

Н.В. ЛОГИНОВ

СИНГУЛЯРНОЕ  
РАЗЛОЖЕНИЕ  
МАТРИЦ

*Рекомендовано  
Государственным Комитетом РФ  
по высшему образованию  
в качестве учебного пособия для студентов  
высших технических учебных заведений*

ИЗДАТЕЛЬСТВО МГАПИ

1996

## Рецензенты:

кафедра математического моделирования МЭИ  
(зав. кафедрой д-р физ. мат. наук, проф. Ю.А. Дубинский),  
д-р физ.-мат. наук, проф. А.Л. Куницын,  
д-р физ.-мат. наук, проф. В.Л. Попов.

Логинов Н.В. Сингулярное разложение матриц. Учебное пособие — М.: Изд-во МГАИИ, 1996., — 80 с.

ISBN 5-88538-106-2

УДК 519.7

Рассматривается сингулярное разложение произвольной матрицы как основа современных методов решения задачи наименьших квадратов, а также смежных вычислительных задач: определение линейной зависимости между столбцами матрицы, аппроксимация матриц, решение плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений, решение однородных систем, определение собственных векторов матрицы.

Пособие предназначено для студентов высших технических учебных заведений, а также для специалистов, связанных с математическими методами обработки данных.

ISBN 5 88538 106-2

К 1602120000  
К 11(03) Без объявл.

© МГАИИ

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Сингулярное разложение матриц было впервые построено В.В. Воеводиным в конце 60-х годов как инструмент для обеспечения устойчивости псевдорешения и решения задачи наименьших квадратов. Введение сингулярного разложения в практику численного решения задач наименьших квадратов и программная реализация связаны с работами Голуба и Кахана (Golub G.H., Kahana W. Calculating the singular values and pseudoinvers of a matrix. — SIAM J. Numer. Anal., 1965, v.2, n. 3), Рейнша (Golub G.H., Reinsch C. Singular value decomposition and least squares solutions. — Numer. Math., 1970, v.14, n.5) и Уилкинсона [5,6,8].

Предоставляя исследователю не только эффективный численный метод решения задачи наименьших квадратов, но и гораздо большую информацию о решаемой задаче, сингулярное разложение быстро нашло широкое применение в различных областях обработки данных таких, как цифровая обработка изображений, фильтрация сигналов, прикладная экономика и т.п. Словом во всех задачах, которые в итоге сводятся к последовательности решений линейных задач типа: найти  $n$ -мерный вектор  $\hat{x}$ , минимизирующий квадрат евклидовой длины вектора  $Ax - b$ , где  $A$  — матрица размера  $m \times n$ , а  $b$  —  $m$ -мерный вектор.

В последующие годы эта задача обогатилась новыми результатами: разработаны методы решения задачи наименьших квадратов при наличии ограничений как в форме равенств, так и неравенств (Ч. Лоусон, Р. Хенсон [3]).

Не менее важным является то, что сингулярное разложение матриц является также мощным средством для решения плохо обусловленных и однородных систем линейных уравнений, а также таких задач, как определение линейной зависимости между столбцами матрицы, аппроксимация матрицы с помощью более простых матриц, вычисление собственных векторов матрицы, отвечающих заданным собственным значениям.

Несмотря на столь широкие возможности сингулярное разложение матриц до сих пор не нашло адекватного отражения в учебной литературе. Восполнить этот пробел, по искренней надежде автора, и предназначено настоящее пособие.

В пособии подробно рассмотрены только основные результаты, касающиеся сингулярного разложения. Такие вопросы как анализ возму-

щений, алгоритмические детали программной реализации сознательно сокращены, так как требуют специального рассмотрения. Для этого в пособии приведены ссылки на необходимые литературные источники. Приведенные практически в каждом разделе упражнения различной степени сложности должны способствовать не только более глубокому пониманию проблемы, но и формированию более широкого взгляда на прикладные задачи линейной алгебры.

Настоящее пособие возникло как результат многолетнего чтения курса лекций "Численные методы" в Московской Государственной Академии Приборостроения и Информатики для студентов, обучающихся по специальности "Прикладная математика". Пособие может оказаться полезным аспирантам, а также специалистам естественно-научного профиля, связанных с математическими методами обработки данных.

Н. Логинов

"Бессмыслица - искать решение, если оно и так есть. Речь идет о том, как поступать с задачей, которая решения не имеет. Это глубоко принципиальный вопрос ..."

А. Стругацкий, Б. Стругацкий. Понедельник начинается в субботу. Сказка для научных работников младшего возраста. - М.: "Детская литература", 1965

"В мире не происходит ничего, в чем не был бы виден смысл какого-либо максимума или минимума."

Л. Эйлер

## ВВЕДЕНИЕ

Центральной темой настоящего пособия является численное решение систем линейных алгебраических уравнений вида

$$Ax = b, \quad (B-1)$$

где  $A$  - произвольная вещественная матрица размера  $m \times n$ ,  $m$  - число уравнений,  $n$  - число неизвестных,  $x = (x_1, \dots, x_n)^T$  - искомый вектор,  $b = (b_1, \dots, b_m)^T$  - заданный вектор, столбец свободных членов.

В частном случае невырожденной квадратной матрицы,  $m = n$ , решение системы уравнений (B-1) существует, единственно и может быть записано в виде

$$x = A^{-1}b, \quad (B-2)$$

где  $A^{-1}$  - обратная для матрицы  $A$ . На практике обратная матрица строится крайне редко, а решение находится с помощью широко известных прямых или итерационных методов. Если при этом величина

$$\text{cond } A = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|,$$

называемая числом обусловленности, не слишком велика по сравнению с единицей (ниже будет сформулирован соответствующий эмпирический

критерий), то найденное решение будет достаточно близким к точному и малым изменениям в исходных данных, элементах матрицы и свободных членах, будут соответствовать малые изменения в решении. Если число обусловленности велико,  $\text{cond } A \gg 1$ , то найденное решение может оказаться сколь угодно далеким от точного и, очевидно, непригодным для использования.

Если даже в таком простом, казалось бы, случае, как система из  $n$  уравнений с  $n$  неизвестными, не все оказывается столь простым при численном решении, то для систем с прямоугольной матрицей произвольных размера положение еще сложнее. Дело в том, что такие системы могут либо иметь бесчисленное множество решений и нужно иметь численный метод их нахождения, либо вообще не иметь решения в общепринятом смысле слова. В последнем случае требуется "решить" задачу, которая решения не имеет. Приведем два примера задач, сводящихся к решению систем линейных уравнений с прямоугольной матрицей коэффициентов.

В качестве первого примера рассмотрим предельно упрощенную задачу определения числа авиапассажиров по известным значениям тарифа. Пусть воздушное судно совершает рейс по маршруту: аэропорт 0 – аэропорт 2 с промежуточной посадкой в аэропорту 1. Число пассажиров, летящих из аэропорта  $i$ ,  $i = 0, 1$  до аэропорта  $j$ ,  $j = 1, 2$ , обозначим через  $n_{ij}$ . Для рассматриваемого маршрута имеем три переменных  $n_{01}$ ,  $n_{02}$ ,  $n_{12}$ . В соответствии с принятой методикой расчета тариф  $t$  на участке беспосадочного полета пропорционален отношению суммарных издержек  $e$  к числу пассажиров  $n$  на данном участке:  $t = ke/n$ . Здесь  $k$  – коэффициент, учитывающий рентабельность, коэффициент загрузки и т.п. Отсюда получаем систему линейных уравнений

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} n_{01} \\ n_{02} \\ n_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_1 e_1 / t_1 \\ k_2 e_2 / t_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{В-3})$$

Для маршрута, состоящего из  $m$  участков полета, число неизвестных  $n = m(m+1)/2$  будет всегда превышать число уравнений  $m$ . Построенная система линейных уравнений всегда совместна и недоопределенна, т.е. имеет бесчисленное множество решений. Все решения системы (В-3) имеют вид

$$\begin{pmatrix} n_{01} \\ n_{02} \\ n_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 - b_2 \\ b_2 \\ 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

где  $b_i = k_i e_i / t_i$ ,  $i = 1, 2$ , а  $c$  – произвольная постоянная. В реальной постановке задачи необходимо учитывать целочисленность решения и естественные ограничения на пассажироместность воздушного судна.

В качестве второго примера рассмотрим задачу аппроксимации результатов наблюдений – пары значений

$$(x_k, f_k), \quad k = 1, \dots, m,$$

полиномом первой степени. В статистической терминологии этот процесс называется построением *линейной регрессии*. Нашей задачей в этом случае является решение системы уравнений относительно коэффициентов полинома  $a_0, a_1$

$$a_0 + a_1 x_k = f_k, \quad k = 1, \dots, m, \quad (\text{В-4})$$

или в матричной записи

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_m \end{pmatrix}. \quad (\text{В-5})$$

При  $m > 2$  имеем *переопределенную* систему линейных уравнений, решения которой в общем случае не существует.

Так как же поступать с системой уравнений, решения которой не существует? Следуя К.Ф. Гауссу (1795 г.), расширим понятие "решение". Под решением системы (В-5) будем понимать такой набор чисел  $a_0, a_1$ , для которого будет минимальной сумма квадратов ошибок

$$R(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^m e_i^2 = \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1 x_i - f_i)^2, \quad (\text{В-6})$$

или в случае произвольной системы  $Ax = b$

$$R(x_1, \dots, x_n) = \|Ax - b\|_2^2. \quad (\text{В-7})$$

Здесь через  $\|Ax - b\|_2$  обозначена евклидова норма (длина) вектора  $Ax - b$  – т.е. *невязки* системы линейных уравнений. В следующей главе будут подробно пояснены все используемые термины.

Выясним смысл подобного понятия решения на нашем примере. Если предположить, что между переменными  $f_i$  и  $x_i$  существует функциональная зависимость вида

$$f(x) = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x,$$

где  $\hat{a}_0, \hat{a}_1$  — некоторые неизвестные параметры, а процесс наблюдения пар значений  $(x_i, f_i)$  сопровождается случайными ошибками

$$f_i = f(x_i) + e_i,$$

где  $e_i$  — ошибки, представляющие собой случайные величины с одинаковыми дисперсией и распределением, не обязательно нормальным, то сформулированная и решенная Гауссом задача может интерпретироваться как задача оценки параметров  $\hat{a}_0$  и  $\hat{a}_1$ , обеспечивающих минимальное значение дисперсии отклонений. Искомые параметры являются решением так называемой нормальной системы линейных уравнений

$$\begin{aligned} ma_0 + \sum_{i=1}^m x_i a_1 &= \sum_{i=1}^m f_i \\ \sum_{i=1}^m x_i a_0 + \sum_{i=1}^m x_i^2 a_1 &= \sum_{i=1}^m f_i x_i, \end{aligned}$$

которая строится из условия минимума функции  $R(a_0, a_1)$  по  $a_0, a_1$ :

$$\frac{\partial R(a_0, a_1)}{\partial a_0} = 0, \quad \frac{\partial R(a_0, a_1)}{\partial a_1} = 0.$$

Основной результат Гаусс опубликовал в 1821 г. Не используя такие понятия, как дисперсия, и не обращаясь к матричной алгебре, он доказал, что среди класса оценок, которые являются: а) линейными комбинациями исходных данных и б) несмещенными оценками параметров, оценки, получаемые методом наименьших квадратов, обладают наименьшими погрешностями. Самое важное свойство оценок, основанных на методе наименьших квадратов, заключается в независимости от типа распределения. Эти свойства мнк-оценок и сделали метод наименьших квадратов наиболее популярным методом обработки данных. Одним из первых применений метода самим Гауссом явилось уточнение параметров орбит небесных тел с целью (в числе прочих) разработки

алгоритма расчета дня Пасхи (алгоритм — см. Д. Кнут. Искусство программирования. Т.3. Сортировка и поиск).

Идея замены задачи решения системы линейных уравнений задачей минимизации функционала (В-7), называемого функционалом невязки, оказалась продуктивной не только для задач оценки параметров. Если для данного вектора  $x$  значение функционала невязки оказалось равным нулю, то это означает, что  $x$  есть точное решение системы. Если же решение данной системы не существует, то использование метода наименьших квадратов дает вектор, для которого длина вектора невязки минимальна.

Для переопределенной системы общего вида  $Ax = b$  нормальная система линейных уравнений имеет вид

$$A^T Ax = A^T b,$$

решение которой при условии невырожденности матрицы коэффициентов есть

$$\hat{x} = (A^T A)^{-1} A^T b. \quad (\text{В-8})$$

Матрица  $(A^T A)^{-1} A^T$  в выражении (В-8) является частным случаем так называемой псевдообратной для матрицы  $A$ , обозначаемой  $A^+$ ,

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

Решение  $\hat{x}$ , обеспечивающее минимум квадрата длины вектора невязки системы  $Ax = b$ , называется обобщенным решением, или псевдорешением, и может быть записано аналогично (В-2)

$$\hat{x} = A^+ b. \quad (\text{В-9})$$

Главное — псевдообратная матрица существует и единственна для любой матрицы и совпадает с обратной, если та существует. Таким образом, обобщенное решение совпадает с "точным" решением системы линейных уравнений, если она совместна.

Средством для построения псевдообратной матрицы служит сингулярное разложение матриц, являющееся центральным предметом рассмотрения настоящего пособия. Глава 1 представляет собой обзор необходимых сведений из линейной алгебры и теории матриц. Обоснованию и использованию сингулярного разложения посвящены главы 2 и 3. Основной аппарат и общая схема алгоритма вычисления сингулярного разложения рассмотрены в главе 4, там же приведены описания соответствующих стандартных подпрограмм.

## ГЛАВА 1. ЛИНЕЙНАЯ АЛГЕБРА И ТЕОРИЯ МАТРИЦ

В этом разделе напомним без доказательств ряд результатов линейной алгебры и теории матриц, предполагающихся читателю известными. Другие более специальные сведения, приводятся в остальных разделах и упражнениях. Далее будут рассматриваться только векторы действительного  $n$ -мерного пространства и матрицы с действительными элементами.

### §1.1 Векторы и матрицы

Под вектором размерности  $n$  (или  $n$ -вектором)  $x$  понимается упорядоченный набор  $n$  действительных чисел  $x_1, \dots, x_n$ , называемых координатами или компонентами. Далее будем рассматривать векторы как векторы-столбцы. Через  $x^T$  обозначается транспонированный к  $x$  вектор, т.е. вектор-строка.

Система векторов  $a_1, \dots, a_k$  называется линейно зависимой, если существуют скаляры  $c_1, \dots, c_k$ , не все равные нулю и такие, что

$$\sum_{i=1}^k c_i a_i = 0. \quad (1.1.1)$$

Если условие (1.1.1) выполняется только при  $c_1 = \dots = c_k = 0$ , то векторы линейно независимы.

Через  $R^n$  будет обозначаться действительное  $n$ -мерное линейное пространство. Любой набор из  $n$  линейно независимых векторов

$$e_1, \dots, e_n$$

пространства  $R^n$  называется базисом. Для любого  $y \in R^n$  существует единственное разложение

$$y = \sum_{i=1}^n y_i e_i, \quad (1.1.2)$$

где коэффициенты  $y_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  называются координатами вектора  $y$  в базисе  $e_1, \dots, e_n$ .

Скалярным произведением двух  $n$ -мерных векторов  $a$  и  $b$  называется число, обозначаемое через  $(a, b)$  и определяемое равенством

$$(a, b) = a^T b = \sum_{i=1}^n a_i b_i. \quad (1.1.3)$$

Два вектора ортогональны друг к другу, если их скалярное произведение равно нулю. Векторное  $n$ -мерное пространство, в котором введено скалярное произведение векторов согласно (1.1.3), называется действительным евклидовым пространством и обозначается через  $E^n$ .

Если некоторое подмножество  $S$  векторного пространства  $R^n$  замкнуто относительно операций сложения векторов и умножения вектора на число, т.е. для любых  $x, y \in S$  и любого числа  $\alpha$  имеет место

$$x + y \in S, \quad \alpha x \in S,$$

то  $S$  называется подпространством. Максимальное число  $m$  линейно независимых векторов в подпространстве  $S$  называется размерностью подпространства и обозначается  $\dim S$ , т.е.

$$\dim S = m.$$

Система из  $m$  линейно независимых векторов подпространства  $S$  называется базисом подпространства.

Линейной оболочкой системы векторов  $a_1, \dots, a_k$  называется множество всех линейных комбинаций этих векторов, т.е. множество векторов вида

$$\sum_{i=1}^k \beta_i a_i$$

для произвольных чисел  $\beta_i$ . Линейная оболочка системы из  $k$  векторов является подпространством  $S$  размерности  $\dim S \leq k$ .

Под матрицей  $A$  размера  $m \times n$ ,  $m \times n$ -матрицей  $A$ , понимается прямоугольная таблица действительных чисел, имеющая  $m$  строк и  $n$  столбцов. Элемент, стоящий на пересечении  $i$ -й строки и  $j$ -го столбца, обозначается через  $a_{ij}$ . Для явного указания размера матрицы в формулах часто используется обозначение  $A_{m \times n}$ . Прямоугольную таблицу чисел - элементов матрицы принято заключать в прямоугольные, реже в круглые скобки:

$$A_{m \times n} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}.$$

Если число строк  $m$  матрицы равно числу столбцов  $n$ , то матрица называется квадратной, а число  $m = n$  — ее порядком.

Квадратную матрицу  $n$ -го порядка, у которой все элементы, расположенные вне главной диагонали, равны нулю,

$$A = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & d_n \end{bmatrix}$$

будем называть диагональной и обозначать так:

$$A = \text{diag}(d_1, \dots, d_n).$$

Диагональную матрицу с единицами на главной диагонали будем называть единичной и обозначать через  $E$ ,

$$E = \text{diag}(1, \dots, 1).$$

Транспонированной по отношению к  $m \times n$ -матрице  $A$  называется  $n \times m$ -матрица, обозначаемая через  $A^T$ , элемент которой, стоящий на пересечении  $i$ -й строки и  $j$ -го столбца, равен  $a_{ji}$ .

Произведение матриц  $AB$  определено лишь для тех случаев, когда число столбцов левого множителя равно числу строк правого. Размеры матрицы-произведения и ее элементы определяются по правилам:

$$C_{m \times k} = A_{m \times n} B_{n \times k}, \quad c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}.$$

Часто  $m \times n$ -матрицу  $A$  оказывается удобным представлять состоящей из  $n$   $m$ -мерных векторов — ее столбцов

$$A = [a_1 a_2 \dots a_n], \quad \text{где } a_i = \begin{pmatrix} a_{1i} \\ a_{2i} \\ \vdots \\ a_{mi} \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, n,$$

или соответственно из  $m$   $n$ -мерных векторов — ее строк

$$A = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_m \end{bmatrix}, \quad \text{где } a_i = (a_{i1} a_{i2} \dots a_{in}), \quad i = 1, \dots, m.$$

Число линейно независимых строк или столбцов матрицы  $A$  называется ее рангом и обозначается как  $\text{rank } A$ . Ранг матрицы удовлетворяет условиям:

- а)  $\text{rank } A_{m \times n} \leq m, n$ ,
- б)  $\text{rank } (A \cdot B) \leq \text{rank } A \cdot \text{rank } B$ .

Матрица  $A_{m \times n}$  имеет неполный ранг, если

$$\text{rank } A_{m \times n} < \min(m, n),$$

и, напротив, имеет полный ранг, если

$$\text{rank } A_{m \times n} = \min(m, n).$$

Квадратная матрица  $A_{n \times n}$  называется невырожденной, если ее определитель не равен нулю (или  $\text{rank } A = n$ ), и вырожденной, если определитель равен нулю (или  $\text{rank } A < n$ ). Для любой невырожденной матрицы  $A$  существует единственная матрица  $B$  такая, что  $AB = BA = E$ . Такая матрица называется обратной для  $A$  и обозначается через  $A^{-1}$ .

Квадратная матрица  $A$  называется симметричной, если  $A^T = A$ .

Квадратная матрица  $A$  называется нормальной, если она перестановочна со своей транспонированной, т.е.  $AA^T = A^T A$ .

Квадратная матрица  $A$  называется ортогональной, если  $A^{-1} = A^T$ , или  $A^T A = AA^T = E$ .

Матрица  $A$  размера  $m \times n$  называется матрицей с ортогональными столбцами, если  $A^T A = E$ .

Пусть  $x \in R^n$ ,  $y \in R^m$ . Множество векторов  $y$ , для которых равенство  $y = Ax$  имеет место хотя бы для одного вектора  $x$ , называется образом матрицы  $A$  и обозначается  $\text{im } A$

$$\text{im } A = \{ y : y = Ax \}.$$

Образ матрицы есть линейная оболочка ее столбцов. Линейная оболочка строк матрицы  $A$  совпадает с образом матрицы  $A^T$ .

Множество векторов  $x$ , для которых  $Ax = 0$ , называется ядром матрицы  $A$ , или нуль-пространством и обозначается  $\ker A$

$$\ker A = \{ x : Ax = 0 \}.$$

Образ и ядро матрицы представляют собой подпространства, при этом всегда имеют место равенства

$$\dim \ker A = n - \text{rank } A,$$

$$\dim \text{im } A = \text{rank } A.$$

Комплексное число  $\lambda$  называется *собственным значением* ( *собственным числом* ) квадратной матрицы  $A$ , если уравнение

$$Ax = \lambda x \quad (1.1.4)$$

имеет отличное от нуля решение  $x$ , называемое *собственным вектором* матрицы  $A$ , соответствующим собственному значению  $\lambda$ . Собственные значения матрицы  $A$  — это в точности  $n$  (с учетом кратности) корней характеристического уравнения

$$\det(A - \lambda E) = 0. \quad (1.1.5)$$

Определитель является непрерывной функцией элементов матрицы, и то же самое справедливо для собственных значений матрицы, но собственные векторы, вообще говоря, не зависят непрерывно от элементов матрицы.

Совокупность всех собственных значений матрицы  $A$ , взятых с их кратностями, называется ее *спектром* и обозначается через  $\lambda(A)$ , а величина

$$\rho(A) = \max_i |\lambda_i(A)|$$

— ее *спектральным радиусом*.

Следом квадратной матрицы  $A$  называется сумма ее диагональных элементов, обозначаемая через  $\text{tr } A$ . Если  $\lambda_i, i = 1, \dots, n$ , — собственные значения матрицы  $A$ , то для ее следа и определителя имеют место равенства

$$\text{tr } A = \sum_{i=1}^n \lambda_i, \quad \det A = \prod_{i=1}^n \lambda_i.$$

Собственные значения симметричной матрицы действительны, а собственные векторы, отвечающие различным собственным значениям, ортогональны. Если среди  $n$  собственных значений симметричной матрицы число  $\lambda$  встречается  $m$  раз, то линейная оболочка всех собственных векторов, отвечающих собственному значению  $\lambda$ , является  $m$ -мерным подпространством, или *собственным подпространством* матрицы  $A$ , относящимся к собственному значению  $\lambda$ . Для произвольной матрицы собственное подпространство определяется аналогично, однако его размерность может оказаться меньшей, чем кратность собственного значения. Кратность собственного значения как корня характеристического уравнения называется *алгебраической кратностью* в отличие от *геометрической кратности* — размерности соответствующего собственного подпространства.

Две квадратные матрицы  $A$  и  $B$  называются *подобными*, если существует такая невырожденная матрица  $P$ , что

$$P^{-1}AP = B.$$

Подобные матрицы имеют одинаковые собственные значения.

Матрицы  $A$  и  $Q^T A Q$ , где  $Q^{-1} = Q^T$  называются *ортогонально-подобными*.

Для любой симметричной матрицы  $A$  существует такая ортогональная матрица  $Q$ , что

$$Q^T A Q = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n), \quad (1.1.6)$$

где  $\lambda_i$  — собственные значения матрицы  $A$ , а столбцами матрицы  $Q$  являются собственные векторы, отвечающие этим собственным значениям. Таким образом, симметричная матрица ортогонально-подобна диагональной матрице. Для любой симметричной матрицы порядка  $n$  всегда можно построить набор из ровно  $n$  ортонормированных собственных векторов.

В общем случае для произвольной квадратной матрицы  $A$  существует такая невырожденная матрица  $P$ , что

$$P^{-1}AP = J, \quad (1.1.7)$$

где  $J$  — каноническая жорданова форма матрицы  $A$ . Матрица  $J$  — это блочно-диагональная матрица:

$$J = \begin{bmatrix} J_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & J_n \end{bmatrix}, \quad (1.1.8)$$

где  $J_i$  — или  $1 \times 1$ -матрица, или двухдиагональная матрица вида

$$J_i = \begin{bmatrix} \lambda & 1 & & 0 \\ & \lambda & 1 & \\ & & \ddots & 1 \\ 0 & & & \lambda \end{bmatrix}. \quad (1.1.9)$$

Такая матрица  $J_i$  называется *жордановой клеткой*, соответствующей собственному значению  $\lambda$  матрицы  $A$ . Порядок жордановой клетки не превышает кратности  $\lambda$ .



Одно и то же собственное значение могут иметь сразу несколько жордановых клеток. Если все собственные значения матрицы  $A$  различны, то ее жорданова форма диагональна и столбцы осуществляющей подобие матрицы  $P$  являются  $n$  линейно независимыми собственными векторами матрицы  $A$ . В общем случае максимальное число линейно независимых собственных векторов матрицы  $A$  в точности равно числу жордановых клеток в ее канонической форме.

Если  $A$  — симметричная матрица, то для квадратичной формы  $x^T A x$  выполняется неравенство

$$\lambda_1 x^T x \leq x^T A x \leq \lambda_n x^T x, \quad (1.1.10)$$

где  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$  — собственные значения матрицы  $A$ .

Если матрица  $A$  удовлетворяет условию

$$x^T A x \geq 0 \quad \text{для любого } x \in \mathbb{R}^n, \quad (1.1.11)$$

то матрица  $A$  называется *положительно полуопределенной*. Матрица  $A$  называется *положительно определенной*, если для  $x \neq 0$  в (1.1.11) имеет строгое неравенство. Если  $A$  — положительно (полу) определенная симметричная матрица, то ее собственные значения положительны (неотрицательны). Отметим, что если матрица  $A$  не симметрична, то она положительно (полу)определена тогда и только тогда, когда положительно (полу)определена симметричная матрица  $A + A^T$ .

## §1.2 Нормы векторов и матриц

*Нормой вектора  $x$  на  $\mathbb{R}^n$*  называется функция с действительными значениями, определенная на  $\mathbb{R}^n$  и обозначаемая обычно  $\|x\|$ , такая, что для любых  $x, y \in \mathbb{R}^n$  и любого числа  $\alpha$

- 1).  $\|x\| \geq 0$ ,  $\|x\| = 0$  тогда и только тогда, когда  $x = 0$ ;
- 2).  $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$  для любого скаляра  $\alpha$ ;
- 3).  $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ .

Нормы, являющиеся обобщением евклидовой длины вектора, могут быть определены различными способами, однако чаще всего в вычислительной математике используются нормы из так называемого Гельдера семейства норм

$$\|x\|_p = \left( \sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p} \quad (1.2.1)$$

для значений  $p = 1, 2, \infty$ :

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i| \quad \text{— октаэдрическая норма;}$$

$$\|x\|_2 = \left( \sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2} \quad \text{— евклидова норма;}$$

$$\|x\|_\infty = \max_i |x_i| \quad \text{— кубическая норма.}$$

Все эти нормы в определенном смысле эквивалентны: если последовательность векторов  $x_k$  сходится в смысле некоторой нормы  $\|\cdot\|$  к вектору  $x^*$ , то она сходится к вектору  $x^*$  и в смысле любой другой нормы. Поясним это. Пусть  $d_k = x_k - x^*$ ; в этом случае по предположению  $\|d_k\| \rightarrow 0$  при  $k \rightarrow \infty$ . Пусть теперь  $\|x\|'$  — другая норма; эквивалентность означает, что тогда  $\|d_k\|' \rightarrow 0$ .

Это не означает, что все нормы одинаково пригодны для вычислений; в этом отношении между различными нормами существует большое различие.

Замечено даже, что в большинстве случаев доказательств сходимости удобнее использовать норму  $p = \infty$ , в то время как  $p = 1$ , по-видимому, дает наилучшую норму для изучения расходимости (см. А.М. Островский. Решение уравнений и систем уравнений. Пер. с аягл. — М.: ИЛ, 1963).

*Нормой матрицы  $A$*  называется функция с действительными значениями, определенная на множестве всех квадратных матриц и обозначаемая обычно  $\|A\|$ , такая, что для всех квадратных матриц  $A, B$  одного и того же порядка и любого числа  $\alpha$

- 1).  $\|A\| \geq 0$ ,  $\|A\| = 0$  тогда и только тогда, когда  $A = 0$ ;
- 2).  $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$  для любого скаляра  $\alpha$ ;
- 3).  $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ .

Норма матрицы  $\|A\|$  называется *согласованной* с нормой вектора  $\|x\|$ , если для любых  $A$  и  $x$

$$\|Ax\| \leq \|A\| \|x\| \quad (1.2.2)$$

и для любых матриц  $A, B$  справедливо неравенство

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\|. \quad (1.2.3)$$

Если матричная норма не удовлетворяет последнему условию, то она не может быть согласованной ни с какой нормой вектора, однако с одной

и той же нормой вектора могут быть согласованы различные нормы матриц.

Если для любой матрицы  $A$  найдется такой ненулевой вектор  $x$ , что  $\|Ax\| = \|A\| \cdot \|x\|$ , то согласованная норма  $\|A\|$  называется подчиненной векторной норме  $\|x\|$ . Для любой векторной нормы существует по крайней мере одна подчиненная норма матрицы, а именно норма

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}. \quad (1.2.4)$$

Приведем выражения для норм матриц, согласованных и подчиненных рассмотренным выше векторным нормам.

1). Октаэдрическая норма:

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|, \quad \|A\|_1 = \max_k \sum_{i=1}^n |a_{ik}|.$$

Так введенная матричная норма является согласованной и подчиненной векторной норме  $\|\cdot\|_1$ .

2). Кубическая норма:

$$\|x\|_\infty = \max_i |x_i|, \quad \|A\|_\infty = \max_i \sum_{k=1}^n |a_{ik}|.$$

Так введенная матричная норма является согласованной и подчиненной векторной норме  $\|\cdot\|_\infty$ .

3). Евклидова норма:

$$\|x\|_2 = \left( \sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2}.$$

Евклидова норма матрицы (норма Шура, норма Фробениуса, норма Шмидта):

$$\|A\|_E = \left( \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{1/2} = (\text{tr } (A^T A))^{1/2}. \quad (1.2.5)$$

Эта норма согласована с векторной нормой, но не подчинена ей.

В частности, для единичной  $n \times n$ -матрицы

$$\|A\|_E = \sqrt{n}.$$

Спектральная норма матрицы называют положительное значение квадратного корня из наибольшего собственного числа матрицы  $A^T A$ :

$$\|A\|_2 = \left( \max_i \lambda_i(A^T A) \right)^{1/2}. \quad (1.2.6)$$

Эта норма согласована с нормой вектора  $\|\cdot\|_2$  и подчинена ей.

Евклидова норма вектора может быть выражена через скалярное произведение:

$$\|x\|_2 = (x, x)^{1/2}.$$

Евклидова норма вектора инвариантна относительно ортогонального преобразования:

$$\|Qx\|_2 = \|x\|_2 \quad \text{при } Q^{-1} = Q^T.$$

Спектральный радиус матрицы  $A$  не превосходит любой согласованной нормы матрицы

$$\rho(A) \leq \|A\|. \quad (1.2.7)$$

Числом обусловленности невырожденной матрицы  $A$  называется число

$$\text{cond } A = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|. \quad (1.2.8)$$

Число обусловленности, таким образом, зависит от используемой нормы. Для спектральной нормы число обусловленности имеет вид

$$\text{cond}_2 A = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}, \quad (1.2.9)$$

где

$$\sigma_1 = \max_i \lambda_i(A^T A), \quad \sigma_n = \min_i \lambda_i(A^T A).$$

Для вырожденных матриц,  $\sigma_n = 0$ , число обусловленности полагается равным бесконечности.

Для любой матрицы  $A$  справедливо неравенство  $\text{cond } A \geq 1$ , причем равенство имеет место только для ортогональной матрицы.

## ГЛАВА 2. СИНГУЛЯРНЫЕ ЧИСЛА И СИНГУЛЯРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ МАТРИЦ

### §2.1 Сингулярные числа

Пусть  $A$  — произвольная прямоугольная матрица размера  $m \times n$ , где  $m \geq n$ . Рассмотрим собственные значения и собственные векторы симметричных матриц  $A^T A$  и  $AA^T$  размера  $n \times n$  и  $m \times m$  соответственно. Отметим прежде всего, что эти матрицы — положительно полуопределенные. В самом деле, для любых  $n$ -вектора  $x$  и  $m$ -вектора  $y$  имеем

$$(x, A^T A x) = (Ax, Ax) = \|Ax\|_2^2 \geq 0,$$

$$(y, AA^T y) = (A^T y, A^T y) = \|A^T y\|_2^2 \geq 0.$$

В силу положительной полуопределенности матрицы  $A^T A$  и  $AA^T$  имеют неотрицательные собственные значения.

Пусть  $\sigma_i^2$  и  $x_{(i)}$ ,  $i = 1, \dots, n$ , — собственные значения и собственные векторы матрицы  $A^T A$ :

$$A^T A \cdot x_{(i)} = \sigma_i^2 \cdot x_{(i)}.$$

При этом в силу симметричности матрицы

$$(x_{(i)}, x_{(j)}) = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, n.$$

Здесь через  $\delta_{ij}$  обозначен символ Кронекера

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{при } i = j, \\ 0, & \text{при } i \neq j. \end{cases}$$

Рассмотрим векторы  $y_{(i)} = Ax_{(i)}$ ,  $i = 1, \dots, n$ . Имеем

$$(y_{(i)}, y_{(j)}) = (Ax_{(i)}, Ax_{(j)}) = (x_{(i)}, A^T Ax_{(j)}) = \sigma_j^2 \delta_{ij}.$$

Отсюда  $\|y_{(i)}\| = \|Ax_{(i)}\| = \sigma_i$ . Здесь и далее, если не оговорено специально, под нормой вектора понимается евклидова норма. Таким образом, вектор  $y_{(i)}$  отличен от нуля тогда и только тогда, когда собственное значение  $\sigma_i^2$  матрицы  $A^T A$  отлично от нуля. Покажем теперь, что вектор  $y_{(i)} = Ax_{(i)}$  является собственным вектором матрицы  $AA^T$ .

В самом деле

$$AA^T \cdot y_{(i)} = AA^T Ax_{(i)} = A(A^T A \cdot x_{(i)}) = \sigma_i^2 \cdot Ax_{(i)} = \sigma_i^2 \cdot y_{(i)}.$$

Отсюда следует, что матрицы  $A^T A$  и  $AA^T$  имеют одни и те же отличные от нуля собственные значения.

Арифметические значения квадратных корней из собственных значений матрицы  $A^T A$  называются *сингулярными числами* матрицы  $A$ .

Пусть  $r = \text{rank } A \leq n$ . Запишем сингулярные числа  $\sigma_i$  в порядке невозрастания:

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \dots = \sigma_n = 0.$$

Для случая  $m = n$  и  $r = n$  имеем для спектральной нормы матрицы и числа обусловленности

$$\|A\| = \sigma_1, \quad \text{cond } A = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}.$$

В случае матриц произвольных размеров  $m$  и  $n$  для числа обусловленности матрицы будем использовать то же выражение, считая число обусловленности равным бесконечности для  $\sigma_n = 0$  или вырожденной матрицы.

Отметим один частный случай. Пусть матрица  $A$  — симметричная, тогда  $A^T A = A^2$  и

$$\sigma_i = |\lambda_i|, \quad i = 1, \dots, n,$$

где  $\lambda_i$  — собственные числа матрицы  $A$ .

### §2.2 Теорема о сингулярном разложении

В книге Дж. Форсайта [1] приведено доказательство теоремы о сингулярном разложении произвольной квадратной матрицы

$$A_{n \times n} = U_{n \times n} S_{n \times n} V_{n \times n}^T.$$

Для произвольной прямоугольной матрицы аналогичное утверждение можно найти в книге Ч. Лоусона и Р. Хенсона [3]

$$A_{m \times n} = U_{m \times m} S_{n \times n} V_{n \times n}^T.$$

Недостатком такого разложения является необходимость выделения дополнительной памяти машины для хранения  $m \times m$ -матрицы  $U$ .

Сформулируем и докажем теорему о сингулярном разложении произвольной прямоугольной матрицы в форме, соответствующей наиболее распространенным стандартным подпрограммам (см. §4.4) сингулярного разложения

$$A_{m \times n} = U_{m \times n} S_{n \times n} V_{n \times n}^T.$$

**Теорема 2.2.1.** Для произвольной матрицы  $A$  размера  $m \times n$ ,  $m \geq n$ , ранга  $r$  существуют  $m \times n$ -матрица  $U$  с ортогональными столбцами, ортогональная  $n \times n$ -матрица  $V$  и диагональная  $n \times n$ -матрица  $S$  такие, что

$$U^T A V = S, \quad A = U S V^T. \quad (2.2.1)$$

Элементами матрицы  $S$  являются сингулярные числа  $\sigma_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , матрицы  $A$

**Доказательство.** В силу симметричности и положительной полуопределенности матрицы  $AA^T$  существует такая ортогональная  $m \times m$ -матрица  $P$ , что

$$P^T A A^T P = \begin{bmatrix} S^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.2.2)$$

где  $S^2$  — диагональная матрица порядка  $n$ , элементами главной диагонали которой являются собственные значения матрицы  $A^T A$ , т.е. квадраты сингулярных чисел матрицы  $A$ . Представим матрицу  $P^T A$  в блочном виде

$$P^T A = \begin{bmatrix} F \\ X \end{bmatrix},$$

где  $F$  и  $X$  — матрицы размера  $n \times n$  и  $(m-n) \times (m-n)$  соответственно. Покажем, что  $X$  — нулевая матрица, т.е. матрица, все элементы которой равны нулю. Представим левую часть равенства (2.2.2) в виде

$$P^T A A^T P = \begin{bmatrix} F \\ X \end{bmatrix} [F^T \ X^T] = \begin{bmatrix} F F^T & F X^T \\ X F^T & X X^T \end{bmatrix}.$$

Из сравнения полученной матрицы с правой частью выражения (2.2.2), получаем

$$F F^T = S^2, \quad F X^T = 0,$$

$$X F^T = 0, \quad X X^T = 0.$$

Из равенства  $X X^T = 0$  следует  $X = 0$  и, следовательно,

$$P^T A = \begin{bmatrix} F \\ 0 \end{bmatrix}, \quad F F^T = S^2. \quad (2.2.3)$$

Рассмотрим равенство

$$F F^T = S^2 = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2). \quad (2.2.4)$$

Обозначим через  $f_i, i = 1, \dots, n$ , строки матрицы  $F$ . Тогда (2.2.4) эквивалентно равенствам

$$(f_i, f_i) = \begin{cases} \sigma_i^2, & \text{при } i = 1, \dots, r; \\ 0, & \text{при } i = r+1, \dots, n. \end{cases}$$

Т.е.  $f_i = 0$  для  $i = r+1, \dots, n$ . Введем векторы — строки  $u_i$  равенствами

$$u_i = \frac{1}{\sigma_i} f_i, \quad i = 1, \dots, r,$$

а строки  $u_{r+1}, \dots, u_n$  выберем так, чтобы все  $n$  строк были ортонормированными. Составим теперь из строк  $u_1, \dots, u_n$  ортогональную матрицу  $V^T$ . Очевидно, что  $F = S V^T$  и равенство (2.2.3) принимает вид

$$P^T A = \begin{bmatrix} S V^T \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Представим  $m \times m$ -матрицу  $P$  в блочном виде

$$P = [U \ Z],$$

где  $U$  и  $Z$  — матрицы размера соответственно  $m \times n$  и  $m \times (m-n)$ . Тогда

$$[U \ Z]^T A = \begin{bmatrix} U^T A \\ Z^T A \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S V^T \\ 0 \end{bmatrix},$$

откуда следуют равенства

$$U^T A = S V^T, \quad (2.2.5)$$

$$Z^T A = 0. \quad (2.2.6)$$

Из равенства (2.2.5) имеем

$$U U^T A = U S V^T. \quad (2.2.7)$$

Из ортогональности матрицы  $P$  следует  $U U^T + Z Z^T = E$ , поэтому из (2.2.7) и (2.2.6) получаем

$$A = U S V^T. \blacksquare$$

Отметим три важных следствия из теоремы.

**Следствие 1.** Из равенства

$$P^T A = \begin{bmatrix} SV^T \\ 0 \end{bmatrix}$$

следует

$$(P^T A)^T (P^T A) = A^T A = [VS \ 0] \begin{bmatrix} SV^T \\ 0 \end{bmatrix} = VS^2 V^T,$$

или

$$(A^T A)V = VS^2, \quad (2.2.8)$$

или, обозначая через  $v_i$  столбцы матрицы  $V$ ,

$$A^T A \cdot v_i = \sigma_i^2 \cdot v_i. \quad \blacksquare \quad (2.2.9)$$

**Следствие 2.** Из равенства  $A = USV^T$  следует  $AV = US$ , и

$$Av_i = \sigma_i v_i.$$

Отсюда получаем выражения для столбцов матрицы  $U$ , соответствующих ненулевым сингулярным числам

$$u_i = \frac{1}{\sigma_i} Av_i. \quad (2.2.10)$$

Выше было показано, что  $u_i$  представляют собой собственные векторы матрицы  $AA^T$ .  $\blacksquare$

**Следствие 3.** Из равенств  $Av_i = \sigma_i v_i$  следует для  $\sigma_i = 0$

$$Av_i = 0, \quad (2.2.11)$$

т.е. столбцы матрицы  $V$ , соответствующие нулевым сингулярным числам, составляют ортонормированный базис ядра матрицы  $A$ , размерность которого равна  $n - r$ .  $\blacksquare$

Оставляя пока в стороне вопрос о практическом нахождении сингулярного разложения матрицы, отметим здесь, что приведенные выше свойства по крайней мере теоретически позволяют построить сингулярное разложение произвольной матрицы. Для этого сначала определяются собственные значения матрицы  $A^T A$ , т.е. квадраты сингулярных чисел, затем строится матрица  $V$  из собственных векторов матрицы  $A^T A$  и, наконец, определяется матрица  $U$  в соответствии с

равенствами (2.2.10). При этом столбцы, отвечающие нулевым сингулярным числам строятся с помощью процедуры Грама – Шмидта.

Рассмотрим пример построения сингулярного разложения матрицы

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Матрица  $A^T A$  имеет вид

$$A^T A = \begin{bmatrix} 2.0 & 0.0 & 2.0 \\ 0.0 & 2.0 & 2.0 \\ 2.0 & 2.0 & 4.0 \end{bmatrix}.$$

Собственные значения этой матрицы есть

$$\sigma_1^2 = 6.0, \quad \sigma_2^2 = 2.0, \quad \sigma_3^2 = 0.0.$$

Ранг матрицы  $A$  равен 2, а сингулярные числа (с точностью до 4-х знаков):

$$\sigma_1 = 2.4495, \quad \sigma_2 = 1.4142, \quad \sigma_3 = 0.0000.$$

Столбцы матрицы  $V$  находим как собственные векторы матрицы  $A^T A$

$$V = \begin{bmatrix} 0.4082 & -0.7071 & 0.5774 \\ 0.4082 & 0.7071 & 0.5774 \\ 0.8164 & 0.0000 & -0.5774 \end{bmatrix}.$$

Для определения столбцов матрицы  $U$ , соответствующих ненулевым сингулярным числам, используем соотношения (2.2.10), а третий столбец находим из условия ортогональности первым двум.

$$U = \begin{bmatrix} 0.5000 & -0.5000 & 0.7071 \\ 0.5000 & 0.5000 & 0.0000 \\ 0.5000 & 0.5000 & 0.0000 \\ 0.5000 & -0.5000 & -0.7071 \end{bmatrix}.$$

В качестве второго примера рассмотрим матрицу (см. [4])

$$A = \begin{bmatrix} 1.0 & 1.0 & 1.0 \\ 10^9 & -1.0 & 1.0 \\ 10^9 & 1.0 & 0.0 \end{bmatrix}.$$

Составляющие сингулярного разложения есть

$$\sigma_1 = 1414213562.3731, \quad \sigma_2 = 1.7321, \quad \sigma_3 = 1.2247,$$

$$V = \begin{bmatrix} -1.0000 & 0.0000 & 0.0000 \\ 0.0000 & 1.0000 & 0.0000 \\ 0.0000 & 0.0000 & 1.0000 \end{bmatrix},$$

$$U = \begin{bmatrix} 0.0000 & 0.5774 & -0.8165 \\ -0.7071 & -0.5774 & -0.4082 \\ -0.7071 & 0.5774 & 0.4082 \end{bmatrix}.$$

Этот пример характерен следующим. Если  $A$  является матрицей коэффициентов системы линейных уравнений, то в этом случае система уравнений очень плохо обусловлена,  $\text{cond } A \approx 10^9$ . Если первый столбец разделить на  $10^9$ , т.е. ввести масштабирование неизвестной  $x_1$ , то матрица станет уравновешенной – максимальные элементы каждой строки и каждого столбца будут примерно одной величины

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-9} & 1.0 & 1.0 \\ 1 & -1.0 & 1.0 \\ 1 & 1.0 & 0.0 \end{bmatrix}.$$

Сингулярные числа теперь

$$\sigma_1 = 1.7321, \quad \sigma_2 = 1.7321, \quad \sigma_3 = 1.0000.$$

и система уравнений становится хорошо обусловленной,  $\text{cond } A \approx 1.7$ .

Заметим, что современные программы решения систем линейных уравнений [4] включают в себя оценку числа обусловленности матрицы с помощью упрощенной процедуры сингулярного разложения.

### Упражнения

2.1. Построить сингулярное разложение матриц

$$1). \quad A = \begin{bmatrix} a & 0 & a \\ a & -a & 0 \\ 0 & -a & -a \end{bmatrix}, \quad 2). \quad A = \begin{bmatrix} a & a & a \\ b & b & b \\ c & c & c \end{bmatrix},$$

где  $a, b, c$  – произвольные числа,  $a^2 + b^2 + c^2 = 1$ .

2.2. Доказать, что для любого ненулевого  $n$ -вектора  $x$

$$\sigma_n \leq \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \leq \sigma_1,$$

где  $\sigma_n$  и  $\sigma_1$  – соответственно наименьшее и наибольшее сингулярные числа  $n \times n$ -матрицы  $A$ .

2.3 [3]. Пусть  $\sigma_1, \dots, \sigma_r$  – ненулевые сингулярные числа  $m \times n$ -матрицы  $A$  ранга  $r$ . Доказать, что для евклидовой нормы матрицы  $A$  имеет место равенство

$$\|A\|_E = \left( \sum_{i=1}^r \sigma_i^2 \right)^{1/2}.$$

2.4. Найти сингулярное разложение  $n$ -вектора  $a$  (вектор – столбец).

2.5. Найти сингулярное разложение  $n$ -вектора  $a$  (вектор – строки).

2.6. Пусть  $A$  – матрица размера  $m \times n$ . Найти сингулярные разложения матриц  $A^T A$  и  $AA^T$ .

2.7 [1]. Пусть  $A$  – матрица порядка  $n$ . Доказать, что определитель матрицы  $A$  удовлетворяет условию

$$|\det A| = \prod_{i=1}^n \sigma_i.$$

2.8 [1]. Для произвольной невырожденной матрицы  $A$  найти расстояние до ближайшей вырожденной матрицы  $B$ , т.е. найти минимум величины  $\|A - B\|$  для всех вырожденных матриц  $B$ . Является ли ближайшая матрица единственной?

2.9 [1]. Для произвольной вырожденной матрицы  $A$  найти расстояние до ближайшей невырожденной матрицы  $B$ .

### §2.3 Обусловленность сингулярного разложения

При решении практических задач, в том числе использующих сингулярное разложение, исходные данные, как правило, содержат неопределенность, вызванную ограниченной точностью измерений либо вычислений. Кроме того, сам процесс численного решения сопровождается неизбежными погрешностями округления вследствие ограниченности разрядной сетки вычислительного устройства.

Все это приводит к тому, что вместо исходной математической задачи, скажем, нахождения сингулярных чисел  $\sigma_i$  матрицы  $A$ , решается

"возмущенная" задача нахождения сингулярных чисел  $\tilde{\sigma}_i$  "возмущенной" матрицы  $\tilde{A}$ , отличающейся от исходной малым "возмущением"  $\Delta A$

$$\tilde{A} = A + \Delta A. \quad (2.3.1)$$

Решение возмущенной задачи

$$\tilde{\sigma}_i = \sigma_i + \Delta\sigma_i \quad (2.3.2)$$

содержит "возмущение"  $\Delta\sigma_i$ .

Возникает задача оценки возмущения решения по известной оценке возмущений исходных данных. В связи с решением этой задачи используются понятия "обусловленность" и "устойчивость". Поясним их смысл.

Если малым возмущениям исходных данных  $\Delta A$  соответствуют малые возмущения решения, то задачу называют хорошо обусловленной, в противном случае – плохо обусловленной, чувствительной к малым ошибкам. Что касается плохо обусловленных задач, то удовлетворительное решение их не может быть получено практически никаким методом. В случае хорошо обусловленной задачи ситуация иная. Для одного метода малые погрешности в исходных данных или ошибки округления могут привести к большим погрешностям в решении. Для другого погрешность решения может оказаться сопоставимой с погрешностями в исходных данных. В первом случае говорят о неустойчивости решения, во втором – об устойчивости решения, или устойчивом методе решения.

Основной результат, касающийся возмущений сингулярных чисел, можно сформулировать следующим образом [2]: сингулярные числа матрицы очень устойчивы к изменению ее элементов; возмущения элементов матрицы приводят к возмущениям той же или меньшей величины в ее сингулярных числах. Эта формулировка характеризует хорошую обусловленность задачи и численную устойчивость метода нахождения сингулярных чисел, основанного, как будет показано ниже, на использовании ортогональных преобразований.

**Теорема 2.3.1 [2].** Пусть  $A, B, D$  – матрицы размера  $m \times n$  и  $D = B - A$ . Обозначим сингулярные числа этих матриц, упорядоченные в порядке невозрастания, соответственно через  $\alpha_i, \beta_i, \delta_i, i = 1, \dots, n$ . Тогда справедливы оценки

$$|\beta_i - \alpha_i| \leq \delta_i \equiv \|D\|, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.3.3)$$

$$\sum_{i=1}^n (\beta_i - \alpha_i)^2 \leq \sum_{i=1}^n \delta_i^2 \equiv \|D\|_E^2. \quad (2.3.4)$$

Оценка (2.3.4) предпочтительнее, поскольку не требует детальной информации о матрице возмущений.

В качестве иллюстрации приведем пример оценки возмущения для матрицы

$$A = \begin{bmatrix} 1.0000 & -0.4999 & -0.4999 \\ -0.4999 & 1.0000 & -0.4999 \\ -0.4999 & -0.4999 & 1.0000 \end{bmatrix},$$

сингулярные числа которой есть

$$\sigma_1 = 1.4999, \quad \sigma_2 = 1.4999, \quad \sigma_3 = 0.0002.$$

Пусть матрица возмущений  $\Delta A = \tilde{A} - A$  имеет вид

$$\Delta A = \begin{bmatrix} 0.0000 & 0.0001 & 0.0001 \\ 0.0001 & 0.0000 & 0.0001 \\ 0.0001 & 0.0001 & 0.0000 \end{bmatrix}, \quad \|\tilde{A}\|_E = 0.0002.$$

Сингулярное разложение матрицы  $\tilde{A}$  дает  $\tilde{\sigma}_{\max} = 0.0002$ .

Сингулярные числа возмущенной матрицы равны

$$\tilde{\sigma}_1 = 1.4998, \quad \tilde{\sigma}_2 = 1.4998, \quad \tilde{\sigma}_3 = 0.0004.$$

В полном соответствии с утверждением теоремы абсолютные погрешности возмущений сингулярных чисел

$$|\tilde{\sigma}_1 - \sigma_1| = 0.0001, \quad |\tilde{\sigma}_2 - \sigma_2| = 0.0001, \quad |\tilde{\sigma}_3 - \sigma_3| = 0.0002$$

удовлетворяют неравенствам (2.3.3) и (2.3.4).

Для оценки обусловленности сингулярного разложения в целом отметим результат обратного анализа погрешности. Суть обратного анализа, разработанного в первую очередь Дж. Уилкинсоном, состоит в оценке таких малых возмущений в исходных данных, что найденное решение можно представить как точное решение возмущенной задачи. Применительно к задаче сингулярного разложения обратный анализ [8] дает: найденное разложение  $USV^T$  является точным для некоторой возмущенной матрицы  $\tilde{A} = A + \Delta A$

$$USV^T = A + \Delta A, \quad (2.3.5)$$

где для матрицы возмущения  $\Delta A$  имеет место оценка

$$\|\Delta A\|_E = c \cdot \text{macheps} \cdot \|A\|_2, \quad (2.3.6)$$

где  $c$  — некоторая константа,  $\text{macheps}$  — машинная точность, т.е. такое наименьшее положительное число, для которого выполняется условие  $1 + \text{macheps} > 1$ , а  $\|A\|_2 = \sigma_1$ .

Следует заметить, что столбцы матриц  $U$  и  $V$ , соответствующие нулевым или кратным сингулярным числам, не всегда определяются единственным образом. В этом нетрудно убедиться, проводя вычисления на разных ЭВМ или с различной длиной разрядной сетки.

### Упражнение

2.10 [2]. Даны  $m \times n$ -матрица  $A$  ранга  $r$  и целое неотрицательное число  $k$ ,  $k < r$ . Найти  $m \times n$ -матрицу  $A$  ранга  $k$ , минимизирующую  $\|B - A\|_E$ .

### §2.4 Линейная зависимость столбцов матрицы

Отметим еще одно важное для приложений свойство сингулярного разложения матриц.

В рассмотренном выше примере значение одного из сингулярных чисел, а именно,  $\sigma_3$ , близко к нулю. Если все внедиагональные элементы матрицы взять равными 0.5, то  $\sigma_3$  будет строго равно нулю, что свидетельствует о линейной зависимости между столбцами матрицы. В ряде прикладных задач обработки данных важно знать эту зависимость, однако обнаружить ее визуально очень трудно. Покажем, что линейная зависимость между столбцами определяется столбцами матрицы  $V$ .

Пусть  $\sigma_k$  — сингулярное число матрицы  $A$ , малое по сравнению с наибольшим сингулярным числом  $\sigma_{\max}$ . Из разложения  $A = USV^T$  следует  $AV = US$ , что дает для  $k$ -го столбца

$$Av_k = \sigma_k u_k, \quad (2.4.1)$$

откуда в силу нормированности столбцов матрицы  $U$

$$\|Av_k\| = \sigma_k \approx 0.$$

Малость отношения  $\sigma_k/\sigma_{\max}$  может быть принята в качестве критерия практически линейной зависимости между столбцами матрицы  $A$

$$Av_k \approx 0. \quad (2.4.2)$$

При этом координаты вектора  $u_k$  представляют собой коэффициенты линейной комбинации столбцов  $A$ , почти равной нулю. Для примера из §2.3 такая комбинация указывается столбцом  $v_3$ .

$$V = \begin{bmatrix} 0.6341 & -0.5144 & -0.5774 \\ 0.1284 & 0.8063 & -0.5774 \\ -0.7625 & -0.2920 & -0.5774 \end{bmatrix},$$

$$-0.5774 \begin{pmatrix} 1.0000 \\ -0.4999 \\ -0.4999 \end{pmatrix} - 0.5774 \begin{pmatrix} -0.4999 \\ 1.0000 \\ -0.4999 \end{pmatrix} - 0.5774 \begin{pmatrix} -0.4999 \\ -0.4999 \\ 1.0000 \end{pmatrix} \approx 0,$$

или

$$a_3 \approx -a_1 - a_2.$$

Рассмотрим другой пример, где линейная зависимость между столбцами очевидна:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Эта матрица уже рассматривалась выше и для нее были получены сингулярные числа

$$\sigma_1 = 2.4495, \quad \sigma_2 = 1.4142, \quad \sigma_3 = 0.0000$$

и матрица  $V$

$$V = \begin{bmatrix} 0.4082 & -0.7071 & 0.5774 \\ 0.4082 & 0.7071 & 0.5774 \\ 0.8164 & 0.0000 & -0.5774 \end{bmatrix}.$$

Столбец  $v_3$  дает искомую линейную зависимость

$$a_3 = a_1 + a_2.$$

### §2.5 Аппроксимация матриц

Возьмем сингулярное разложение матрицы  $A = USV^T$  ранга  $r \leq n$  в эквивалентной форме

$$A = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T, \quad (2.5.1)$$



или

$$A = \sum_{i=1}^n \sigma_i E_i, \quad (2.5.2)$$

где

$$E_i = u_i v_i^T \quad (2.5.3)$$

представляют собой матрицы ранга 1, а  $\|u_i\| = \|v_i\| = 1$ . Для хранения этой матрицы в памяти машины достаточно  $m+n$  ячеек вместо  $mn$ , а операция умножения на  $n$ -вектор  $x$  требует  $m+n$  операций умножения вместо  $mn$ . Эти простые оценки показывают, что для матриц больших размера использование представления (2.5.1) может дать значительный выигрыш по требуемой памяти и быстродействию.

Дополнительная возможность экономии памяти и повышения быстродействия открывается при аппроксимации исходной матрицы  $A$  более простой  $\hat{A}$ , получаемой из исходной путем отбрасывания членов с достаточно малыми сингулярными числами, т.е. обнуления сингулярных чисел  $\sigma_i$  матрицы  $A$ , начиная с некоторого  $i = t+1 \leq n$

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^t \sigma_i u_i v_i^T. \quad (2.5.4)$$

Здесь, естественно, предполагается упорядоченность сингулярных чисел в порядке их невозрастания.

Пример подобной аппроксимации, если отвлечься от его интерпретации, фактически уже рассмотрен. Речь идет о матрице (§ 2.2)

$$A = \begin{bmatrix} 1.0 & 1.0 & 1.0 \\ 10^9 & -1.0 & 1.0 \\ 10^9 & 1.0 & 0.0 \end{bmatrix}$$

с сингулярными числами

$$\sigma_1 = 1414213562.3731, \quad \sigma_2 = 1.7321, \quad \sigma_3 = 1.2247.$$

Здесь

$$\sigma_2/\sigma_1 \approx 1.2 \cdot 10^{-9}, \quad \sigma_3/\sigma_1 \approx 0.9 \cdot 10^{-9}.$$

Если ограничиться в разложении (2.5.2) только первым слагаемым, то получаем аппроксимирующую матрицу

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sigma_1 u_1 v_1^T = \sigma_1 \begin{pmatrix} 0.0000 \\ -0.7071 \\ -0.7071 \end{pmatrix} (-1.0000 \ 0.0000 \ 0.0000) \\ &= \begin{bmatrix} 0.0000 & 0.0000 & 0.0000 \\ 999990409.7231 & 0.0000 & 0.0000 \\ 999990409.7231 & 0.0000 & 0.0000 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Целое число  $t$  в разложении (2.5.4) принято называть **эффективным рангом**. Эффективный ранг — количество сингулярных чисел, больших некоторого заданного порогового значения.

Как будет показано ниже, именно аппроксимация матриц используется для решения плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений. Получаемое при этом число обусловленности определяется эффективным рангом

$$\text{cond}_t \hat{A} = \frac{\sigma_1}{\sigma_t}. \quad (2.5.5)$$

### Упражнения

2.11. Доказать, что  $m \times n$ -матрица  $ab^T$  имеет ранг, равный единице, для любых ненулевых  $m$ -вектора  $a$  и  $n$ -вектора  $b$ .

2.12. Пусть  $m \times n$ -матрица  $\hat{A}$  ранга  $k$  является аппроксимирующей для  $m \times n$ -матрицы  $A$ . Найти погрешность аппроксимации  $\|\hat{A} - A\|$ .

2.13. Пусть  $n \times n$ -матрица  $B$  равна  $B = A + uv^T$ , где  $A$  — невырожденная матрица размера  $n \times n$ , а  $u, v$  —  $n$ -векторы. Доказать утверждение ("Лемма об обращении матрицы", формула Шермана — Моррисона)

$$B^{-1} = A^{-1} - \frac{1}{\beta} A^{-1} uv^T A^{-1}, \quad \beta = u^T A^{-1} v + 1.$$

### § 2.6 Нахождение собственных векторов матрицы

Обратимся к задаче определения собственных векторов матрицы по предварительно вычисленному собственному значению.

Рассмотрим  $n \times n$ -матрицу  $A$ . Пусть  $\tau$  — приближенное значение некоторого собственного числа  $\lambda$  матрицы  $A$ , а  $x$  — собственный вектор, отвечающий  $\lambda$ ,

$$\tau \approx \lambda, \quad Ax = \lambda x. \quad (2.6.1)$$

Задача состоит в определении вектора  $x$  по заданному значению  $\tau$ . Поясним суть проблемы. Для произвольных матриц наиболее эффективным численным методом определения собственных значений является  $QR$ -алгоритм и его различные модификации [5]. Для вычисления же собственных векторов этот алгоритм однако не очень удобен. В связи с этим в настоящее время наиболее распространенным является подход, основанный на использовании  $QR$ -алгоритма для определения всех собственных значений матрицы, если, конечно, она не достаточно

большая и разреженная — в этом случае обычно предпочитают итерационные методы, а для нахождения собственных векторов, отвечающих отдельным собственным значениям, используется метод обратных итераций [5]. Идея метода крайне проста, особенно для матриц простой структуры, например симметричных или нормальных. Выберем некоторый вектор  $x_0$  и рассмотрим итерационный процесс

$$(A - \tau E)x_k = x_{k-1} \quad (2.6.2)$$

для  $k = 1, 2, \dots$ . Нетрудно показать, используя разложения векторов  $x_0$  и  $x_k$  по собственному базису матрицы  $A$ , что при  $\tau \approx \lambda$  последовательность  $x_k$  очень быстро сходится к собственному вектору  $x$ . Более того, при специальном выборе начального приближения и нормировки вектора  $x_{k-1}$  часто достаточно только одной итерации для определения собственного вектора [6].

Положение существенно осложняется для матриц  $A$  с кратными собственными значениями и особенно в тех случаях, когда геометрическая кратность собственного значения не совпадает с алгебраической, что, конечно же, заранее неизвестно. В этих случаях необходимо вычислить все базисные векторы собственного подпространства, отвечающего заданному собственному значению. При этом каждый получаемый вектор необходимо ортогонализировать по отношению ко всем ранее найденным. Все это усугубляется тем обстоятельством, что приходится находить решения системы линейных уравнений с практически вырожденной матрицей  $A - \tau E$ . Перечисленные факторы делают алгоритм метода обратных итераций на практике очень сложным.

Покажем, что рассматриваемая задача может быть успешно решена с помощью сингулярного разложения [7]. Рассмотрим систему линейных уравнений относительно собственных векторов матрицы

$$(A - \lambda E)x = 0. \quad (2.6.3)$$

Очевидно, что определение всех собственных векторов  $x_k, k = 1, \dots, s$ , где  $s$  — геометрическая кратность собственного значения  $\lambda$  (размерность собственного подпространства, отвечающего  $\lambda$ ) сводится к нахождению базиса ядра матрицы  $A - \lambda E$ . Пусть сингулярное разложение этой матрицы имеет вид

$$A - \lambda E = USV^T. \quad (2.6.4)$$

Тогда столбцы матрицы  $V$ , соответствующие нулевым сингулярным числам, суть решение задачи. Это в теории. На практике все вычисления производятся с погрешностью, а само собственное значение

$\lambda$  определено приближенно, поэтому проверка на нуль сингулярных чисел лишена смысла. Обратный анализ погрешности [5] для задачи нахождения собственных значений произвольной матрицы с помощью  $QR$ -алгоритма дает: найденное собственное значение  $\tau$  является точным собственным значением возмущенной матрицы  $\tilde{A} = A + \Delta A$ , где для матрицы-возмущения  $\Delta A$  имеет место оценка

$$\|\Delta A\|_E = k \cdot \text{macheps} \cdot n^2 \cdot \|A\|_E, \quad (2.6.5)$$

где  $k$  — некоторая константа,  $1 \leq k \leq 2$ ,  $n$  — порядок матрицы. В действительности же, как отмечено в комментарии к программе вычисления собственных значений с помощью  $QR$ -алгоритма [6], реальная погрешность редко превышает величину

$$\|\Delta A\|_E = \text{macheps} \cdot n \cdot \|A\|_E. \quad (2.6.5')$$

Таким образом, используя  $\tau$  в качестве приближения для собственного значения  $\lambda$ , находим сингулярное разложение для возмущенной матрицы  $\tilde{A} - \tau E$  с оценкой для возмущения, определяемой (2.6.5). Используя теперь оценку (2.3.4) для возмущения сингулярных чисел, получаем критерий принадлежности вектора-столбца  $u_i$  матрицы  $V$  сингулярного разложения к ядру матрицы  $A - \lambda E$

$$\sigma_i \leq k \cdot \text{macheps} \cdot n^2 \cdot \|A\|_E \quad (2.6.6)$$

и определения размерности собственного подпространства, отвечающего собственному значению  $\lambda$ , как числу сингулярных чисел, удовлетворяющих данному условию.

**Пример 1.** Рассмотрим  $8 \times 8$ -матрицу

$$A = \begin{bmatrix} 2.73 & 1.06 & 1.73 & 0.06 & -1.26 & -0.93 & -1.26 & -0.93 \\ 0.54 & 1.61 & 1.54 & -1.38 & -0.45 & 0.61 & -0.25 & 0.61 \\ 0.66 & 0.33 & 3.66 & 0.33 & -1.33 & -0.66 & -1.33 & -0.66 \\ 0.81 & -0.45 & 0.81 & 0.54 & -0.18 & 0.54 & 0.01 & 0.54 \\ 1.06 & -0.26 & 2.06 & -0.26 & 0.06 & 0.73 & -0.93 & -1.26 \\ 1.28 & -0.32 & 1.28 & -1.32 & -1.72 & 1.68 & 0.48 & 0.68 \\ 1.01 & -0.25 & 2.01 & -0.25 & -0.98 & -1.25 & 0.21 & 0.74 \\ 1.28 & -0.32 & 1.28 & -1.32 & 0.28 & 0.68 & -1.52 & 1.68 \end{bmatrix}$$

Собственные значения этой матрицы, найденные с помощью  $QR$ -алгоритма, есть

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 1.0000 - i2.0000,$$

$$\lambda_3 = \lambda_4 = 1.0000 + i2.0000,$$

$$\lambda_5 = \lambda_6 = \lambda_7 = \lambda_8 = 2.0000.$$

Вычисления производились в режиме "extended", т.е. под число отводилось 10 байт, чему соответствует значение машинной точности

$$macheps \approx 1.4 \cdot 10^{-19}.$$

Поэтому пороговое значение  $\Delta\sigma$  для сингулярных чисел – правая часть неравенства (2.6.5) – равно

$$\Delta\sigma = k \cdot macheps \cdot \pi^2 \cdot \|A\|_E = 6.4 \cdot 10^{-17}.$$

Найдем собственный вектор, отвечающий собственному значению  $\lambda = 2$  алгебраической кратности 4. Для этого построим сингулярное разложение матрицы  $A - 2 \cdot E$ . Сингулярные числа этой матрицы, отсортированные в порядке невозрастания значений, равны

$$\sigma_1 \approx 6.70, \quad \sigma_2 \approx 3.50, \quad \sigma_3 \approx 2.30, \quad \sigma_4 \approx 2.20, \quad \sigma_5 \approx 1.00, \quad \sigma_6 \approx 0.73, \\ \sigma_7 \approx 4.1 \cdot 10^{-19}, \quad \sigma_8 \approx 4.2 \cdot 10^{-20}.$$

Отсюда следует, что собственному значению  $\lambda = 2$  соответствуют два собственных вектора – столбцы 7 и 8 матрицы  $V$ :

$$[v_7, v_8] = \begin{bmatrix} 0.0000 & -0.5345 \\ 0.4082 & -0.2673 \\ -0.4082 & -0.2673 \\ 0.0000 & -0.5345 \\ -0.4082 & -0.2673 \\ 0.4082 & -0.2673 \\ -0.4082 & -0.2673 \\ 0.4082 & -0.2673 \end{bmatrix}.$$

Нормы невязок  $\|(A - 2E)x\|$  не превышают  $5.1 \cdot 10^{-19}$ . Нетрудно убедиться в ортогональности найденных собственных векторов.

**Пример 2.** Рассмотрим  $8 \times 8$ -матрицу

$$A = \begin{bmatrix} 3.00 & 1.00 & 1.00 & 0.00 & -1.00 & -1.00 & -1.00 & -1.00 \\ 0.86 & 1.53 & 2.93 & -1.46 & -0.13 & 0.53 & -0.13 & 0.53 \\ 0.93 & 0.26 & 0.86 & 0.26 & -1.06 & -0.73 & -1.06 & -0.73 \\ 0.86 & -0.46 & 1.33 & 0.53 & -0.13 & 0.53 & -0.13 & 0.53 \\ 1.33 & -0.33 & 1.33 & -0.33 & 0.33 & 0.66 & -0.66 & -1.33 \\ 1.33 & -0.33 & 1.33 & -1.33 & -1.66 & 1.66 & 0.33 & 0.66 \\ 1.33 & -0.33 & 1.33 & -0.33 & -0.66 & -1.25 & 0.21 & 0.74 \\ 1.33 & -0.33 & 1.33 & -1.33 & 0.33 & 0.66 & -1.66 & 1.66 \end{bmatrix}.$$

Собственные значения этой матрицы – те же, что и в примере 1:

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 1.0000 - i2.0000,$$

$$\lambda_3 = \lambda_4 = 1.0000 + i2.0000,$$

$$\lambda_5 = \lambda_6 = \lambda_7 = \lambda_8 = 2.0000.$$

Найдем собственный вектор, отвечающий значению  $\lambda = 2$  алгебраической кратности 4. Сингулярные числа матрицы  $A - 2 \cdot E$  равны

$$\sigma_1 \approx 6.0, \quad \sigma_2 \approx 3.3, \quad \sigma_3 \approx 2.2, \quad \sigma_4 \approx 2.2, \quad \sigma_5 \approx 1.0,$$

$$\sigma_6 \approx 6.9 \cdot 10^{-19}, \quad \sigma_7 \approx 1.5 \cdot 10^{-19}, \quad \sigma_8 \approx 1.4 \cdot 10^{-19}.$$

Для данной матрицы  $A$  имеем

$$\Delta\sigma = k \cdot macheps \cdot \pi^2 \cdot \|A\|_E = 5.9 \cdot 10^{-17}.$$

Отсюда следует, что теперь собственному значению  $\lambda = 2$  соответствуют три собственных вектора – столбцы 6, 7 и 8 матрицы  $V$ :

$$[v_6, v_7, v_8] = \begin{bmatrix} -0.4977 & -0.6745 & 0.0000 \\ 0.2129 & -0.1972 & 0.4313 \\ 0.7494 & -0.1122 & -0.3585 \\ 0.2323 & -0.4919 & 0.0364 \\ 0.0194 & -0.2948 & -0.3949 \\ 0.2129 & -0.1972 & 0.4313 \\ 0.0194 & -0.2948 & -0.3949 \\ 0.2129 & -0.1972 & 0.4313 \end{bmatrix}.$$

Нормы невязок,  $\|(A - 2E)x\|_E$ , не превышают  $7.4 \cdot 10^{-19}$ .

Рассмотрим случай комплексных собственных значений.

Пусть  $\lambda = \alpha + i\beta$ ,  $\beta \neq 0$ , – собственное значение матрицы  $A$ , имеющее алгебраическую кратность  $p$ . Пусть этому собственному значению соответствуют  $m$ ,  $m \leq p$ , собственных векторов

$$x_k = u_k + iv_k, \quad k = 1, \dots, m,$$

матрицы  $A$

$$Ax_k = \lambda x_k \quad (2.6.7)$$

или

$$A(u_k + iv_k) = (\alpha + i\beta)(u_k + iv_k).$$

Отсюда следует система уравнений для вещественной и мнимой частей собственного вектора

$$\begin{aligned} Au_k &= \alpha u_k - \beta v_k, \\ Av_k &= \alpha v_k + \beta u_k. \end{aligned} \quad (2.6.8)$$

Следуя Дж. Уилкинсону [5], исследовавшему метод обратных итераций для простого комплексного собственного значения, введем в рассмотрение  $2n$ -вещественный вектор  $e_k$  и вещественную  $2n \times 2n$ -матрицу  $C(\lambda)$

$$e_k = \begin{bmatrix} u_k \\ v_k \end{bmatrix}, \quad C(\lambda) = \begin{bmatrix} A - \alpha & \beta E \\ -\beta E & A - \alpha \end{bmatrix}.$$

Тогда уравнения (2.6.8) можно записать в виде

$$C(\lambda)e_k = 0, \quad k = 1, \dots, m. \quad (2.6.9)$$

Задача нахождения собственных векторов  $x_k = u_k + iv_k$ , отвечающих собственному значению

$$\lambda = \alpha + i\beta,$$

сводится к определению базиса ядра матрицы  $C(\lambda)$ .

Для определения базиса ядра матрицы  $C(\lambda)$  рассмотрим матрицу  $C(\tau)$

$$C(\tau) = \begin{bmatrix} A - \omega & \delta E \\ -\delta E & A - \omega \end{bmatrix},$$

где  $\tau = \omega + i\delta$  - некоторое близкое к  $\lambda = \alpha + i\beta$  комплексное число, и построим ее собственные векторы. Непосредственной подстановкой нетрудно убедиться, что собственными векторами матрицы  $C(\tau)$  являются векторы

$$z_k = \begin{bmatrix} x_k \\ \pm i x_k \end{bmatrix}, \quad \bar{z}_k = \begin{bmatrix} \bar{x}_k \\ \mp i \bar{x}_k \end{bmatrix}, \quad k = 1, \dots, m,$$

т.е.  $4m$  линейно независимых вектора, отвечающих  $4$ -м различным собственным значениям  $\lambda - \omega \pm i\delta$ ,  $\bar{\lambda} - \omega \mp i\delta$ ,

$$\begin{bmatrix} A - \omega & \delta E \\ -\delta E & A - \omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ \pm i x_k \end{bmatrix} = (\lambda - \omega \pm i\delta) \begin{bmatrix} x_k \\ \pm i x_k \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} A - \omega & \delta E \\ -\delta E & A - \omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{x}_k \\ \mp i \bar{x}_k \end{bmatrix} = (\bar{\lambda} - \omega \mp i\delta) \begin{bmatrix} \bar{x}_k \\ \mp i \bar{x}_k \end{bmatrix}.$$

Рассмотрим эти собственные значения

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \alpha - \omega + i(\beta + \delta), & \gamma_2 &= \alpha - \omega + i(\beta - \delta), \\ \gamma_3 &= \alpha - \omega - i(\beta + \delta), & \gamma_4 &= \alpha - \omega - i(\beta - \delta). \end{aligned}$$

При  $\tau \rightarrow \lambda$  два собственных значения, а именно  $\gamma_2$  и  $\gamma_4$ , становятся нулевыми, а  $\gamma_1$  и  $\gamma_3$  остаются отличными от нуля. Таким образом, матрица  $C(\lambda)$  имеет двукратное нулевое собственное значение, которому соответствуют  $2m$  линейно независимых собственных векторов

$$z_k = \begin{bmatrix} x_k \\ -ix_k \end{bmatrix}, \quad \bar{z}_k = \begin{bmatrix} \bar{x}_k \\ i\bar{x}_k \end{bmatrix}, \quad (2.6.10)$$

или

$$z_k = \begin{bmatrix} u_k \\ v_k \end{bmatrix} + i \begin{bmatrix} v_k \\ -u_k \end{bmatrix}, \quad \bar{z}_k = \begin{bmatrix} u_k \\ v_k \end{bmatrix} - i \begin{bmatrix} v_k \\ -u_k \end{bmatrix}. \quad (2.6.11)$$

Итак, показано, что  $\dim \ker C(\lambda) = 2m$ . Находя теперь сингулярное разложение матрицы

$$C(\tau) = USV^T \quad \text{при} \quad \tau \approx \lambda$$

и учитывая вещественность матрицы  $C(\tau)$ , получаем, что для каждого  $\sigma_k \leq \Delta\sigma$  среди столбцов матрицы  $V$  будут присутствовать пара векторов вида

$$\begin{bmatrix} u_k \\ v_k \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} v_k \\ -u_k \end{bmatrix} \quad (2.6.12)$$

или

$$\begin{bmatrix} u_k \\ v_k \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} -v_k \\ u_k \end{bmatrix}, \quad (2.6.13)$$

которым, как нетрудно убедиться, соответствуют линейно зависимые собственные векторы  $x_k = u_k + iv_k$  и  $y_k = v_k - iu_k \equiv -ix_k$  либо  $x_k = u_k + iv_k$  и  $y_k = -v_k + iu_k \equiv ix_k$ . Отбирая из каждой подобной пары один вектор, можно найти все собственные векторы.

Рассмотрим два примера.

**Пример 3.**  $4 \times 4$ -матрица  $A$  имеет вид

$$A = \begin{bmatrix} 1.35 & 0.35 & -2.35 & -0.35 \\ 0.35 & 0.65 & 0.35 & 1.65 \\ 2.35 & -0.35 & 1.35 & -0.35 \\ 0.35 & -1.65 & -0.35 & 0.65 \end{bmatrix}.$$

Собственные значения этой матрицы равны

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 1.00 - i2.00,$$

$$\lambda_3 = \lambda_4 = 1.00 + i2.00.$$

Найдем собственный вектор, отвечающий собственному значению

$$\lambda = 1.00 + i2.00.$$

Для этого сформируем  $8 \times 8$ -матрицу  $C$

$$C = \begin{bmatrix} A - 1 \cdot E & 2 \cdot E \\ -2 \cdot E & A - 1 \cdot E \end{bmatrix}$$

и найдем ее сингулярное разложение. Сингулярные числа равны

$$\sigma_1 \approx 4.5, \quad \sigma_2 \approx 4.5, \quad \sigma_3 \approx 3.5, \quad \sigma_4 \approx 3.5, \quad \sigma_5 = 1.0, \quad \sigma_6 = 1.0,$$

$$\sigma_7 \approx 8.2 \cdot 10^{-20}, \quad \sigma_8 \approx 4.1 \cdot 10^{-20}.$$

Для данной матрицы  $A$  имеем

$$\Delta\sigma = k \cdot \text{macheps} \cdot n^2 \cdot \|A\|_E = 8.1 \cdot 10^{-18}.$$

Столбцы матрицы  $V$ , соответствующие двум последним сингулярным числам есть

$$[v_7, v_8] = \begin{bmatrix} 0.00 & 0.50 \\ -0.50 & 0.00 \\ -0.50 & 0.00 \\ 0.00 & 0.50 \\ 0.50 & 0.00 \\ 0.00 & 0.50 \\ 0.00 & 0.50 \\ 0.50 & 0.00 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -v & u \\ u & v \end{bmatrix}.$$

В результате определяем, что матрица  $A$  имеет один собственный вектор

$$x = \begin{pmatrix} 0.50 \\ 0.00 \\ 0.00 \\ 0.50 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0.00 \\ 0.50 \\ 0.50 \\ 0.00 \end{pmatrix},$$

отвечающий заданному собственному значению  $\lambda = 1.00 + i2.00$ .

**Пример 4.**  $4 \times 4$ -матрица  $A$  имеет вид

$$A = \begin{bmatrix} 1.00 & 0.00 & -2.00 & 0.00 \\ 0.00 & 1.00 & 0.00 & 2.00 \\ -2.00 & 0.00 & 1.00 & 0.00 \\ 0.00 & -2.00 & 0.00 & 1.00 \end{bmatrix}.$$

Собственные значения этой матрицы те же

$$\lambda_1 = \lambda_2 = 1.00 - i2.00,$$

$$\lambda_3 = \lambda_4 = 1.00 + i2.00.$$

Найдем собственный вектор, отвечающий собственному значению

$$\lambda = 1.00 + i2.00.$$

Сингулярные числа равны

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4 = 4,$$

$$\sigma_5 \approx 3.1 \cdot 10^{-19}, \quad \sigma_6 \approx 3.2 \cdot 10^{-19},$$

$$\sigma_7 \approx 6.4 \cdot 10^{-20}, \quad \sigma_8 \approx 1.7 \cdot 10^{-20}.$$

Для данной матрицы  $A$  имеем

$$\Delta\sigma = k \cdot \text{macheps} \cdot n^2 \cdot \|A\|_E = 7.8 \cdot 10^{-18}.$$

Соответствующие последним четырем сингулярным числам столбцы матрицы  $V$  есть

$$[v_5, v_6, v_7, v_8] = \begin{bmatrix} -0.50 & 0.00 & 0.50 & 0.00 \\ 0.00 & -0.50 & 0.00 & 0.50 \\ 0.00 & 0.50 & 0.00 & 0.50 \\ 0.50 & 0.00 & 0.50 & 0.00 \\ 0.00 & 0.50 & 0.00 & -0.50 \\ 0.50 & 0.00 & 0.50 & 0.00 \\ -0.50 & 0.00 & 0.50 & 0.00 \\ 0.00 & 0.50 & 0.00 & 0.50 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_1 & -v_1 & u_2 & v_2 \\ v_1 & u_1 & v_2 & -u_2 \end{bmatrix}.$$

В результате определяем, что матрица  $A$  имеет два линейно независимых собственных вектора

$$x_1 = \begin{pmatrix} -0.50 \\ 0.00 \\ 0.00 \\ 0.50 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0.00 \\ 0.50 \\ -0.50 \\ 0.00 \end{pmatrix}, \quad x_2 = \begin{pmatrix} 0.50 \\ 0.00 \\ 0.00 \\ 0.50 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0.00 \\ 0.50 \\ 0.50 \\ 0.00 \end{pmatrix},$$

отвечающих собственному значению  $\lambda = 1.00 + i2.00$ .

Отметим, что в обоих случаях, когда комплексные собственные значения матрицы кратные, сходимости метода обратных итераций нет. Хотя рассмотренные примеры демонстрируют работоспособность метода, требуется его дополнительное исследование, особенно для случая плохо обусловленных собственных значений.

### Упражнения

2.14. Предложить возможный алгоритм построения матрицы с заданными собственными значениями и заданной геометрической кратностью.

2.15. Для нахождения собственных значений матриц блочного вида

$$C = \begin{bmatrix} A & B \\ -B & A \end{bmatrix}$$

удобно использовать операции с блоками матрицы. Доказать, что

$$\det C = \det (A^2 + B^2).$$

2.16. Пусть  $\lambda$  — действительное собственное значение матрицы  $A$  геометрической кратности  $m$ . Доказать, что у матрицы

$$C = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{bmatrix}$$

собственное подпространство, соответствующее собственному значению  $\lambda$ , имеет размерность  $2m$  и любые  $m$  столбцов матрицы  $V$  сингулярного разложения матрицы  $C$ , отвечающие нулевым сингулярным числам, образуют базис ядра матрицы  $A$ .

## ГЛАВА 3

### ОБОБЩЕННЫЕ РЕШЕНИЯ

### СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

#### §3.1 Сингулярные базисы

Будем рассматривать  $m \times n$ -матрицу  $A$ ,  $m \geq n$ , как матрицу линейного оператора

$$y = Ax \quad (3.1.1)$$

из евклидова пространства  $E^n$  в евклидово пространство  $E^m$ .

Выясним структуру образа и ядра матрицы, используя сингулярное разложение  $A = USV^T$ .

Выберем в пространствах  $X^n$  и  $Y^m$  новые базисы — столбцы матриц соответственно  $V$  и  $U$  — так называемые сингулярные базисы

$$x = Vx', \quad y = Uy' \quad (3.1.4)$$

и найдем матрицу оператора в новых, сингулярных базисах

$$Uy' = AVx',$$

$$y' = U^T AVx' = U^T USV^T Vx' = Sx'.$$

Итак, в сингулярных базисах преобразование  $y = Ax$  принимает вид

$$y' = Sx', \quad (3.1.5)$$

или в координатной форме

$$y'_1 = \sigma_1 x'_1,$$

$$\vdots$$

$$y'_r = \sigma_r x'_r,$$

$$y'_{r+1} = 0,$$

$$\vdots$$

$$y'_n = 0.$$

Линейное преобразование (3.1.1) в сингулярных базисах сводится к растяжению  $i$ -ой координатной оси,  $i \leq r \equiv \text{rank } A$ , в  $\sigma_i$  раз. Координатные оси с  $(r+1)$ -ой по  $n$ -ю отображаются в нулевой вектор.

Из равенств (3.1.4) и (3.1.5) следует:

1. Базисом образа матрицы  $A$  служат столбцы матрицы  $U$  сингулярного разложения, соответствующие ненулевым сингулярным числам матрицы  $A$ .

2. Базисом ядра матрицы  $A$  служат столбцы матрицы  $V$  сингулярного разложения, соответствующие нулевым сингулярным числам матрицы  $A$ .

### §3.2 Системы линейных алгебраических уравнений.

Обратимся теперь к одной из основных прикладных задач линейной алгебры – задаче решения систем линейных алгебраических уравнений вида

$$Ax = b, \quad (3.2.1)$$

где  $A$  – матрица размера  $m \times n$ ,  $x$  –  $n$ -мерный вектор неизвестных, а  $b$  –  $m$ -мерный вектор свободных членов.

Необходимое и достаточное условие существования решения системы (3.2.1) устанавливается теоремой Кронекера – Капелли [2]:

Для того чтобы система линейных алгебраических уравнений  $Ax = b$  была совместна, необходимо и достаточно, чтобы ранг расширенной матрицы  $[A \ b]$  равнялся рангу матрицы системы  $A$

$$\text{rank } [A \ b] = \text{rank } A. \quad (3.2.2)$$

Сформулируем этот результат в терминах сингулярного разложения матрицы  $A = USV^T$ . Из равенства (3.1.5) в координатной форме следует утверждение:

Для существования решения системы линейных алгебраических уравнений  $Ax = b$  необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие

$$b'_{r+1} = \dots = b'_n = 0, \quad b' = U^T b. \quad (3.2.3)$$

При этом решение единственно, если  $r = n$ , и решений бесчисленное множество, если  $r < n$ . Найдем решения для обоих случаев.

Равенство (3.1.5) в координатной форме имеет при условии (3.2.3)

вид

$$y'_1 = \sigma_1 \cdot x'_1,$$

$$\vdots$$

$$y'_r = \sigma_r \cdot x'_r,$$

$$0 = 0 \cdot x_{r+1},$$

$$\vdots$$

$$0 = 0 \cdot x_n$$

и при  $r < n$  решение  $x$  в сингулярном базисе равно

$$x'_i = \begin{cases} b'_i / \sigma_i, & \text{при } i = 1, \dots, r, \\ c_i, & \text{при } i = r+1, \dots, n, \end{cases}$$

где  $c_i$  – произвольные постоянные.

Используя равенства (3.1.4), решение в исходном базисе можем записать в виде

$$x = VS^+U^Tb + V \begin{bmatrix} 0 \\ C \end{bmatrix},$$

где

$$S^+ = \text{diag}(\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_r^{-1}, 0, \dots, 0),$$

а  $C = (c_{r+1}, \dots, c_n)^T$  – столбец произвольных постоянных.

Нетрудно показать, что

$$V \begin{bmatrix} 0 \\ C \end{bmatrix} = \sum_{j=r+1}^n c_j v_j$$

и решение принимает вид

$$x = VS^+U^Tb + \sum_{j=r+1}^n c_j v_j. \quad (3.2.4)$$

Заметим, что в общем случае суммирование должно производиться по индексам нулевых сингулярных чисел матрицы  $A$ . Соответствующие столбцы матрицы  $V$  образуют базис ядра матрицы  $A$  – фундаментальную систему решений приведенной однородной системы линейных уравнений  $Ax = 0$ .

Равенство (3.2.4) описывает общее решение  $x$  неоднородной системы линейных алгебраических уравнений как сумму частного решения  $VS+U^Tb$  неоднородной системы уравнений и общего решения  $\sum_{j=r+1}^n c_j v_j$  приведенной однородной системы. С геометрической точки зрения решение  $x$  представляет собой линейное многообразие в пространстве  $R^n$ , полученное путем сдвига общего решения приведенной однородной системы на частное решение неоднородной системы. Нетрудно показать, что частное решение  $VS+U^Tb$  ортогонально ко всем решениям приведенной однородной системы. Такое решение называется *нормальным* [2].

Если же  $r = n$ , то решение системы единственно и имеет вид

$$x = VS+U^Tb, \quad (3.2.5)$$

где при этом  $S^+ = \text{diag}(\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_n^{-1}) \equiv S^{-1}$ . Нетрудно заметить, что решение системы в этом случае получается путем обращения сингулярного разложения матрицы  $A$

$$x = A^{-1}b = (USV^T)^{-1}b = VS^{-1}U^Tb. \quad (3.2.6)$$

С тем, чтобы охватить все возможные случаи, приведем выражение для решения однородной системы линейных уравнений  $Ax = 0$ :

$$x = \sum_{j=r+1}^n c_j v_j. \quad (3.2.7)$$

Подводя итог, можем сказать, что сингулярное разложение матриц представляет собой основу эффективного численного метода решения совместных систем линейных алгебраических уравнений. Эффективность метода заключается в том, что не требуется предварительного вычисления ранга матрицы и, главное, построение фундаментального решения приведенной однородной системы осуществляется в процессе сингулярного разложения.

Рассмотрим пример решения систем линейных алгебраических уравнений  $Ax = b$ , где  $A$  — матрица размера  $4 \times 3$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

для двух случаев задания правой части  $b$ :

$$1) \quad b = \begin{pmatrix} -2.0 \\ 6.0 \\ 2.0 \\ 2.0 \end{pmatrix}, \quad 2) \quad b = \begin{pmatrix} -2.0 \\ 6.0 \\ 6.0 \\ -2.0 \end{pmatrix}.$$

Сингулярное разложение матрицы  $A = USV^T$  было рассмотрено в примере §2.2:

$$\sigma_1 = 2.4495, \quad \sigma_2 = 1.4142, \quad \sigma_3 = 0.0000$$

$$V = \begin{bmatrix} 0.4082 & -0.7071 & 0.5774 \\ 0.4082 & 0.7071 & 0.5774 \\ 0.8164 & 0.0000 & -0.5774 \end{bmatrix}$$

$$U = \begin{bmatrix} 0.5000 & -0.5000 & 0.7071 \\ 0.5000 & 0.5000 & 0.0000 \\ 0.5000 & 0.5000 & 0.0000 \\ 0.5000 & -0.5000 & -0.7071 \end{bmatrix}$$

Общее решение неоднородной системы линейных уравнений, напомним, имеет вид

$$x = VS+U^Tb + \sum_{j=r+1}^n c_j v_j.$$

Для данной системы  $r = \text{rank } A = 2$ , размерность ядра матрицы  $A$   $\dim \ker A = 1$  и фундаментальное решение приведенной однородной системы есть  $v_3$

$$v_3 = \begin{pmatrix} 0.5774 \\ 0.5774 \\ -0.5774 \end{pmatrix}.$$

Найдем вектор  $b' = U^Tb$

$$1) \quad b' = \begin{pmatrix} 2.0 \\ 6.0 \\ -2.8284 \end{pmatrix}, \quad 2) \quad b' = \begin{pmatrix} 4.0 \\ 8.0 \\ 0.0 \end{pmatrix}.$$

В первом случае  $b'_3 \neq 0$ , поэтому система несовместна, во втором  $b'_3 = 0$  и система совместна.

Найдем векторы  $x$  для обоих случаев.

$$1) \quad x = \begin{pmatrix} -2.6667 \\ 3.3333 \\ 0.3333 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0.5774 \\ 0.5774 \\ -0.5774 \end{pmatrix}.$$



Заметим, что полученный вектор  $x$  не является решением системы уравнений.

$$2) \quad x = \begin{pmatrix} -3.3333 \\ 4.6667 \\ 1.3333 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0.5774 \\ 0.5774 \\ -0.5774 \end{pmatrix}.$$

Полученный вектор  $x$  является решением системы уравнений.

В обоих случаях  $c$  — произвольная постоянная.

Для интерпретации построенного вектора  $x$  как решения системы линейных уравнений  $Ax = b$  определяющим является проверка условия

$$b'_{r+1} = \dots = b'_n = 0, \quad b' = U^T b.$$

Проблема состоит в том, что вследствие неизбежных ошибок округления или погрешностей в исходных данных эти условия могут не выполняться для точного решения или, наоборот, выполняться, когда решения системы заведомо не существует. Более того, речь фактически идет о численном определении ранга матрицы, что, как известно, является классическим примером плохо обусловленной задачи. Возможным выходом является привлечение идеи использования так называемого регуляризирующего функционала [2], используемого при решении некорректных задач.

Обратимся еще раз к общему решению системы уравнений  $Ax = b$ . Если сингулярные числа матрицы  $A$  не упорядочены, а именно так организовано большинство программ сингулярного разложения, для решения  $x$  будем использовать следующую запись

$$x = VS^+U^Tb + \sum_{j \in N(A)} c_j v_j, \quad (3.2.8)$$

где

$$S^+ = \text{diag}(\sigma_1^+, \dots, \sigma_n^+), \quad \sigma_i^+ = \begin{cases} \sigma_i^{-1}, & \text{при } \sigma_i \neq 0, \\ 0, & \text{при } \sigma_i = 0, \end{cases} \quad (3.2.9)$$

а  $N(A)$  обозначает множество индексов, соответствующих нулевым сингулярным числам, т.е. ядру матрицы  $A$ .

### Упражнения

3.1. Доказать, что в выражении для общего решения (3.2.8) неоднородной системы  $Ax = b$  первое слагаемое является нормальным решением.

3.2. Найти сингулярные базисы оператора  $A^T$ .

3.3 [2]. Найти сингулярные базисы оператора  $A^{-1}$ .

3.4 [2]. Пусть все сингулярные числа оператора  $A$  попарно различны. Доказать, что сингулярные базисы определяются однозначно с точностью до множителя, равного по модулю единице.

3.5. Доказать, что для матрицы  $S$ , определяемой выражением (3.2.9), имеет место равенство

$$SS^+S = S.$$

3.6. Доказать, что векторы, определяемые равенством (3.2.8), и только они являются решением уравнения

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

Указание. Воспользоваться разложением векторов  $x$  и  $b$  по сингулярным базисам.

### §3.3 Обобщенные решения системы линейных уравнений

Задание произвольного вектора свободных членов  $b$  может привести к тому, что решение системы линейных уравнений  $Ax = b$  может не иметь ни одного решения в строгом понимании этого слова — как вектора  $x$ , обращающего уравнения в числовые тождества. Посмотрим на решение с другой точки зрения.

Пусть дана система линейных уравнений с  $m \times n$ -матрицей коэффициентов  $A$

$$Ax = b \quad (3.3.1)$$

и пусть  $x$  — произвольный  $n$ -вектор. Рассмотрим вектор  $R = Ax - b$ , называемый *невязкой* для вектора  $x$ . Для того чтобы вектор  $x$  был решением системы (3.3.1) необходимо и достаточно, чтобы невязка  $R$  равнялась нулю, или выполнялось условие

$$\|Ax - b\|^2 = 0. \quad (3.3.2)$$

Поскольку наименьшая величина невязки равна нулю, задача нахождения решения системы (3.3.1) может быть сформулирована как задача минимизации функционала невязки

$$R(x) = \|Ax - b\|^2. \quad (3.3.3)$$

Если решение системы уравнений не существует, то имеет смысл находить вектор  $x^*$ , минимизирующий функционал (3.3.3). Введем два определения.

Обобщенным решением, псевдорешением, системы линейных уравнений (3.3.1) называется любой вектор  $x \in \mathbb{R}^n$ , для которого функционал (3.3.3) достигает своего наименьшего значения. Обобщенное решение наименьшей длины называется нормальным обобщенным решением, нормальным псевдорешением.

Покажем, что построенный выше вектор  $x^*$

$$x^* = VS^+U^Tb + \sum_{j \in N(A)} c_j v_j, \quad (3.3.4)$$

где

$$S^+ = \text{diag}(\sigma_i^+, i = 1, \dots, n), \quad \sigma_i^+ = \begin{cases} \sigma_i^{-1}, & \text{при } \sigma_i \neq 0, \\ 0, & \text{при } \sigma_i = 0, \end{cases} \quad (3.3.5)$$

а  $N(A)$  обозначает множество индексов, соответствующих нулевым сингулярным числам, т.е. ядру матрицы  $A$ , является обобщенным решением системы линейных уравнений. При этом вектор

$$\hat{x} = VS^+U^Tb \quad (3.3.6)$$

является нормальным псевдорешением.

**Теорема 3.3.1.** Вектор  $x^*$ , определяемый равенствами (3.3.4) и (3.3.5), является обобщенным решением системы линейных уравнений  $Ax = b$ .

*Доказательство.*

Рассмотрим функционал невязки  $R(x)$  для вектора  $x^* + \bar{x}$ , где  $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$  — произвольный вектор,

$$R(x^* + \bar{x}) = \|A(x^* + \bar{x}) - b\|^2 = \|Ax^* + b - b\|^2,$$

где  $\bar{b} \equiv Ax \in \text{im}(A)$ . Используя сингулярное разложение  $A = USV^T$  и тот факт, что

$$A \sum_{j \in N(A)} c_j v_j \equiv 0,$$

получаем

$$R(x^* + \bar{x}) = \|USV^T VS^+U^Tb + \bar{b} - b\|^2 = \|USS^+U^Tb + \bar{b} - b\|^2.$$

Пусть  $b = Ub'$ ,  $\bar{b} = U\bar{b}'$ . Тогда

$$\begin{aligned} R(x^* + \bar{x}) &= \|USV^T VS^+U^TUb' + U\bar{b}' - Ub'\|^2 \\ &= \|USS^+b' + U\bar{b}' - Ub'\|^2 \\ &= \|U(SS^+ - E)b' + U\bar{b}'\|^2 \\ &= \|(SS^+ - E)b' + \bar{b}'\|^2. \end{aligned}$$

Используя выражение (3.3.5) для  $S^+$  и тот факт, что  $\bar{b} \in \text{im}(A)$ , имеем

$$\begin{aligned} SS^+ - E &= \text{diag}\{\underbrace{0, \dots, 0}_r, \underbrace{-1, \dots, -1}_{n-r}\} \\ (SS^+ - E)b' &= (\underbrace{x, \dots, x}_r, 0, \dots, 0)^T \\ \bar{b}' &= (\underbrace{0, \dots, 0}_r, x, \dots, x)^T, \end{aligned}$$

где  $r = \text{rank } A$ , а через  $x$  обозначено произвольное значение. Отсюда получаем равенство

$$R(x^* + \bar{x}) = \|(SS^+ - E)b'\|^2 + \|\bar{b}'\|^2$$

или

$$R(x^* + \bar{x}) = R(x^*) + R(\bar{x}).$$

Учитывая произвольность вектора  $\bar{x}$ , получаем утверждение теоремы:

$$R(x^* + \bar{x}) - R(x^*) \geq 0. \blacksquare$$

**Теорема 3.3.2.** Вектор  $x = VS^+U^Tb$  является нормальным псевдорешением системы линейных уравнений  $Ax = b$

*Доказательство.*

Рассмотрим обобщенное решение системы уравнений  $Ax = b$

$$x^* = VS^+U^Tb + \sum_{j \in N(A)} c_j v_j.$$

Для квадрата нормы его получаем

$$\begin{aligned} \|x^*\|^2 &= (b^T US^+V^T + \sum_{j \in N(A)} c_j v_j^T)(VS^+U^Tb + \sum_{j \in N(A)} c_j v_j) \\ &= b^T US^+S^+U^Tb + 2 \sum_{j \in N(A)} c_j b^T US^+V^T v_j + \sum_{j \in N(A)} c_j^2. \end{aligned}$$

Поскольку  $S^+ V^T v_j = 0$  для  $j \in N(A)$ , имеем

$$\|x^*\|^2 = \|\hat{x}\|^2 + \sum_{j \in N(A)} c_j^2,$$

и

$$\inf_c \|x^*\| = \|\hat{x}\|. \blacksquare$$

### §3.4 Псевдообратная матрица

Вернемся к системе линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b \quad (3.4.1)$$

с произвольной  $m \times n$ -матрицей коэффициентов  $A$ , для которой имеет место сингулярное разложение

$$A = USV^T, \quad (3.4.2)$$

и рассмотрим ее нормальное псевдорешение

$$\hat{x} = VS^+U^T b, \quad (3.4.3)$$

где

$$S^+ = \text{diag}(\sigma_1^+, \dots, \sigma_n^+), \quad = \begin{cases} \sigma_i^{-1}, & \text{при } \sigma_i \neq 0, \\ 0, & \text{при } \sigma_i = 0. \end{cases} \quad (3.4.4)$$

Матрица  $VS^+U^T$  в выражении (3.4.3) называется псевдообратной для матрицы  $A$

$$A^+ = VS^+U^T. \quad (3.4.5)$$

Отметим, псевдообратная матрица получается из исходной (3.4.2) путем ее формального обращения с учетом ортогональности матриц  $U$ ,  $V$  и определения матрицы  $S^+$  в соответствии с (3.3.5).

Понятие "псевдообратная" для  $m \times n$ -матрицы  $A$  было введено Муром и Пенроузом в 50-х годах как матрица  $A^+$  размера  $n \times m$ , удовлетворяющая условиям (условиям Мура – Пенроуза):

1.  $(AA^+)^T = AA^+$ ,
2.  $(A^+A)^T = A^+A$ ,
3.  $AA^+A = A$ ,
4.  $A^+AA^+ = A^+$ .

Можно показать [9], что такая матрица существует и единственна. Нетрудно убедиться, что введенная равенством (3.4.5) матрица удовлетворяет всем условиям Мура – Пенроуза. Очевидно также, что матрица  $S^+$  является псевдообратной к диагональной матрице сингулярных чисел  $S$ .

Как следует из определения, если матрица  $A$  – квадратная и невырожденная, то  $A^+ = A^{-1}$ . Если матрица  $A$  – прямоугольная размера  $m \times n$  и имеет полный ранг, т.е.  $\text{rank } A = \min(m, n)$ , то

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

Псевдообратная матрица, как и обычная обратная, является удобным математическим понятием для компактной записи решения и обычно не вычисляется в явном виде. Тем не менее приведем примеры.

**Пример 1.** Найдем псевдообратную для  $2 \times 3$ -матрицы

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Здесь  $m < n$ , поэтому дополним матрицу нулевой строкой

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Далее следуем алгоритму построения сингулярного разложения:

$$A^T A = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad \sigma_1 = 2, \quad \sigma_2 = 1.4142, \quad \sigma_3 = 0,$$

$$V = \begin{bmatrix} 0.71 & 0 & 0.71 \\ 0.71 & 0 & -0.71 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 0.71 & -0.71 & 0 \\ 0.71 & 0.71 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Отметим, что при построении матрицы  $U$  третий столбец, соответствующий нулевому сингулярному числу, строим как ортогональный первым двум. Это было бы невозможным, если бы не дополнили исходную матрицу нулевой строкой. Сингулярное разложение матрицы  $A$  построено:

$$A = USV^T = \begin{bmatrix} 0.71 & -0.71 & 0 \\ 0.71 & 0.71 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1.41 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 0.71 & 0.71 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0.71 & -0.71 & 0 \end{bmatrix}.$$

Теперь можно построить псевдообратную матрицу

$$A^+ = VS^+U^T = \begin{bmatrix} 0.71 & 0 & 0.71 \\ 0.71 & 0 & -0.71 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0.71 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} 0.71 & 0.71 & 0 \\ -0.71 & 0.71 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$A^+ = \begin{bmatrix} 0.25 & 0.25 & 0 \\ 0.25 & 0.25 & 0 \\ -0.50 & 0.50 & 0 \end{bmatrix}.$$

**Пример 2.** Пусть  $A = [1 \ 1]$ . Тогда

$$\sigma_1 = 1.4141, \quad \sigma_2 = 0,$$

$$V = \begin{bmatrix} 0.7071 & -0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}, \quad U = [1 \ -1]$$

и псевдообратная для  $A$  равна

$$A^+ = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}.$$

**Пример 3.** Пусть

$$A = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Тогда

$$\sigma = 1.4141, \quad V = [1], \quad U = \begin{bmatrix} 0.7071 \\ 0.7071 \end{bmatrix}$$

и псевдообратная для  $A$  равна

$$A^+ = [0.5 \ 0.5].$$

**Пример 4.** Пусть

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Тогда

$$A^T A = \begin{bmatrix} 6 & 1 \\ 1 & 6 \end{bmatrix}, \quad \sigma_1 = 2.6458, \quad \sigma_2 = 2.2361.$$

Здесь  $\text{rank } A = 2$ , поэтому псевдообратную можно вычислить как  $A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$ . В результате получаем

$$A^+ = \frac{1}{35} \begin{bmatrix} 8 & 11 & 5 \\ -13 & 4 & 5 \end{bmatrix}.$$

### Упражнения

3.7. Найти псевдообратную для  $(1 \times 1)$ -матрицы  $A = 0$ .

3.8. Пусть  $m \times n$ -матрица  $T$  имеет вид

$$A = \begin{bmatrix} B & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где  $B$  — невырожденная  $k \times k$ -матрица. Найти псевдообратную для матрицы  $A$ .

3.9. Доказать, что столбцами  $x_i$  псевдообратной для матрицы  $A$  служат нормальные псевдорешения систем линейных уравнений  $Ax_i = e_i$ , где через  $e_i$  обозначен  $i$ -й столбец единичной матрицы.

3.10. Доказать, что все обобщенные решения и только они являются решениями уравнения

$$Ax = AA^+b$$

3.11. Симметричная матрица  $P$  называется проекционной, если все ее собственные значения равны единице или нулю. Матрица  $P$  — проекционная в том и только том случае, если  $P$  — симметричная и  $P^2 = P$  (или  $P(E - P) = 0$ ).

Пусть  $P$  — проекционная матрица порядка  $n$ ,  $k$  собственных значений которой равны единице. Пусть  $T \in \mathbb{R}^n$  — собственное подпространство размерности  $k$ , отвечающее собственному значению единицы. Подпространство  $T$  называется ассоциированным с проекционной матрицей  $P$ , а матрица  $P$  — проекционной матрицей, ассоциированной с подпространством  $T$ . Подпространство  $T$  является одновременно пространством строк и пространством столбцов ассоциированной с ним проекционной матрицей  $P$  и характеризуется свойством

$$T = \{x : Px = x\}.$$

Доказать, что матрицы  $A^+A$ ,  $E - A^+A$ ,  $AA^+$  — проекционные и ассоциированные соответственно с пространством строк, ядром и пространством столбцов (образом) матрицы  $A$ .

3.12. Доказать, что обобщенное решение системы уравнений  $Ax = b$  можно представить в виде

$$x^* = A^+b + (E - A^+A)c,$$

где  $c$  — произвольный вектор.

3.13. Верно ли, что  $(AB)^+ = B^+A^+$  ?

3.14. Пусть  $A$  и  $B$  — матрицы размера  $n \times r$  и  $r \times m$  соответственно. Тогда

$$(AB)^+ = B^+A^+,$$

если  $\text{rank } A = \text{rank } B = r$ .

3.15. Доказать, что  $(AB)^+ = B^+A^+$ , если

$$(a) \quad A^T A = E \quad \text{или}$$

$$(b) \quad B B^T = E \quad \text{или}$$

$$(c) \quad B = A^T \quad \text{или}$$

$$(d) \quad B = A^+.$$

3.16 [9]. Доказать равенство

$$[A \ B]^+ = \begin{bmatrix} A^+ - A^+ B J \\ J \end{bmatrix},$$

где

$$J = C^+ + (E - C^+C)KB^T(A^+)^T A^+(E - BC^+),$$

$$C = (E - AA^+)B,$$

$$K = \{E + [A^+B(E - C^+C)]^T [A^+B(E - C^+C)]\}^{-1}.$$

3.17 [9]. Доказать равенство

$$[A \ 0]^+ = \begin{bmatrix} A^+ \\ 0 \end{bmatrix}.$$

### §3.5 Устойчивость псевдорешений

Рассмотрим влияние малых возмущений на псевдообратную матрицу и псевдорешение. Устойчивость сингулярного разложения к малым возмущениям отражается в малых значениях норм эквивалентных возмущений (2.3.6). Иное положение с псевдорешениями. Рассмотрим характерный пример [2]. Пусть невозмущенная система линейных уравнений  $Ax = b$  имеет вид

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Нетрудно показать, что для данной системы

$$U = V = E, \quad \sigma_1 = 1, \quad \sigma_2 = 0$$

и, следовательно,  $A^+ = S^+$ , поэтому

$$\hat{x} = S^+b = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим теперь возмущенную систему  $\tilde{A}x_\epsilon = b$  вида

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

где  $\epsilon$  — малое возмущение. Для данной системы

$$U = V = E, \quad \sigma_1 = 1, \quad \sigma_2 = \epsilon, \quad A^+ = S^+$$

и

$$\hat{x}_\epsilon = S^+b = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \epsilon^{-1} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \epsilon^{-1} \end{pmatrix}.$$

Как видим, возмущенное нормальное псевдорешение  $\hat{x}_\epsilon$  не только сильно отличается по длине от невозмущенного  $\hat{x}$ , но и ортогонально ему. Таким образом, малые возмущения исходных данных приводят к большим возмущениям в нормальном псевдорешении. Это, однако, свойственно лишь тем возмущениям, в результате которых происходит изменение ранга матрицы.

Рассмотрим пример той же системы, но с иным возмущением.

$$\begin{bmatrix} 1+\epsilon & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

где  $\epsilon$  — малое возмущение. В этом случае

$$U = V = E, \quad \sigma_1 = 1 + \epsilon, \quad \sigma_2 = 0, \quad A^+ = S^+$$

и

$$\hat{x}_\epsilon = S^+b = \begin{bmatrix} 1+\epsilon & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+\epsilon \\ 0 \end{pmatrix}$$

и можно констатировать устойчивость нормального псевдорешения.

Приведем основной результат исследования устойчивости псевдообратной матрицы и нормального псевдорешения [3]. Пусть  $A$  и  $\Delta A$  —  $m \times n$ -матрицы. Рассмотрим возмущенную матрицу

$$\tilde{A} = A + \Delta A.$$

**Теорема 3.5.1.** Пусть  $\text{rank } \tilde{A} \leq \text{rank } A$  и  $\|\Delta A\| \cdot \|A^+\| < 1$ . Тогда

$$\text{rank } \tilde{A} = \text{rank } A \quad (3.5.1)$$

$$\|A^+ - \tilde{A}^+\| \leq \frac{c \cdot \|\Delta A\| \cdot \|A^+\|^2}{1 - \|\Delta A\| \cdot \|A^+\|}, \quad (3.5.2)$$

где  $c$  — некоторая константа,  $1 \leq c \leq 3$ .

Оценки погрешности нормального псевдорешения системы линейных уравнений  $Ax = b$  даются следующей теоремой.

**Теорема 3.5.2.** Пусть  $\hat{x}$  — нормальное псевдорешение линейной системы  $Ax = b$ . Преположим, что  $\|\Delta A\| \cdot \|A^+\| < 1$  и  $\text{rank } A + \tilde{A} \leq \text{rank } A$ , и пусть  $\hat{x} + \Delta x$  — нормальное псевдорешение возмущенной линейной системы

$$(A + \Delta A)(\hat{x} + \Delta x) = b + \Delta b.$$

Тогда

$$\text{rank } (A + \Delta A) = \text{rank } A, \quad (3.5.3)$$

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond } A \left[ \alpha \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \beta \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right], \quad (3.5.4)$$

где

$$\alpha = 2 + \|A\| \cdot \|A^+\| \cdot \frac{\|A\hat{x} - b\|}{\|Ax\|}, \quad \beta = \frac{\|b\|}{\|Ax\|},$$

и

$$\text{cond } A = \frac{\|A\| \cdot \|A^+\|}{1 - \|A\| \cdot \|A^+\|}. \quad (3.5.5)$$

Напомним еще раз, что утверждения приведенных теорем справедливы только в том случае, когда возмущения  $\Delta A$  не меняют ранга матрицы.

### §3.6 Решение плохо обусловленных систем линейных уравнений

Речь пойдет о системах линейных уравнений  $Ax = b$ , матрица коэффициентов  $A$  которых в условиях реальных вычислений становится матрицей неполного ранга или близкой к такой. Решение таких систем

традиционными методами может привести к значительной потере точности. Согласно правилу "большого пальца" (см. Dongarra и др. [11]) число значащих цифр, теряемых при нахождении решения системы, составляет  $\log_{10}(\text{cond } A)$ . Выходом может послужить нахождение нормального псевдорешения  $\hat{x}$ , хотя и ценой возможного возрастания нормы вектора невязки. Для того, чтобы подчеркнуть подобную замечу постановки задачи, будем использовать ставшим уже стандартным следующее обозначение для решаемой задачи:

$$Ax \cong b, \quad (3.6.1)$$

что подразумевает нахождение вектора  $\hat{x}$ , минимизирующего квадрат нормы вектора невязки  $\|Ax - b\|^2$  и имеющего наименьшую длину, т.е. нормального псевдорешения

$$\hat{x} = A^+ b. \quad (3.6.2)$$

Основная проблема, с которой приходится сталкиваться при реализации такого подхода, это проблема устойчивости. Если ранг возмущенной матрицы не изменился, то справедлива оценка относительной погрешности

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond } A \left[ \alpha \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \beta \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right], \quad (3.6.3)$$

формально совпадающая с известной оценкой для "точного" решения

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond } A \left[ \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right]. \quad (3.6.4)$$

Если в случае "точного" решения можно гарантировать существование такой области изменения входных данных задачи, в которой сохраняется непрерывная зависимость решения от входных данных, то в случае псевдорешения ситуация иная. Ранг матрицы, как целая величина, является разрывной функцией от входных данных, поэтому сколь угодно малые возмущения могут привести к появлению малых сингулярных чисел и, следовательно, к большим по величине компонентам в псевдорешении.

Одним из путей обеспечения устойчивости псевдорешения является аппроксимация матрицы (см. § 2.5), основанная на обнулении малых сингулярных чисел в соответствии с некоторым критерием. Ранг  $t$  результирующей матрицы, называемый эффективным, равен числу ненулевых сингулярных чисел, а число обусловленности равно  $\sigma_1/\sigma_t$ .

В качестве критерия малости сингулярных чисел обычно и выбирается заданный уровень  $\text{cond}_t = \sigma_1/\sigma_t$ .

### §3.7 Задача наименьших квадратов

Рассмотрим одну из наиболее распространенных постановок задачи обработки данных (результатов измерений, вычислений и т.д.). Пусть имеется таблица из  $n$  пар значений  $(x_i, f_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$ , где  $x_i$  — значение независимой переменной  $x$ ,  $f_i = f(x_i)$  — значение некоторой функции  $f(x)$ . Требуется приблизить функцию  $f(x)$  функцией  $P(x)$  из заданного класса, зависящей от  $m$  параметров  $c_i$ ,  $i = 1, \dots, m$ , так, чтобы сумма квадратов ошибок  $\epsilon_i = P(x_i) - f_i$  в заданных точках  $x_i$  достигала наименьшего значения

$$R(c) = \sum_{i=1}^n \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n (P(x_i) - f_i)^2 \rightarrow \min_c, \quad (3.7.1)$$

где  $c = (c_1, \dots, c_m)^T$  — вектор неизвестных параметров. В качестве функции  $P(x)$  обычно выбирается линейная комбинация подходящих базисных функций  $\varphi(x)$

$$P(x) = \sum_{j=1}^m c_j \varphi_j(x). \quad (3.7.2)$$

Тогда выражение (3.7.1) принимает вид

$$R(c) = \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^m c_j \varphi_j(x_i) - f_i \right)^2 \rightarrow \min_c. \quad (3.7.3)$$

В качестве базисных функций чаще всего выбираются степенные функции вида  $\varphi_i(x) = x^{i-1}$ . При таком выборе базисных функций аппроксимация осуществляется полиномами степени  $m-1$ :

$$P(x) = c_1 + c_2 x^2 + \dots + c_m x^{m-1}. \quad (3.7.4)$$

Часто используются также тригонометрические, экспоненциальные и дробно-рациональные базисные функции.

Введем в рассмотрение  $n \times m$ -матрицу  $X$

$$X_{ij} = \varphi_j(x_i)$$

и  $n$ -вектор  $f$

$$X = \begin{bmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \dots & \varphi_m(x_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(x_n) & \varphi_2(x_n) & \dots & \varphi_m(x_n) \end{bmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}. \quad (3.7.5)$$

Теперь выражение (3.7.3) принимает вид

$$R(c) = \|Xc - f\|^2 \rightarrow \min_c, \quad (3.7.6)$$

что позволяет сформулировать задачу наименьших квадратов, сокращенно — задачу НК.

**Задача НК:** пусть даны действительная  $m \times n$ -матрица  $A$  и действительный  $m$ -вектор  $b$ . Найти действительный  $n$ -вектор  $\hat{x}$ , минимизирующий евклидову норму вектора  $Ax - b$ .

Задача НК, таким образом, есть задача нахождения нормального псевдорешения системы линейных алгебраических уравнений  $Ax = b$ , обозначаемая как

$$Ax \cong b. \quad (3.7.7)$$

Решение задачи НК на основе сингулярного разложения матриц известно:

$$\hat{x} = A^+ b = VS^+ U^T b. \quad (3.7.8)$$

Для того, чтобы оценить те новые возможности, которые открываются при использовании сингулярного разложения при решении задачи НК, рассмотрим традиционный подход. Вернемся к выражению для квадрата евклидовой нормы вектора невязки (3.7.6), записанного в новых обозначениях

$$R(x) = \|Ax - b\|^2. \quad (3.7.9)$$

Дифференцируя скалярную функцию  $R(x)$  по вектору  $x$  и приравняв производную нулю, получаем

$$\begin{aligned} \frac{dR}{dc} &= \frac{d}{dc} (x^T A^T A x - 2x^T A^T b + b^T b) \\ &= 2A^T A x - 2A^T b = 0, \end{aligned}$$

откуда следует так называемое нормальное уравнение

$$A^T A x = A^T b, \quad (3.7.10)$$

решение которого при условии невырожденности матрицы  $A^T A$  можно записать в виде

$$\hat{x} = (A^T A)^{-1} A^T b. \quad (3.7.11)$$

Заметим, что решение выражается через псевдообратную для матрицы  $A$  (см. §3.4).

Традиционный подход заключается в построении нормальной системы линейных уравнений вида (3.7.10) с положительно определенной матрицей коэффициентов и решения этой системы любым подходящим прямым или итерационным методом.

Главный недостаток этого подхода заключается в том, что он не предлагает исследователю средств анализа задачи и в первую очередь выявления линейной зависимости базисных функций на рассматриваемом интервале изменения независимой переменной. Эта зависимость проявляется в плохой обусловленности матрицы  $A^T A$ , которая при использовании сингулярного разложения вскрывается естественным образом по значениям сингулярных чисел. Введение смещения, а также приведение интервала изменения независимой переменной к малому, а еще лучше к центрированному, позволяют значительно снизить число обусловленности.

Прекрасный пример подобного исследования приведен в работе [4]. Задача состояла в аппроксимации по методу наименьших квадратов данных переписи населения за 8 десятилетий 1900, 1910, ..., 1970 квадратичным многочленом

$$P(x) = c_1 + c_2 x + c_3 x^2.$$

Сингулярные числа матрицы  $A$  оказались равными

$$\sigma_1 = 0.106 \times 10^6, \quad \sigma_2 = 0.648 \times 10^2, \quad \sigma_3 = 0.346 \times 10^{-3}.$$

Большое число обусловленности  $\sigma_1/\sigma_3 \approx 10^{11}$  и соответственно малые сингулярные числа  $\sigma_2$  и  $\sigma_3$  по сравнению с  $\sigma_1$  говорят о почти линейной зависимости между столбцами матрицы, или о близкой к линейной зависимости базисных функций  $1, x$  и  $x^2$  для значений  $x$  из интервала [1900, 1970]. Изменение базисных функций путем введения смещения аргумента

$$P(x) = c_1 + c_2(x - 1900) + c_3(x - 1900)^2$$

а далее приведение интервала [1900, 1970] к малому, симметричному  $[-3.5, 3.5]$ ,

$$P(x) = c_1 + c_2 \left( \frac{x - 1935}{10} \right) + c_3 \left( \frac{x - 1935}{10} \right)^2,$$

привело к уменьшению числа обусловленности матрицы соответственно до значений  $0.575 \times 10^4$  и  $10.7$ .

Это исследование является составной частью так называемого сингулярного анализа, сформулированного Ч.Лоусоном и Р.Хенсоном [3].

Основу сингулярного анализа составляют пробные решения задачи НК. Рассмотрим задачу

$$Ax \cong b, \quad A = USV^T, \quad \text{rank } A = r \leq n.$$

В силу ортогональности матрицы  $U$  эта задача эквивалентна следующей

$$Sp \cong g, \quad (3.7.12)$$

где  $p = V^T x$ ,  $g = U^T b$ .

Решение относительно  $p$  есть

$$\hat{p} = S^+ g, \quad (3.7.13)$$

или в координатной записи

$$\hat{p} = \begin{cases} g_i / \sigma_i, & \text{при } i = 1, \dots, r, \\ 0, & \text{при } i > r. \end{cases}$$

Предположим, что сингулярные числа матрицы  $A$  упорядочены в порядке невозрастания. Тогда нетрудно показать, что для найденного решения  $\hat{x} = V\hat{p}$  остаточная сумма квадратов есть

$$R(\hat{x}) = g^T (E - SS^+) g = \sum_{i=1}^r g_i^2.$$

Рассмотрим пробные решения задачи (3.7.12)

$$p^{(k)} = [p_1, p_2, \dots, p_k, 0, \dots, 0]^T,$$

где  $p^{(0)}$  — нулевой вектор, а числа  $p_i$  определяются согласно (3.7.13). Пробный вектор  $p^{(k)}$  является нормальным псевдорешением задачи (3.7.12) при условии, что сингулярные числа  $\sigma_i$ ,  $i > r$  считаются нулевыми. Из пробных векторов  $p^{(k)}$  получаем пробные решения  $x^{(k)}$  исходной задачи  $Ax \cong b$

$$x^{(k)} = Vp^{(k)} = \sum_{i=1}^k \hat{p}_i v_i.$$



Отсюда следует

$$\|\hat{x}^{(k)}\|^2 = \sum_{i=1}^k \left( \frac{g_i}{\sigma_i} \right)^2 = \|x^{(k-1)}\|^2 + \left( \frac{g_k}{\sigma_k} \right)^2,$$

т.е. норма пробного решения есть неубывающая функция от номера пробы  $k$ .

Рассмотрим далее остаточную сумму квадратов для пробного решения

$$R(\hat{p}^{(k)}) = \sum_{j=k+1}^n g_j^2 = R(\hat{p}^{(0)}) - \sum_{j=1}^k g_j^2 = R(\hat{p}^{(k-1)}) - g_k^2,$$

т.е. остаточная сумма квадратов (норма вектора невязки) есть невозрастающая функция от номера пробы.

Для задачи аппроксимации функции  $f(x)$  алгебраическим многочленом пробное решение  $x^{(k)}$  означает пробный полином степени  $k$  в качестве оптимального в некотором смысле решения задачи.

Рассмотрим несколько возможных критериев оптимальности выбора параметра  $k = k_{opt}$ :

- 1)  $k = k_{opt}$ , если
  - $\sigma_k \rightarrow \max$  (малая обусловленность —  $\sigma_1/\sigma_k$ ),
  - $R(\hat{x}^{(k)}) \rightarrow \min$ ,
  - $\|\hat{x}^{(k)}\| \rightarrow \min$ ;

Это — идеальный случай аппроксимации, для реализации которого необходимо проведение анализа сингулярных чисел для различных математических моделей.

- 2)  $k = k_{opt}$ , если  $|g_k| \leq \delta$ , где  $\delta$  — известная погрешность вектора  $b$ :

$$\|b - \tilde{b}\| \leq \delta;$$

- 3)  $k = k_{opt}$ , если

$$\hat{\sigma} = \left( \frac{R(\hat{x}^{(k)})}{n - k - 1} \right)^{1/2} \rightarrow \min_k.$$

Последний критерий заслуживает более подробного рассмотрения.

Обратимся к вероятностной интерпретации задачи. Пусть результатом эксперимента является набор пар значений  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ . Предполагая  $x$  неслучайной, поставим задачу определения точной зависимости среднеквадратичного отклонения  $\sigma_y$  от  $x$ . Такая зависимость называется регрессией. В общем виде задача ставится так: по

данной выборке пар значений найти уравнение регрессии  $y = f(x)$ , понимая под этим, что среднее значение величины  $y - \bar{y}$  есть  $f(x)$ , т.е.  $\bar{y} \approx f(x)$ . Уравнение регрессии существенно зависит от выбираемой нами меры приближенности. Подбирать это уравнение мы должны по значениям  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ . В качестве меры приближенности обычно выбирается сумма квадратов отклонений. Принцип наименьших квадратов суммы отклонений вытекает из общего положения математической статистики, согласно которому в качестве меры рассеяния всегда берется дисперсия (среднее из суммы квадратов отклонений). В общем виде принцип наименьших квадратов формулируется следующим образом.

Пусть задан некоторый класс функций  $f(x)$ , накладывающий на выборку одинаковое число связей. Тогда наилучшее уравнение регрессии дает та функция из рассматриваемого класса, для которой сумма квадратов

$$R = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i)]^2$$

имеет наименьшее значение.

Чем шире выбранный класс, тем большее число функций участвует в сравнении со средним и тем, казалось бы, надежнее будет оценка. Это оказывается справедливым лишь до тех пор, пока не изменяется число связей  $m$ , накладываемых на выборку. Если же класс функций увеличивается за счет числа связей  $m$ , то это приводит к уменьшению числа степеней свободы  $n - m$  и может увеличить дисперсию

$$\sigma^2 = \frac{R}{n - m}.$$

Число связей, накладываемых функцией  $f(x)$  на выборку, равно числу неопределенных коэффициентов, входящих в эту функцию. Например, для многочленов степени  $m - 1$  число связей равно  $m$ . Таков смысл последнего критерия.

В пакете стандартных подпрограмм NAG (Numerical Algorithms Group) подпрограмма построения наилучшего приближения алгебраическим многочленом степени  $m$  по методу наименьших квадратов на основе сингулярного разложения предусматривает вывод величины оценки среднеквадратичного отклонения

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{R(\hat{x}^{(k)})}{n - m}}.$$

При решении задачи фильтрации, т.е. нахождения оценки параметра  $\hat{x}_k$  по известным наблюдениям  $x_k$ , методом наименьших квадратов

$$A_k x_k \cong b_k \equiv \beta_k + \xi_k,$$

где  $\xi_k$  — вектор белого гауссова шума с нулевым математическим ожиданием и ковариационной матрицей  $P = \sigma^2 \cdot E$ ,  $\beta_k$  — вектор точных измерений, а  $b_k$  — вектор фактических измерений, искаженных шумами, матрица  $A_k^T A_k$  в оценке  $\hat{x} = (A_k^T A_k)^{-1} A_k^T b$  представляет собой не что иное как обратную для ковариационной матрицы ошибок

$$P_k = M\{x_k x_k^T\} \equiv (A_k^T A_k)^{-1}.$$

При добавлении очередного  $(k+1)$ -го наблюдения  $a^T x = b$ , приводящего к задаче НК

$$A_{k+1} x_k \cong b_{k+1} \equiv \beta_{k+1} + \xi_{k+1},$$

новая оценка может быть выражена через старую рекуррентным соотношением

$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k + \frac{1}{\beta} P_k a (b_{k+1} - a^T x_k),$$

$$P_{k+1} = P_k - \frac{1}{\beta} P_k a a^T P_k,$$

$$\beta = a^T P_k a + \sigma^2.$$

Доказательство этого утверждения основана на лемме об обращении матрицы (см. упражнение 2.13).

## ГЛАВА 4 РЕАЛИЗАЦИЯ СИНГУЛЯРНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ МАТРИЦ

Рассмотрев основные области применения сингулярного разложения матриц, обратимся к его вычислению. Рассмотренный выше метод вычисления, основанный на определении собственных значений матрицы  $A^T A$  и соответствующих собственных векторов  $u_i$  и  $u_i$  носил не более чем учебный характер, призванный проиллюстрировать работу алгоритма, предоставляемого нам "идеальной" математикой. "Вычисление собственных значений путем решения характеристического уравнения является одной из наиболее распространенных глупостей вычислительной математики" — совершенно справедливо отмечается в книге Э. Хайрера, С. Норсетта и Г. Ваннера "Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи." Плохая обусловленность характеристического уравнения и задачи вычисления собственных векторов особенно в случае близких собственных значений делают этот подход пригодным лишь для простейших примеров.

Реальный алгоритм вычисления сингулярного разложения основан на идеях и методах, лежащих в основе современных подходов к решению алгебраической проблемы собственных значений и базирующихся на использовании ортогональных преобразований. Начнем поэтому с рассмотрения ортогональных матриц — "орудий ремесла" по выражению Б.Парлетта (Симметричная проблема собственных значений. Численные методы. Пер. с англ. — М.: "Мир", 1983).

### §4.1 Основные ортогональные преобразования

Из ортогональных преобразований ограничимся рассмотрением преобразований, основанных на использовании матриц отражения и вращений.

Матрицей отражения  $H$ , или матрицей Хаусхолдера, называется матрица вида

$$H = H(w) = E - 2 \frac{w w^T}{\|w\|^2}, \quad (4.1.1)$$

где  $w$  — произвольный ненулевой вектор.

Непосредственной проверкой легко убедиться в следующих основных

свойствах матрицы  $H(w)$ :

- 1).  $H^T(w) = H(w)$ ,
- 2).  $H^{-1}(w) = H^T(w)$ ,
- 3).  $H^2(w) = E$ , т.е.  $H(w) = H^T(w) = H^{-1}(w)$ ,
- 4).  $H(w)w = -w$  и  $H(w)x = x$  для любого  $x \perp w$ .

Из отмеченных свойств вытекает утверждение: для любого  $n$ -вектора  $a = (a_1, \dots, a_n)^T$  существует матрица отражения  $H(w)$  такая, что при

$$w = \begin{pmatrix} a_1 \mp \|a\| \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad (4.1.2)$$

образ вектора  $a$  имеет вид

$$H(w)a = \begin{pmatrix} \pm \|a\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.1.3)$$

С геометрической точки зрения преобразование Хаусхолдера есть отражение в  $(n-1)$ -мерном подпространстве, ортогональном к заданному вектору  $w$ .

Используя матрицу Хаусхолдера, можно построить  $QR$ -разложение произвольной  $n \times n$ -матрицы.

**Теорема 4.1.1.** Любая  $n \times n$ -матрица  $A$  может быть представлена в виде

$$A = QR, \quad (4.1.4)$$

где  $Q$  — ортогональная, а  $R$  — верхняя треугольная матрицы размеров  $n \times n$ .

**Доказательство.** Зададим матрицу отражения  $H_i = H_i(w_i)$  условием, что первые  $(i-1)$  компонент вектора  $w_i$  нулевые, а остальные совпадают с оставшимися компонентами  $i$ -го столбца матрицы

$$H_{i-1} \dots H_1 A = A^{(i-1)}, \quad A^{(0)} = A,$$

при этом  $i$ -я компонента корректируется на величину нормы согласно (4.1.2). Матрица  $H_i(w_i)$  аннулирует поддиагональные элементы  $i$ -го столбца матрицы  $A^{(i-1)}$ .

Произведение ортогональных матриц  $\hat{Q} \equiv H_{n-1} \dots H_1$  есть ортогональная матрица, поэтому из равенства

$$\hat{Q}A = R$$

и свойств матриц отражения получаем

$$A = \hat{Q}^T R = H_1 \dots H_{n-1} A = QR.$$

Если в процессе аннулирования поддиагональных элементов построенный вектор  $w_i$  окажется нулевым, то соответствующая матрица  $H$  заменяется единичной. ■

Нетрудно доказать, что  $QR$ -разложение будет единственным, если матрица невырожденная, а диагональные элементы матрицы  $R$  выбраны знакоопределенными, например положительными.

Для получения  $QR$ -разложения с помощью матриц Хаусхолдера требуется порядка  $\frac{4}{3}n^3$  операций типа умножения.

**Пример 1.** Построим  $QR$ -разложение матрицы, называемой верхней почти треугольной, или матрицей Хессенберга

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 4 & 3 & 4 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Процесс построения выполняется за два шага.

Шаг 1.  $a = (3, 4, 0)^T$ ,  $\|a\| = 5$ .

$$w_1 = \begin{pmatrix} a_1 - \|a\| \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 4 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Теперь

$$H_1(w_1)A = \begin{bmatrix} 5 & 3 & 4.4 \\ 0 & -1 & -0.8 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Шаг 2.  $a = (0, -1, 1)^T$ ,  $\|a\| = 1.4142$ .

$$w_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a_2 - \|a\| \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -2.4142 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Теперь

$$H_2(w_2)H_1(w_1)A = \begin{bmatrix} 5.0000 & 3.0000 & 4.4000 \\ 0.0000 & 1.4142 & 1.2728 \\ 0.0000 & 0.0000 & 0.1414 \end{bmatrix} \equiv R.$$

Матрица  $Q = H_1H_2$  есть

$$Q = \begin{bmatrix} 0.6000 & -0.5657 & -0.5657 \\ 0.8000 & 0.4243 & 0.4243 \\ 0.0000 & -0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}.$$

**Пример 2.** Построим  $QR$ -разложение  $3 \times 3$  хессенберговой матрицы ранга 2

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 4 & 3 & 2 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Получаем

$$Q \equiv H_1(w_1)H_2(w_2) = \begin{bmatrix} 0.6000 & -0.5657 & 0.5657 \\ 0.8000 & 0.4243 & -0.4243 \\ 0.0000 & 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix},$$

$$R \equiv H_2(w_2)H_1(w_1)A = \begin{bmatrix} 5.0000 & 3.0000 & 1.0000 \\ 0.0000 & 1.4142 & 2.8284 \\ 0.0000 & 0.0000 & 0.0000 \end{bmatrix}.$$

Матрица  $R$  имеет нулевую строку, поскольку  $A$  – вырожденная. Факт, что именно  $r_{33} = 0$  не случаен и отражает важное свойство  $QR$ -разложения хессенберговых матриц: если  $\text{rank } A = n - 1$ , то  $r_{nn} = 0$ , т.е. среди диагональных элементов матрицы  $R$  нулевым может быть только последний.

Если требуется аннулировать только один элемент вектора  $a$ , то используют матрицу вращения, или матрицу Гивенса. Матрица Гивенса  $G_{pq}$  отличается от единичной лишь  $2 \times 2$ -подматрицей

$$\begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix},$$

расположенной на строках и столбцах с номерами  $p$  и  $q$ . Нетрудно показать, что матрица Гивенса ортогональна.

Рассмотрим преобразование 2-вектора  $a$ ,  $a \neq 0$ ,

$$G_{12}a = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}.$$

Положив

$$\cos \varphi = \frac{a_1}{(a_1^2 + a_2^2)^{1/2}}$$

и

$$\sin \varphi = \frac{a_2}{(a_1^2 + a_2^2)^{1/2}},$$

получаем

$$G_{12}a = \begin{pmatrix} (a_1^2 + a_2^2)^{1/2} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Для построения  $QR$ -разложения матрицы с помощью матриц Гивенса требуется порядка  $2n^3$  операций типа умножения.

## §4.2 QR-алгоритм

Рассматриваемый алгоритм, разработанный в 60-х годах Д. Фрэнсисом (Англия) и независимо от него В.Н. Кублановской (Россия), лежит в основе численных методов решения проблемы собственных значений – нахождения всех собственных чисел произвольной матрицы.

$QR$ -алгоритм представляет собой итерационный метод, в процессе которого порождается последовательность  $A_k$ ,  $k = 0, 1, \dots$ ,  $A_0 = A$ , ортогонально-подобных матриц, сходящаяся при надлежащих условиях по форме к блочно-диагональной треугольной матрице, вещественной форме Шура. Каждый из диагональных блоков имеет размерность 1 или 2, что соответствует действительному собственному значению или паре комплексно-сопряженных собственных значений исходной матрицы.

При решении задачи вычисления сингулярного разложения  $QR$ -алгоритм будет применяться к симметричным матрицам, поэтому предельная блочно-диагональная матрица будет представлять собой диагональную матрицу.

Процесс начинается с того, что симметричная  $n \times n$ -матрица  $A$  с помощью ортогонально-подобных преобразований Хаусхолдера приводится к трехдиагональному виду. Это приведение осуществляется за  $n - 2$  шага.

Основной  $QR$ -алгоритм для диагонализации симметричной трехдиагональной  $n \times n$ -матрицы  $A$  можно описать следующими соотношениями для  $k = 1, 2, \dots$ :

$$\begin{aligned} A_0 &= A && \text{исходная матрица,} \\ A_{k-1} &= Q_{k-1} R_{k-1} && \text{QR-разложение,} \\ A_k &= R_{k-1} Q_{k-1} && \text{умножение в обратном порядке} \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

Из (4.2.1) следует, что  $A_k = Q_{k-1} A_{k-1} Q_{k-1}^T$ , т.е. порождается последовательность ортогонально-подобных матриц, имеющих одни и те же собственные значения. Обозначим их через  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ . В процессе итераций внедиагональные элементы стремятся к нулю и когда их значения становятся достаточно малыми, алгоритм останавливается и указанные значения заменяются точными нулями. При этом диагональные элементы дают приближения к собственным значениям.

Сходимость основного  $QR$ -алгоритма, как правило, очень медленная. Если все собственные значения различны по модулю,

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|,$$

то внедиагональный элемент  $a_{i+1,i}^k$  матрицы  $A_k$  сходится к нулю со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем

$$\frac{|\lambda_{i+1}|}{|\lambda_i|}.$$

Если же среди собственных значений имеются разные, но с одинаковыми модулями, то сходимость становится еще медленнее.

Для ускорения сходимости обычно используется модифицированный алгоритм – так называемый  $QR$ -алгоритм со сдвигами, который можно описать следующими рекуррентными соотношениями

$$\begin{aligned} A_0 &= A, \\ A_{k-1} - \tau_k E &= Q_{k-1} R_{k-1}, \\ A_k &= R_{k-1} Q_{k-1} + \tau_k E, \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

где  $\tau_k$  – сдвиг.

Выбор сдвига  $\tau_k$  основан на отмеченном выше (§4.1) свойстве  $QR$ -разложения. Если в качестве сдвига выбрать какое-либо собственное значение матрицы  $A$ , то на  $k$ -й итерации последняя строка матрицы  $R_{k-1}$  в  $QR$ -разложении будет нулевой и в позиции  $(n, n)$  матрицы

$A_k$  будет стоять точное собственное значение. В результате матрица расщепляется на две, что дает возможность уменьшить размер обрабатываемой матрицы на единицу.

Если в качестве сдвига выбрать значение  $\tau$  близким к собственному значению, то можно надеяться на существенное ускорение сходимости за счет уменьшения знаменателя прогрессии

$$\frac{|\lambda_{i+1} - \tau|}{|\lambda_i - \tau|} \ll \frac{|\lambda_{i+1}|}{|\lambda_i|}.$$

Опишем вариант выбора сдвигов, используемый в наиболее распространенной программе вычисления собственных значений [6].

Каждый сдвиг  $\tau_k$  равен собственному значению нижней угловой подматрицы матрицы  $A_k$

$$\begin{bmatrix} a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{bmatrix},$$

ближайшему к  $a_{nn}$ .

Как показано Дж. Уилкинсоном, сходимость  $QR$ -алгоритма для симметричных матриц при таком выборе сдвигов – не ниже квадратичной.

Овладев орудиями ремесла, можем теперь приступить к рассмотрению алгоритма сингулярного разложения.

### §4.3 Алгоритм сингулярного разложения

Пусть дана  $m \times n$ -матрица  $A$ , причем  $m \geq n$ . Если это условие не выполняется, то дополним матрицу необходимым числом нулевых строк. При этом сингулярные числа не изменятся. Задача состоит в вычислении разложения

$$A = USV^T, \quad (4.3.1)$$

где  $U$  – матрица размера  $m \times n$  с ортогональными столбцами,  $V$  – ортогональная матрица размера  $n \times n$ , а  $S$  – диагональная матрица сингулярных чисел размера  $n \times n$ .

Сингулярное разложение вычисляется в два этапа. На первом этапе матрица  $A$  с помощью ортогональных преобразований приводится к  $n \times n$ -верхней двухдиагональной матрице  $B$ . На втором этапе строится сингулярное разложение матрицы  $B$  путем диагонализации симметричной трехдиагональной матрицы  $B^T B$  с помощью специально модифицированного  $QR$ -алгоритма. Рассмотрим эти этапы подробнее.

### Приведение к двухдиагональной форме.

Процесс приведения исходной матрицы  $A$  к двухдиагональной форме с помощью преобразования Хаусхолдера осуществляется в следующем порядке. Сначала матрица  $A$  умножается слева на матрицу отражения  $P_1$ , аннулирующую все поддиагональные элементы первого столбца. Затем умножением справа на матрицу отражения  $Q_1$  аннулируются все элементы первой строки, начиная с 3-го. Далее умножением слева на матрицу  $P_2$  аннулируются все поддиагональные элементы второго столбца, затем умножением справа аннулируются элементы второй строки, начиная с 4-го, и так далее. Эта последовательность преобразований не более чем за  $2n - 1$  шагов приводит матрицу  $A$  к двухдиагональной форме следующего вида

$$P_n \dots P_1 A Q_1 \dots Q_{n-2} = \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (4.3.2)$$

где  $n \times n$ -матрица  $B$  имеет вид

$$B = \begin{bmatrix} q_1 & e_2 & & & \\ & q_2 & e_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & q_{n-1} & e_n \\ & & & & q_n \end{bmatrix}, \quad (4.3.3)$$

а через 0 обозначена нулевая матрица размера  $(m - n) \times n$ . Сама матрица  $B$  в программе задается двумя одномерными массивами.

Обозначая через  $P$  и  $Q$  матрицы resultирующих преобразований, запишем (4.3.2) в виде

$$PAQ = \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.3.4)$$

Легко проверить, что сингулярные числа матрицы  $B$  будут сингулярными числами и матрицы  $A$ . Таким образом, если сингулярное разложение матрицы  $B$  имеет вид

$$B = \bar{U} \bar{S} \bar{V}^T,$$

то разложение исходной матрицы  $A$  удовлетворяет соотношению

$$A = P^T \bar{U} \bar{S} \bar{V}^T Q^T. \quad (4.3.5)$$

Задача вычисления сингулярного разложения произвольной матрицы сводится, таким образом, к вычислению сингулярного разложения квадратной верхней двухдиагональной матрицы.

Приведение исходной матрицы к двухдиагональной форме с помощью преобразований Хаусхолдера и накопление левых и правых resultирующих преобразований (матриц  $P$  и  $Q$ ) представляет собой задачу первой и наиболее трудоемкой части программы.

### Сингулярное разложение двухдиагональной матрицы.

На этом этапе двухдиагональная матрица  $B$  с помощью  $QR$ -алгоритма приводится к диагональной форме

$$B \rightarrow B_1 \rightarrow B_2 \rightarrow \dots \rightarrow S,$$

где

$$B_{k+1} = U_k^T B_k V_k, \quad k = 0, 1, \dots, \quad B_0 = B$$

Здесь  $U_k$  и  $V_k$  - ортогональные матрицы, а  $B_k$  - верхняя двухдиагональная матрица для всех  $k$ . Матрицы  $V_k$  выбирают так, чтобы последовательность матриц  $B_k^T B_k$  сходилась к диагональной матрице. На каждом шаге  $QR$ -алгоритма матрица  $V_k$  строится так, чтобы матрица

$$V_k^T (B_k^T B_k - \tau E) \quad (4.3.6)$$

была правой треугольной. При построении  $V_k$  используются матрицы вращения Гивенса. Матрицы же  $U_k$  выбирают так (также матрицы вращения Гивенса), чтобы все  $B_k$  сохраняли двухдиагональную форму.

Величина сдвига  $\tau$  выбирается в соответствии с правилом, приведенным в §4.2 с той, однако, разницей, что матрица  $B_k^T B_k$  не формируется, а сдвиг выполняется неявным образом.

Алгоритмические подробности реализованного метода детально описаны в работах [3, 6].

Что касается точности, то обратный анализ погрешности показывает [8]: вычисленное разложение удовлетворяет уравнению

$$\bar{U} S \bar{V}^T = A + \Delta A, \quad (4.3.7)$$

где матрица эквивалентного возмущения допускает оценку

$$\|\Delta A\| \leq c \cdot macheps \cdot \|A\|. \quad (4.3.8)$$

Длительность реализации составляет  $\sim n^2(m + 6n)$  операций.

## Упражнения

4.1. Пусть  $A$  – матрица размера  $m \times n$ ,  $m < n$ , и  $A = USV^T$ . Пусть далее  $\bar{A}$  – матрица размера  $n \times n$ , полученная из  $A$  приписыванием  $(n - m)$  нулевых строк и  $\bar{A} = \bar{U}\bar{S}\bar{V}^T$ . Доказать, что  $\bar{S} = S$ ,  $\bar{V} = V$  и

$$U = [E_{m \times m} \ 0_{m \times (n-m)}] \bar{U},$$

если сингулярные числа упорядочены в порядке невозрастания.

4.2. Пусть  $B$  – двухдиагональная матрица размера  $n \times n$ , полученная с помощью ортогональных преобразований  $m \times n$ -матрицы  $A$ . Доказать, что сингулярные числа матриц  $B$  и  $A$  совпадают.

4.3. Пусть  $B$  – двухдиагональная матрица размера  $n \times n$ , полученная с помощью ортогональных преобразований  $m \times n$ -матрицы  $A$ . Доказать, что матрица  $B^T B$  – симметричная трехдиагональная.

## §4.4 Стандартные подпрограммы сингулярного разложения

Рассмотрим описания наиболее распространенных стандартных подпрограмм вычисления сингулярного разложения.

1) Подпрограмма **SVD** [6]. Алгол.

procedure svd(m, n, withu, withv, eps, tol) data:(a) result:(q, u, v);

$$A_{m \times n} = U_{m \times n} S_{n \times n} V_{n \times n}^T.$$

Реализованная на Алголе, полностью вытесненная в последние годы современными языками программирования Фортраном-77, Фортраном-90, Си и Паскалем, эта подпрограмма представляет не только исторический интерес. Большинство алгоритмических тонкостей всех подпрограмм вычисления сингулярного разложения обязаны своим происхождением именно этой подпрограмме.

Входные параметры:

$m$  – число строк матрицы  $A$ ,  $m \geq n$ ;

$n$  – число столбцов матрицы  $A$ ;

$withu$  – логическая переменная, принимающая значение true, если необходимо вычисление матрицы  $u$  в противном случае – false;

$withv$  – логическая переменная, принимающая значение true, если необходимо вычисление матрицы  $v$  в противном случае – false;

$eps$  – константа, используемая для проверки точности,  $eps \geq macheps$ ;

$tol$  – величина, равная отношению наименьшего представимого в машине положительного числа к значению  $macheps$ ;

$a$  – массив для размещения исходной матрицы.

Выходные параметры:

$q$  – массив сингулярных чисел, не обязательно упорядоченных;  
 $u, v$  – массивы для размещения ортогональных матриц  $U, V$ .

2) Подпрограмма **SVD** [4]. Фортран.

SUBROUTINE SVD(NM, M, N, A, W, MATU, MATV, V, IERR, RV1)

$$A_{m \times n} = U_{m \times n} S_{n \times n} V_{n \times n}^T.$$

Это наиболее популярная по цитируемости подпрограмма реализует тот же алгоритм, что и предыдущая, но использует другой критерий проверки точности, что делает ее машинно-независимой.

Входные параметры:

$NM$  – строчная размерность двумерных массивов, заявленная в вызывающей программе;

$M$  – число строк матрицы  $A$ ,  $M \geq N$ ;

$N$  – число столбцов матрицы  $A$ ;

$A$  – массив для размещения исходной матрицы;

$MATU$  – логическая переменная, принимающая значение TRUE, если необходимо вычисление матрицы  $U$  в противном случае – FALSE;

$MATV$  – логическая переменная, принимающая значение TRUE, если необходимо вычисление матрицы  $V$  в противном случае – FALSE;

$RV1$  – рабочий одномерный массив размера  $N$ .

Выходные параметры:

$W$  – массив сингулярных чисел, не обязательно упорядоченных;

$U, V$  – массивы для размещения ортогональных матриц  $U, V$ ;

$IERR$  – флаг нормального выхода из подпрограммы (значение равно 0); если после 30 итераций  $k$ -е сингулярное число не было вычислено, переменная  $IERR$  принимает значение  $k$ .

3). Подпрограмма **F02WAF** библиотеки **NAG**. Фортран.

SUBROUTINE

F02WAF(M, N, A, NRA, WANTB, B, SV, WORK, LWORK, IFAIL)

$$A_{m \times n} = U_{m \times m} S_{n \times n} V_{n \times n}^T.$$

Входные параметры:

$M$  – число строк матрицы  $A$ ,  $M \geq N$ ;

$N$  - число столбцов матрицы  $A$ ;

$A$  - массив для размещения исходной матрицы. При успешном выполнении содержит  $N \times N$ -матрицу  $V$ ;

$NRA$  - строчная размерность двумерных массивов, заявленная в вызывающей программе;

$WANTB$  - логическая переменная, которой должно быть присвоено значение  $.TRUE.$ , если требуется вычисление вектора  $U^T b$ ;

$B$  - одномерный массив для хранения вектора  $b$  и вектора  $U^T b$  при успешном завершении, если  $WANTB=.TRUE.$ ;

$WORK$  - рабочий одномерный массив размера  $LWORK$ ;

$LWORK$  - рабочая переменная,  $LWORK \geq 3 \times N$ .

Выходные параметры:

$SV$  - массив упорядоченных в порядке невозрастания сингулярных чисел;

$ierr$  - флаг ошибок.

4) Подпрограмма **SVDCMP** пакета Numerical Recipes [10]. Паскаль. procedure SVDCMP(var a: glmbyn; m,n: integer; var s: gln; var v: glnbyn)

$$A_{m \times n} = U_{m \times n} S_{n \times n} V_{n \times n}^T.$$

Вызывающая программа должна содержать описания типов:

```
type
  reatype = extended; { или real, single }
  glmbyn = array [1..m, 1..n] of reatype;
  gln = array [1..n] of reatype;
  glnbyn = array [1..n, 1..n] of reatype;
```

Все результаты вычислений, приведенные в настоящем пособии, реализованы с помощью этой подпрограммы. Приведенные описания типов несколько отличаются от оригинала.

Входные параметры:

$m$  - число строк матрицы  $A$ ,  $m \geq n$ ;

$n$  - число столбцов матрицы  $A$ ;

$a$  - массив для размещения исходной матрицы и матрицы  $U$  при успешном завершении.

Выходные параметры:

$s$  - массив сингулярных чисел, не обязательно упорядоченных;

$v$  - массив для размещения матрицы  $V$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Форсайт, К. Молер. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений. Пер. англ. - М.: "Мир", 1969.
2. В.В. Воеводин. Линейная алгебра. М.: "Наука", Физматгиз, 1974.
3. Ч. Лоусон, Р. Хенсон. Численное решение задач метода наименьших квадратов. Пер. англ. - М.: "Наука", Физматгиз, 1986.
4. Дж. Форсайт, М. Малькольм, К. Молер. Машинные методы математических вычислений. Пер. англ. - М.: "Мир", 1980.
5. Дж. Уилкинсон. Алгебраическая проблема собственных значений. Пер. англ. - М.: "Наука", 1970.
6. Дж. Уилкинсон, К. Райнш. Справочник алгоритмов на языке ALGOL. Линейная алгебра. Пер. англ. - М.: "Машиностроение", 1976.
7. Н.В. Логинов. Нахождение собственных векторов с помощью сингулярного разложения матрицы. ВЦ РАН, Сообщения по прикладной математике., М.: ВЦ РАН, 1995.
8. Дж. Уилкинсон. Singular-Value Decomposition - Basic Aspects. in "Numerical Software - Needs and Availability", Academic Press, London, 1978.
9. А. Алберт. Регрессия, псевдоинверсия и рекуррентное оценивание. Пер. англ. - М.: "Наука", Физматгиз, 1977.
10. W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing. Cambridge University Press, 1985.
11. J. Dongarra, J.R. Bunch, C.B. Moler, G.W. Stewart. LINPACK User' Guide. SIAM Publications, Philadelphia, 1979.



## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>Предисловие</b> . . . . .	3
<b>Введение</b> . . . . .	5
<b>Глава 1. Линейная алгебра и теория матриц</b>	
§1.1. Векторы и матрицы . . . . .	10
§1.2. Нормы векторов и матриц . . . . .	16
<b>Глава 2. Сингулярные числа и сингулярное разложение матриц</b>	
§2.1. Сингулярные числа . . . . .	20
§2.2. Теорема о сингулярном разложении . . . . .	21
§2.3. Обусловленность сингулярного разложения . . . . .	27
§2.4. Линейная зависимость столбцов матрицы . . . . .	30
§2.5. Аппроксимация матриц . . . . .	31
§2.6. Нахождение собственных векторов матрицы . . . . .	33
<b>Глава 3. Обобщенные решения системы линейных алгебраических уравнений</b>	
§3.1. Сингулярные базисы . . . . .	43
§3.2. Системы линейных алгебраических уравнений . . . . .	44
§3.3. Обобщенные решения системы линейных уравнений . . . . .	49
§3.4. Псевдообратная матрица . . . . .	52
§3.5. Устойчивость псевдорешений . . . . .	56
§3.6. Решение плохо обусловленных систем линейных уравнений . . . . .	58
§3.7. Задача наименьших квадратов . . . . .	59
<b>Глава 4. Реализация сингулярного разложения матриц</b>	
§4.1. Основные ортогональные преобразования . . . . .	67
§4.2. QR-алгоритм . . . . .	71
§4.3. Алгоритм сингулярного разложения . . . . .	73
§4.4. Стандартные подпрограммы сингулярного разложения . . . . .	76
<b>Литература</b> . . . . .	79

Николай Васильевич Логинов

Сингулярное разложение матриц

Учебное пособие

Редактор Перевезенцева М.В.

Технический редактор Кондратьева Е.В.

Подп. в печать 5.04.96. Формат 60 × 84. 1/16.

Объем 5,0 п.л. Тираж 300 экземпляров. Заказ 10.

МГАПИ