Ítem (a) Sea $D \in \mathbb{R}^{m\times n}$ diagonal. Hallar al menos 2 descomposiciones en valores singulares distintas de D.

Resolución:

Hay 3 casos: que D tiene más filas que columnas (es decir, $m > n$), al revés ($m < n$), o que sea cuadrada ($m = n$).

NO separemos en casos todavía. No necesitamos.

Estamos buscando una descomposición $D = U\Sigma V^t$. Queremos que las matrices de las puntas sean ortogonales y cuadradas, y que la del medio sea diagonal. ¿Cómo son los tamaños de cada una?

$D \in \mathbb{R}^{m\times n}$ y es un producto de matrices. Cuando dos matrices se multiplican, por ejemplo si tenemos $A \in \mathbb{R}^{a\times b}, B \in \mathbb{R}^{c\times d}$, entonces necesariamente $b = c$, y el resultado $AB \in \mathbb{R}^{a\times d}$. Es decir, los numeritos del medio de los tamaños tienen que ser iguales y el tamaño del resultado es los numeritos de las puntas (es como si se "simplificaran" los del medio). Dicho un poco más formalmente:

- La cantidad de columnas de la matriz de la izquierda tiene que ser igual a la cantidad de filas de la matriz de la derecha
- La cantidad de filas del resultado es la cantidad de filas de la primer matriz, y la cantidad de columnas, igual a la cantidad de columnas de la segunda matriz.

Haciendo dos veces el razonamiento de arriba (¡meditarlo!), llegamos a que la cantidad de filas de D es igual a la cantidad de filas de U, y la cantidad de columnas de D es igual a la cantidad de columnas de V^t. Además estas matrices deben ser cuadradas (la descomposición lo pide), así que obtuvimos que $U \in \mathbb{R}^{m\times m}, V^t \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Y como Σ tiene que poder multiplicarse a izquierda por U y a derecha por V, la cantidad de filas de Σ tiene que ser m, y la cantidad de columnas, n. Todo esto fue para justificar que el tamaño de U (la que está a la izquierda) es el numerito de la izquierda del tamaño de D; el tamaño de V^t (que está a la derecha) es el numerito de la derecha del tamaño de D, y el tamaño de Σ es igual al tamaño de D. Claramente no hace falta justificarlo en el parcial, pero sirve saber cómo obtener estos tamaños por si uno duda.

Uno recuerda que necesita los autovalores de D^tD... ¿o era la otra? ¿O las dos servían? Cualquiera sirve mientras recordemos quiénes son los v_i y los u_i. Calculemos alguna.

Las columnas de D^tD van a ser los autovectores de V. ¿Por qué? ¿Qué pasa si no me acuerdo?

$D = U\Sigma V^t, D^t = V\Sigma^t U^t$ entonces $D^tD = V\Sigma^t U^t U\Sigma V^t$. Recordemos que queremos que U, V sean ortogonales. En particular $U^tU = Id$ así que $D^tD = V\Sigma^t\Sigma V^t$. Si uno duda entre si los autovectores de esta matriz son las columnas de V o las de U, saber que en la expresión solo aparecen V y V^t puede ayudar a intuir que la respuesta correcta es que los autovectores son las columnas de V (es un ejercicio de la práctica. Tip: usen que V es una matriz ortogonal y que por lo tanto sus columnas son vectores ortonormales).

Joya. Necesitamos esos autovalores y autovectores. ¿Cómo es D^tD?

$D^t \in \mathbb{R}^{n\times m}, D \in \mathbb{R}^{m\times n} \Rightarrow D^t D \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

Miremos un elemento ($1 \le i, j \le n$):
$(D^t D)_{ij} = \sum_{k=1}^{m} (D^t)_{ik} (D)_{kj} = \sum_{k=1}^{m} d_{ki}\ d_{kj}$.
La matriz D era diagonal, así que varios de estos sumandos son 0. Para que un sumando no sea 0 una condición necesaria es que ambos factores de ese producto sean elementos de la diagonal de D (es condición necesaria y no suficiente porque los elementos de esa diagonal podrían ser 0 también).

Luego para que un sumando no sea 0 necesitamos que $k = i$ y que $k = j$, pero por lo tanto necesariamente $i = j$.

Resultado importante de este razonamiento: si $i \neq j$, como ningún k puede ser igual a dos números distintos a la vez, todos los sumandos son 0. Esto dice que el $D^t D$ es una matriz diagonal. (Medio que era lo que esperábamos, ¿no? Porque era el producto de dos matrices diagonales)

Si $i = j$, entonces de la suma solamente sobrevive el sumando que tiene $k = i = j$. Pero ¡ojo!, la matriz es rectangular, así que podría no existir tal k. Por ejemplo, si $m < n$ entonces $(D^t D)_{m+1,m+1} = \sum_{k=1}^{m} d_{k,m+1} d_{k,m+1} = 0$ porque k solo puede llegar hasta m.

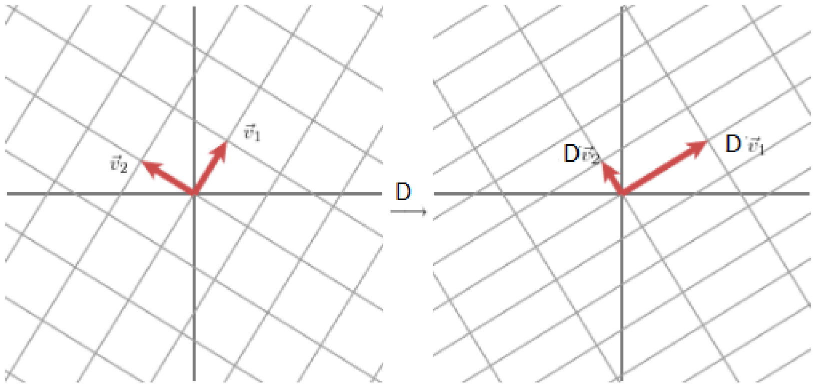
Separemos en casos ahora sí: supongamos que $m \ge n$. El caso restante lo vemos después. Como $i, j \le n \le m$, este problema nunca va a suceder, y por lo tanto:
$(D^t D)_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ d_{ii}^2 & \text{si } i = j \end{cases}$

Como esta matriz es diagonal, sus autovalores son d_{ii}^2. Por lo tanto los elementos de la diagonal de Σ van a ser la raíz cuadrada de estos números, es decir, $|d_{ii}|$. Ojo, tienen que estar ordenados de mayor a menor. Quedémonos con el caso fácil: asumamos que ya vienen ordenados. Sino, después vemos qué hacemos (recordemos que también falta el caso $m < n$).

Supongamos, entonces, que somos felices porque vienen ordenados. Llamamos $\sigma_i = |d_{ii}|$ a los elementos de la diagonal de Σ.

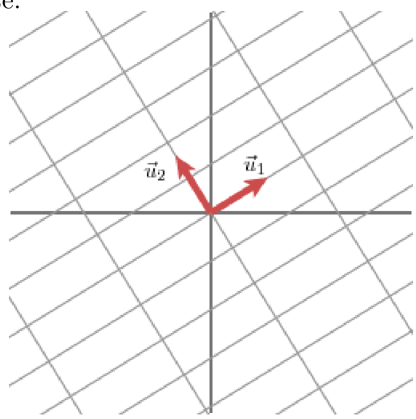
¿Quiénes son los autovectores? La matriz era diagonal, entonces los autovectores son los vectores canónicos $e_1, \cdots, e_n$ (si no se entiende por qué vale esto, es un ejercicio **fundamental** de lo que hay que convencerse).

Además sabemos que $Dv_i = \sigma_i u_i$. Conviene tener una idea geométrica de qué significa esta igualdad mágica. Si D fuera cuadrada de 2×2, y no singular, tendríamos lo siguiente:



Es decir, los vectores v_i forman una base ortonormal del espacio de salida. D los agarra y devuelve otros vectores ortogonales (del espacio de llegada) posiblemente estirados.

A los vectores u_i los formamos normalizando los vectores Du_i. El dibujito es este:



(Aclaro que las imágenes fueron robadas impunemente del artículo `http://www.ams.org/publicoutreach/feature-column/fcarc-svd`, cuya lectura recomiendo)

Volviendo, tenemos que calcular estos vectores u_i aprovechando que sabemos que $Dv_i = \sigma_i u_i$. Queremos pasar dividiendo σ_i, pero NO SE PUEDE DIVIDIR POR 0 así que tenemos que distinguir ese caso. Como están ordenados de mayor a menor, llamamos $r = \max\{i : \sigma_i > 0\}$. Este número coincide con el rango de D.

Si $i \leq r$ entonces $u_i = \frac{Dv_i}{\sigma_i}$. Ahora bien, $v_i = e_i$ luego $u_i = \frac{col_i(D)}{\sigma_i}$. Además, D era diagonal. Su i-ésima columna es justamente $d_{ii}e_i$ así que (recordando quiénes eran los σ_i) tenemos que $u_i = \frac{d_{ii}e_i}{|d_{ii}|} = sgn(d_{ii})e_i$.

Si $i > r$ entonces completamos los u_i a la base canónica. Más formalmente:

$$u_i = \begin{cases} sgn(d_{ii})\ e_i & \text{si } i \leq r \\ e_i & \text{si } i > r \end{cases}$$

Bien, ya tenemos una decomposición SVD de D (asumiendo $m \geq n$ y que los autovalores de D aparecían ordenados en la diagonal).

¿Cómo conseguimos otra?

Funciona "pasarle los signos" de los u_i a los v_i. Una intuición de por qué funciona, que usa un resultado útil, es la siguiente:

Vale que si $D = U\Sigma V^t$ entonces $D = \sum_{i=1}^{n} u_i \sigma_i v_i^t = \sum_{i=1}^{r} u_i \sigma_i v_i^t$ donde los v_i y los u_i son las columnas de V y de U respectivamente. Observemos que esto dice que estamos descomponiendo a D en una suma de r matrices de rango 1 (vimos varios ejemplos en la cursada: son el resultado de multiplicar un vector columna por un vector fila). Es un lindo ejercicio para hacer (sugerencia, prueben que tanto D como la expresión dan lo mismo multiplicado por una base del espacio - y usen un ejercicio de la primer práctica).

Si defino a los u_i como los canónicos y v_i como los vectores que tienen el signo de d_{ii}, la expresión de recién no cambia. En realidad esto es suficiente para demostrar que obtuvimos otra decomposición, pero se puede chequear que si definimos unas nuevas U y V con ese swap de signos, las cosas funcionan. Queda de ejercicio; si hacen la cuenta van a pasar por una expresión muy parecida a la de arriba.

Sin embargo, el alumno o la alumna avispada tal vez esté leyendo esto y grite "¡pero los d_{ii} podrían ser todos positivos, o 0! Tal vez no obtuvimos otra descomposición, man."

Y tendría razón. Entonces una manera de asegurarnos la victoria sería multiplicar a todos los v_i por -1 y a todos los u_i por -1. Esto se consigue multiplicando por $-Id$ (del tamaño adecuado) a cada lado:

$D = U\Sigma V^t \Rightarrow (-Id)D(-Id) = (-Id)U\Sigma V^t(-Id)$.

La expresión de la izquierda no cambia (¡chequearlo si dudan!). Luego obtenemos: $D = \hat{U}\Sigma\hat{V}^t$, con $\hat{U} = (-Id)U, \hat{V} = (-Id)V$. Y listo.

Mentira que listo. Faltan dos casos. Se matan rápido:

- Si $m < n$ (y los autovalores están ordenados) definimos $\tilde{D} = D^t$. Esta cumple $m > n$. En particular es mayor o igual, así que por el razonamiento anterior obtenemos una descomposición SVD para la matriz: digamos que $\tilde{D} = \tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V}^t$. Transponiendo a cada lado de la igualdad conseguimos una descomposición SVD para D.

- ¿Qué pasa si los σ_i no están ordenados de mayor a menor? Hacemos algo parecido al primer ítem: obtenemos una matriz $\tilde{D}$ con los autovalores ordenados de mayor a menor. Esto se hace multiplicando a izquierda y a derecha por matrices de permutación apropiadas O_1 y O_2. Sabemos que existen, y no es difícil calcularlas. Digamos que $\tilde{D} := O_1 D O_2$ es la matriz diagonal con los autovalores de D ordenados. Por lo argumentado (incluso si $m < n$) podemos obtener una descomposición SVD para la matriz. Nuevamente digamos que $\tilde{D} = \tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V}^t$. Es decir, $O_1 D O_2 = \tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V}^t$. Por lo tanto $D = \underbrace{O_1^t\tilde{U}}_{U}\,\tilde{\Sigma}\,\underbrace{\tilde{V}^t O_2^t}_{V^t}$ es la descomposición que queremos.

Un par de comentarios antes de terminar el ejercicio:

- En la cuenta de recién $O_1^t\tilde{U}$ le cambia las *filas* a la matriz, así que no sucede que simplemente se desordenen los u_i (pasa algo parecido con los v_i). Es decir, no aparecen los vectores canónicos desordenados de la resolución que hicimos en el pizarrón. De todas maneras, como los vectores son los canónicos, quedan otros vectores canónicos. ¿Se podrá, definiendo otras $\tilde{D}, O_1, O_2$, forzar a que aparezcan?

- Al principio del ejercicio, podríamos haber calculado DD^t si teníamos que $m < n$ (en vez de D^tD) para arreglar el tema de los ceros. O podríamos haber calculado cualquiera y distinguir entre los dos casos a lo largo del ejercicio, o agregar notación. Hay muchas resoluciones distintas.

- Las matrices O_1 y O_2 se pueden calcular efectivamente. O_1 debe intercambiar las filas de D. ¿Cómo? Pues tiene que mandar el autovalor más grande a la fila 1, el segundo autovalor más grande a la fila 2, etc. Va a ser un producto de matrices de permutación P_{ij}. Una vez hecho esto, convencerse de que, como D es diagonal, en realidad O_2 tiene que hacer un trabajo equivalente a O_1 pero con las columnas de O_1D (para llevar a los elementos correspondientes a la diagonal de la matriz). Es decir, resulta que $O_2 = O_1$.

Ítem (b): Hallar una descomposición en valores singulares de la matriz $\begin{pmatrix} D \\ e_i^t \end{pmatrix}$, siendo D una matriz diagonal cuadrada de $n \times n$ y e_i el i-ésimo vector canónico de $\mathbb{R}^n$. Describir de forma explícita las dimensiones de las matrices U, Σ y V de su SVD, sus elementos, y cómo fueron calculados. (12 pts.)

Llamemos A a la matriz. Como antes, calculemos A^tA.

Notemos que $A^t \in \mathbb{R}^{n\times(n+1)}, A \in \mathbb{R}^{(n+1)\times n} \Rightarrow A^tA \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Además, como D es diagonal y por lo tanto simétrica, $A^t = \begin{pmatrix} D & e_i \end{pmatrix}$ así que multiplicando por bloques obtenemos que $A^tA = D^2 + e_ie_i^t$. Es decir, obtuvimos la siguiente matriz:

$$A^tA = \begin{bmatrix} d_{11}^2 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & d_{ii}^2 + 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & d_{nn}^2 \end{bmatrix}$$

Esta matriz es diagonal, así que tiene los autovalores bien a la vista. Nuevamente los elementos de la diagonal pueden no venir de mayor a menor. Esta vez usemos otro "approach": Sea σ_1 la raíz cuadrada del autovalor más grande y $\hat{e}_1$ el vector canónico asociado a ese autovalor (si hay autovalores repetidos, elegimos alguno), σ_2 la raíz cuadrada del segundo autovalor más grande, $\hat{e}_2$ el asociado a ese autovalor, y así siguiendo hasta $\sigma_n, \hat{e}_n$.

Sea r el rango de A, que coincide con la cantidad de valores singulares (elementos de la diagonal de A^tA que son distintos de cero).

Como $Av_j = \sigma_ju_j$, si $j \leq r$ podemos pasar dividiendo y definimos $u_j = \frac{Av_j}{\sigma_j}$. Ojo, usamos el índice j porque i ya está tomado en el enunciado.

Como $v_j = \hat{e}_j$, tenemos que si $j \leq r$ entonces u_j es una columna de A dividida por σ_j.

Tenemos que inventarnos alguna notación para el número de columna. Una manera es decir que $\hat{e}_j = e_{f(j)}$, con f un simple reordenamiento del conjunto $\{1, \cdots, n\}$ (otra manera de verlo es que f es una función biyectiva). Es como si les pasáramos los sombreros a los índices.

Hagamos eso. Entonces $u_j = \frac{Ae_{f(j)}}{\sigma_j} = \frac{col_{f(j)}(A)}{\sigma_j}$. Ojo que el $e_{f(j)}$ que aparece pertenece a $\mathbb{R}^n$.

σ_j era el j-ésimo de los autovalores de A^tA ordenados de mayor a menor (y ese ordenamiento estaba dado por la función f que definimos).

Hay uno de los σ_j que es especial: el que es $\sqrt{d_{ii}^2 + 1}$. Es más, es el que tiene $j = f^{-1}(i)$ (¡a meditarlo!).

Si $j \neq f^{-1}(i)$ entonces $u_j = \frac{d_{f(j)f(j)}e_{f(j)}}{\sigma_j} = \frac{d_{f(j)f(j)}e_{f(j)}}{|d_{f(j)f(j)}|} = sgn(d_{f(j)f(j)})e_{f(j)}$. Como el $e_{f(j)}$ que aparece provino de la multiplicación por la matriz A, pertenece a $\mathbb{R}^{n+1}$.

Si $j = f^{-1}(i)$, entonces $u_j = \frac{d_{f(j)f(j)}}{\sqrt{d_{f(j)f(j)}^2+1}}e_{f(j)}$. No es tan feo, solo que no se cancelan cosas.

Recordemos que todo esto era si $i \leq r$ (el rango de la matriz). Si $i > r$ entonces tenemos que completar los u_i a una base ortogonal de $\mathbb{R}^{n+1}$. ¿Cómo? Con los vectores de la base canónica que faltan.

Conseguidos los u_j, los σ_j, y los v_j, obtenemos la descomposición SVD de la matriz en $U\Sigma V^t$. Con un razonamiento idéntico al del ejercicio 1 con $m = n+1$ (y chequeando que los tamaños de los vectores que conseguimos hayan sido los correctos), tenemos que $U \in \mathbb{R}^{(n+1)\times(n+1)}$, $\Sigma \in \mathbb{R}^{(n+1)\times n}$, $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$.