{t}}P}_{E_n}D{}^{\mathsf{t}}Q = QD^2{}^{\mathsf{t}}Q$. Es folgt $\chi_{{}^{\mathsf{t}}AA} = \prod_{i=1}^{n}(t - \mu_i) = \chi_{D^2}$ □

Ein **völlig** anderer Beweis ergibt sich mit Hilfe des sogenannten Rayleigh-Quotienten (J. W. Rayleigh 1842 - 1919) und Matrix-Normen. Da die Begriffe sowieso wichtig sind, werden Sie jetzt eingeführt und dann Satz 2 nochmal bewiesen.

Hinweise zu Anwendungen der SVD sind u. a. zu finden in:

H. Möller: algorithmische Mathematik, Vieweg, 1997.
W. Mackens und H. Voß: Mathematik 1 für Studierende der Ingenieurwisenschaften, Heco-Verlag, 1993
G. Stewart: Early history of SVD, Universität Maryland, Report.
V. Mehrmann: Numerik, Vorlesungskript, TH Berlin.

Definition 3: (a) $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$
$\| A \|_2 := \max_{x \neq o} \frac{\| Ax \|}{\| x \|}$ heißt (2-)Norm von A. Dies ist die Standart-Matrixnorm zum Standardskalarprodukt.
Vorsicht! Dass das Maximum angenommen wird, wird unten erst gezeigt, kann aber auch direkt mit analytischen Überlegungen erkannt werden.

(b) Sei $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$**symmetrisch.** Die Abbildung $R_A : \mathbb{R}^{n\times 1}\backslash\{0\} \to \mathbb{R}$ mit $R_A(x) = \frac{{}^{\mathsf{t}}xAx}{{}^{\mathsf{t}}xx}$ heißt **Rayleighquotient** zur Matrix A.

(c) Die **Frobenius-Norm** einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ ist die Länge des 'Vektors' $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ bzgl. dem Standardskalarprodukt:

$$\| A \|_F = \sqrt{\sum_{\substack{1\le i\le m\\ 1\le j\le n}} a_{ij}^2} \ .$$

Beispiel 4: (a) $\| E_n \|_2 = 1, \| E_n \|_F = \sqrt{n},\ R_{E_n}(x) = 1$.

(b) Sei $A = \begin{bmatrix} 1 & s \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$. dann ist $\| A \|_F = \sqrt{2+s^2}$. Was ist $\| A \|_2$? Behauptung: $\| A \|_2 = 1 + \frac{s^2}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{4s^2+s^4}$. Dies ergibt sich mit dem folgenden Satz 6.

(c) Normberechnung in Maple: z. B.: so:

```
with(linalg): A:=matrix(.......);norm(A,2);
```

(d) Sei A symmetrisch und $Ax = \lambda x$ für ein $x \neq 0$, dann ist $R_A(x) = \lambda$.

Beobachtung 5: $\| A \|_F$ und $\| A \|_2$ sind sogenannte Matrixnormen,
d.h. es gilt (mit $\| \ \|$ statt $\| \ \|_F$ oder $\| \ \|_2$) :

(i) $\forall A \in \mathbb{R}^{m\times n} : \| A \| = 0 \Leftrightarrow A = 0$.
(ii) $\forall \lambda \in \mathbb{R},\ A, B \in \mathbb{R}^{m\times n} : \| \lambda A \| = |\lambda| \| A \|$ und $\| A + B \| \le \| A \| + \| B \|$.
(iii) $\forall A \in \mathbb{R}^{m\times n},\ B \in \mathbb{R}^{n\times p},\ \lambda \in \mathbb{R}$:

$$\| Ax \| \le \| A \| \| x \| \text{ und } \| AB \| \le \| A \| \cdot \| B \|$$

Bei (iii) wird angenommen, dass "gleichartige" Normen in $\mathbb{R}^{m\times n}$ und $\mathbb{R}^n$ vorliegen. Bezüglich (i) und (ii) sei auch auf [F], Seite 275 verwiesen.

Beweis: Übungsaufgabe. ((iii) für $\| \ \|_2$ trivial; für $\| \ \|_F$ in Beweis von Satz 6 (b) enthalten.)

Satz 6: (a) sei $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ **symmetrisch.** Sei $\lambda_1 = \min \sigma(A)$ und $\lambda_n = \max \sigma(A)$.
(i) $\lambda_1 = \min\limits_{\times\neq 0} R_A(x)$ und $\lambda_n = \max\limits_{x\neq 0} R_A(x)$.

(ii) Für alle $x \in \mathbb{R}^{n\times 1}\backslash\{0\}$: $\begin{array}{lcl} R_A(x) = \lambda_1 & \Leftrightarrow & x \in \mathsf{Eig}\,(A, \lambda_1) \\ R_A(x) = \lambda_n & \Leftrightarrow & x \in \mathsf{Eig}\,(A, \lambda_n) \end{array}$ beachte: λ_1, λ_n speziell!

(b) Sei $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, dann ist

$$\| A \|_2 = \max\left\{\sqrt{\lambda} : \lambda \in \sigma({}^{\mathsf{t}}AA)\right\} = \sqrt{\max\{R_{{}^{\mathsf{t}}AA}(x) : x \in \mathbb{R}^{n\times 1}\backslash\{0\}\}} \le \| A \|_F$$

Man beachte den Zusammenhang mit den Singulärwerten: $\| A \|_2 =$ größter Singulärwert.

Beweis:

(a) Da A symmetrisch ist, gibt es eine Orthonormalbasis $(w_1, \ldots, w_n)$ von Eigenvektoren (Satz 12.22), die wir so so ordnen, dass w_1 zum kleinsten Eigenwert λ_1 und w_n zum größten Eigenwert λ_n gehört: $\lambda_1 \le \cdots \le \lambda_n$, u. U. $\lambda_1 = \lambda_n$!
Mit $x = \sum\limits_{i=1}^{n} x_i w_i$ gilt:

$$\begin{aligned} {}^{\mathsf{t}}xAx &= {}^{\mathsf{t}}\Big(\sum_{i=1}^{n} x_i w_i\Big) A \Big(\sum_{j=1}^{n} x_j w_j\Big) &&= {}^{\mathsf{t}}\Big(\sum_{i=1}^{n} x_i w_i\Big)\Big(\sum_{j=1}^{n} x_j A w_j\Big) \\ &= {}^{\mathsf{t}}\Big(\sum_{i=1}^{n} x_i w_i\Big)\Big(\sum_{j=1}^{n} \lambda_i x_i w_i\Big) &&= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i x_i^2 \end{aligned}$$

und ${}^{\mathsf t}xx = \| \, x \, \|^2$. Daher ist

$$R_A(x) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \underbrace{\frac{x_i^2}{\| \, x \, \|^2}}_{\geq 0} \tag{1}$$

Es folgt $\lambda_1 \leq \lambda_1 \frac{\| \, x \, \|^2}{\| \, x \, \|^2} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_1 \frac{x_i^2}{\| \, x \, \|^2} \underset{\substack{\uparrow \\ \lambda_1 \leq \lambda_i}}{\leq} \underbrace{\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \frac{x_i^2}{\| \, x \, \|^2}}_{=R_A(x)} \underset{\substack{\uparrow \\ \lambda_i \leq \lambda_n}}{\leq} \sum_{i=1}^{n} \lambda_n \frac{x_i^2}{\| \, x \, \|^2} \leq \lambda_n$.

Außerdem ergibt (1) für $x = w_1 : R_A(w_1) = \lambda_1$ und für $x = x_n : R_A(w_n) = \lambda_n$. Insgesamt ergibt sich (i).

zu (ii): Wenn $R_A(x) = \lambda_1$, dann muss in (1) gelten:

$$x_k = 0 \text{ falls } \lambda_k \neq \lambda_1 \ ,$$

denn dann ist $\lambda_1 < \lambda_k$. Es folgt $x = \sum\limits_{\substack{w_i \text{Eigenvektor} \\ \text{zum Eigenwert} \lambda_1}} x_i w_i$ und $Ax = \lambda_1 x$, analog, wenn $R_A(x) = \lambda_n$. Die Umkehrung ist jeweils trivial (vgl. Beispiel 4(d)).

(b) Aufgrund von (a) ergibt sich: $\| \, A \, \|_2^2 = \max\limits_{x \neq 0} \frac{{}^{\mathsf t}x {}^{\mathsf t}AAx}{{}^{\mathsf t}xx} = \max\limits_{x \neq 0} R_{{}^{\mathsf t}AA}(x) = \max \sigma({}^{\mathsf t}AA)$. Zu zeigen ist nun noch $\| \, A \, \|_2 \leq \| \, A \, \|_F$.

Für $x \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ gilt, wenn etwa $A = (a_{ij})$:

$$\| \, Ax \, \|^2 = \sum_{i=1}^{n} \Big(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_i \Big)^2 \leq \sum_{i=1}^{n} \Big(\sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}^2 \Big) \Big(\sum_{j=1}^{n} x_j^2 \Big) = \| \, A \, \|_F^2 \| \, x \, \|^2$$

Dabei ergibt sich die Ungleichung aufgrund der Cauchy-Schwarz-schen Ungleichung für das Standardskalarprodukt der Vektoren ${}^{\mathsf t}A_{i\bullet}$ und x . Es folgt für alle $x \neq 0$;

$$\frac{\| \, Ax \, \|}{\| \, x \, \|} \leq \| \, A \, \|_F \quad \text{bzw.} \quad \| \, A \, \|_2 \leq \| \, A \, \|_F$$ □

Zurück zu Beispiel 4(b):

Dort ist ${}^{\mathsf t}AA = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ s & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & s \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & s \\ s & s^2+1 \end{bmatrix}$, $\chi_{{}^{\mathsf t}AA} = (1+t)((s^2+1)-t) - s^2 = t^2 - (2+s^2)t + 1$ und

$$\sigma({}^{\mathsf t}AA) = \Big\{ \underbrace{1 + \frac{s^2}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{4s^2+s^4}}_{=:\lambda_1}, \underbrace{1 + \frac{s^2}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{4s^2+s^4}}_{\lambda_2} \Big\} \ .$$

Bemerkung: Der Rayleigh-Quotient und die Matrizennormen spielen eine wichtige Rolle bei der sogenannten **"Lokalisierung von Eigenwerten".** Es gilt nämlich (erste grobe Info)

Satz 7: Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $\lambda \in \sigma_{\mathbb{C}}(A)$. Dann gilt

$$\left(\sqrt{\lambda \overline{\lambda}}\right) = |\lambda| \leq \| \, A \, \|_2$$

Der kurze Beweis erfordert die Ausweitung der Theorie ins Komplexe und dann gilt der Satz auch für $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$.

Mehr Info dazu (z. B. Min Max-Prinzip für Eigenwerte) meist in Büchern über allgemeine lineare Algebra und Matrizenrechnung, Volesungen zur Ingenieurmathematik und der Numerik.

Um die Methoden zu erproben, folgt ein völlig andersartiger Beweis von Satz 2 mit Hilfe der Sätze 5 und 6:

Sei $0 \neq A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ und sei v ein Vektor derart, dass $s := \| A \|_2 = \dfrac{\| Av \|}{\| v \|} = \max\limits_{x\neq 0} \dfrac{\| Ax \|}{\| x \|} > 0$.

Wir setzen $v_1 = \dfrac{1}{\| v \|} v$, dann ist $\| Av_1 \| = \| A \|_2 = s$. Sei weiter $u_1 = s^{-1}Av_1$. Dann gilt:

$$Av_1 = s \cdot u_1 \quad \text{und} \quad \| v_1 \| = 1,\ \| u_1 \| = 1$$

Seien $(v_1, \ldots, v_n)$ eine Orthonormalbasis von $\mathbb{R}^{n\times 1}$,$(u_1, \ldots, u_m)$ eine Orthonormalbasis von $\mathbb{R}^{m\times 1}$, und seien $Q = [v_1, \ldots, v_n],\ P = [u_1, \ldots, u_m]$. Dann ist

$$B := {}^{\mathsf{t}}PAQ = \begin{bmatrix} {}^{\mathsf{t}}u_1 \\ \vdots \\ {}^{\mathsf{t}}u_n \end{bmatrix} [Av_1, \ldots, Av_n] = \begin{bmatrix} {}^{\mathsf{t}}u_1 \\ \vdots \\ {}^{\mathsf{t}}u_n \end{bmatrix} [su_1, Av_2, \ldots, Av_n] = \begin{bmatrix} s & {}^{\mathsf{t}}w \\ 0 & \\ \vdots & A_1 \\ 0 & \end{bmatrix} = B \ .$$

Dabei ist ${}^{\mathsf{t}}w = [{}^{\mathsf{t}}u_1Av_2, \ldots, {}^{\mathsf{t}}u_1Av_n]$.

Automatisch ist $w = 0$, denn einerseits ist $B \cdot \begin{bmatrix} s \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s^2 + {}^{\mathsf{t}}ww \\ A_1w \end{bmatrix}$ und somit

$$\| B \begin{bmatrix} s \\ w \end{bmatrix} \|^2 = (s^2 + {}^{\mathsf{t}}ww)^2 + \| A_1w \|^2 \geq (s^2 + {}^{\mathsf{t}}ww)^2 = \| \begin{bmatrix} s \\ w \end{bmatrix} \|^4$$

und daher

$$\| B \|_2 \geq s^2 + {}^{\mathsf{t}}ww.$$

Es ist auch :

$$\begin{aligned} s^2 = \| A \|_2^2 &= \max \sigma({}^{\mathsf{t}}AA) = \max \sigma({}^{\mathsf{t}}(PB{}^{\mathsf{t}}Q)(PB{}^{\mathsf{t}}Q) \\ &= \max \sigma(Q{}^{\mathsf{t}}BB{}^{\mathsf{t}}Q) = \max \sigma({}^{\mathsf{t}}BB) = \| B \|_2 \end{aligned}$$

Es folgt: $w = 0$!

Nun kann mit vollständiger Induktion der Beweis abgeschlossen werden. □

Folgender Zusammenhang besteht zwischen der Singulärwertzerlegung und den Moore-Penrose-Inversen:

Satz 8: Sei $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ und

$$PAQ = \begin{bmatrix} s_r & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & s_1 & \\ 0 & & & 0 \end{bmatrix} \quad \text{mit } P \in O(m), Q \in O(u)$$

die Singulärwertzerlegung von A.

$$\text{Dann gilt: } A^\sharp = QD^\sharp P \text{ mit } D^\sharp = \begin{bmatrix} s_r^{-1} & & \ldots & & 0 \\ & \ddots & & & \\ \vdots & & s_1^{-1} & & \vdots \\ & & & \ddots & \\ 0 & & \ldots & & 0 \end{bmatrix} (\in \mathbb{R}^{n\times m}) \ .$$

Dabei ist $A^\sharp$ wie in Aufgabe (7)(8) erklärt.

Folgerung 9: $\quad A^{\sharp\sharp} = A$ und ${}^{\mathsf{t}}(A^\sharp) = ({}^{\mathsf{t}}A)^\sharp$ □

Für den Beweis von Satz 8 sei auf die bereits oben erwähnten Büchern von Mackens / Voß und von Serre verwiesen.

Bemerkungen

(a) Der Stoff ab Satz 7 wurde in der Vorlesung nicht behandelt und nur teilweise als Info erwähnt.

(b) In dem Buch von Max Köcher: Lineare Algebra und analytische Geometrie, Springer, 1983, S. 199/200; findet man eine Version von Satz 2, die dort für invertierbare A dem französischen Mathematiker E. Cartan (1859 - 1951) zugeschrieben wird. Demnach wäre es wohl angebrachter, von der **Cartan-Normalform** zu sprechen statt den schwer motivierbaren Namen "Singulärwertzerlegung" zu benutzen.