

Fachbereich II
Mathematik - Physik - Chemie

01/2022

Diana Estévez Schwarz

Visualisierung der Singulärwertzerlegung (SVD)
in \mathbb{R} , \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3

Visualization of the Singular Value Decomposition (SVD)
in \mathbb{R} , \mathbb{R}^2 and \mathbb{R}^3 (in German)

Reports in Mathematics, Physics and Chemistry
Berichte aus der Mathematik, Physik und Chemie

ISSN (print): 2190-3913

Reports in Mathematics, Physics and Chemistry

Berichte aus der Mathematik, Physik und Chemie

The reports are freely available via the Internet:

http://www1.bht-berlin.de/FB_II/reports/welcome.htm

01/2022, January 2022

© 2022 Diana Estévez Schwarz

Visualisierung der Singulärwertzerlegung (SVD) in \mathbb{R} , \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3

Visualization of the Singular Value Decomposition (SVD) in \mathbb{R} , \mathbb{R}^2 and \mathbb{R}^3

(in German)

Update history

Jan 13, 2022: einige Überarbeitungen auf S.22/23

Editorial notice / Impressum

Published by / Herausgeber:

Fachbereich II

Beuth Hochschule für Technik Berlin

Luxemburger Str. 10

D-13353 Berlin

Internet: <https://www.bht-berlin.de/ii>

Responsibility for the content rests with the author(s) of the reports.

Die inhaltliche Verantwortung liegt bei den Autor/inn/en der Berichte.

ISSN (print): 2190-3913

Visualisierung der Singulärwertzerlegung (SVD) in \mathbb{R} , \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3

Diana Estévez Schwarz

Zusammenfassung

Die Singulärwertzerlegung (engl. singular value decomposition und daher kurz SVD) einer Matrix A ist eine Darstellung $A = U\Sigma V^T$ mit $U^T U = I$, $V^T V = I$ und einer Diagonalmatrix Σ mit nichtnegativen absteigenden Singulärwerten.

Da die SVD in den letzten Jahrzehnten zu einem der wichtigsten Werkzeuge der Linearen Algebra geworden ist, wird sie zunehmend in Grundveranstaltungen an Hochschulen eingeführt und es existieren bereits viele Materialien zur Visualisierung der Anwendungsmöglichkeiten und der Zerlegung selbst.

In diesem Beitrag wird als Ergänzung dazu dargestellt, wie mit einer Visualisierung der drei Schritte

$$x \rightarrow V^T x \rightarrow \Sigma V^T x \rightarrow U \Sigma V^T x = Ax$$

für $\|x\|_2 = 1$ und Matrizen aus $\mathbb{R}^{m \times n}$ für $1 \leq m, n \leq 3$ einige Eigenschaften verdeutlicht werden können.

Insbesondere werden $AV = U\Sigma$, die absteigenden Singulärwerte, $\text{rang}(A)$, $\|A\|_2$ und $\text{cond}_2(A)$ veranschaulicht. Auch die Eindeutigkeit von Σ und die Eigenschaft, dass weder U noch V eindeutig bestimmt sind, werden bildlich erklärt.

Inhaltsverzeichnis

1	Diagonale Matrizen in $\mathbb{R}^{m \times n}$	7
1.1	(Quadratische) Diagonalmatrizen	7
1.2	Allgemeine Diagonale Matrizen	8
1.3	Diagonale Matrizen mit nichtnegativen und absteigenden Diagonalelementen	9
1.4	Visualisierung	9
2	Orthogonale Matrizen	13
2.1	Definition und Eigenschaften	13
2.2	Beispiele in \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3	14
2.2.1	Permutationen	14
2.2.2	Einfache Spiegelungen	14
2.2.3	Drehungen	14
2.2.4	Kombinationen	15
3	Die Singulärwertzerlegung	16
3.1	Definition und Eigenschaften	16
3.2	Überlegungen zur Eindeutigkeit	18
3.3	Singuläre und Rechteckige Matrizen	20
3.4	Aufteilung und Approximation	22

Einleitung

Elementare Konzepte und Zusammenhänge in der Linearen Algebra werden üblicherweise in \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3 visualisiert, auch wenn sie letztendlich im \mathbb{R}^n , \mathbb{C}^n oder allgemeinen Vektorräumen definiert werden können. Bei fortgeschrittenen Themen ist eine Visualisierung in \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3 auch sehr hilfreich. Da geeignete Bilder aber nicht immer leicht zu erstellen sind, wird oft darauf verzichtet und auf das hoffentlich schon ausgeprägte Vorstellungsvermögen der Studierenden gesetzt.

Da durch die COVID-19-Pandemie viel Präsenzlehre durch online-Angebote ersetzt werden muss, ist die Erklärung mit Skizzen an der Tafel, Gesten und durch Dialog mit Studierenden schwieriger geworden. Gute Visualisierungen und leichte Aufgaben, mit denen der Einstieg in den Stoff erleichtert werden, sind daher um so wichtiger.

Die Singulärwertzerlegung von Matrizen ist ein zentrales Werkzeug in der angewandten Mathematik, seitdem effiziente numerische Methoden zur Berechnung existieren. Ein Verständnis der Zerlegung kann aber auch ohne Kenntnis dieser Algorithmen erlangt werden. Sehr schöne einführende Erklärungen findet man beispielsweise in [2], [3] und [4]. In diesem Artikel werden ergänzend dazu Visualisierungen in \mathbb{R} , \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3 betrachtet. Dabei werden insbesondere Einheitskugeln zur Erläuterung verwendet, da sie bei den Definitionen der Norm und Kondition einer Matrix ohnehin eine wichtige Rolle spielen.

Aus didaktischen Gründen ist dieser Beitrag wie folgt aufgebaut:

- Grundlagen diagonalen Matrizen,
- Grundlagen orthogonaler Matrizen,
- Zerlegung von beliebigen reellen Matrizen in ein Produkt aus einer orthogonalen Matrix, einer Diagonalmatrix und einer weiteren orthogonalen Matrix (SVD); Eigenschaften dieser Zerlegung.

Diese visuelle Einführung hat zum Ziel, die Konzepte der Singulärwertzerlegung zu verdeutlichen. Die Zuordnungsaufgaben können insbesondere als Umfragen mit den Studierenden besprochen werden. Auf die Anwendungen (z.B. Pseudoinverse, Lösung nicht eindeutig lösbarer Gleichungssystemen, Hauptkomponentenanalyse) wird hier nicht eingegangen. Eine umfangreiche Darstellung der SVD kann in [1] gefunden werden.

1 Diagonale Matrizen in $\mathbb{R}^{m \times n}$

1.1 (Quadratische) Diagonalmatrizen

Unter dem Begriff Diagonalmatrix versteht man in der Linearen Algebra in der Regel eine quadratische Matrix

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & d_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n},$$

bei der alle Elemente außerhalb der Hauptdiagonalen Null sind.

Beschäftigt man sich erstmals mit Eigenschaften von allgemeinen quadratischen Matrizen, so ist es sehr hilfreich, sich zunächst vorzustellen, was die Begriffe für Diagonalmatrizen bedeuten.

- Regularität bedeutet, dass alle Diagonalelemente ungleich 0 sind.
- Die Determinante einer Diagonalmatrix ist das Produkt der Diagonaleinträge.
- Die Eigenwerte einer Diagonalmatrix sind die Diagonaleinträge.
- Der Spektralradius ist der Betrag des betragsmäßig größten Diagonalelements.
- Die Norm $\|D\|_2$ der Diagonalmatrix ist auch der Betrag des betragsmäßig größten Diagonalelements.
- Die Inverse D^{-1} einer regulären Diagonalmatrix D ist die Diagonalmatrix, die in der Diagonalen die Kehrwerte der ursprünglichen Diagonalmatrix enthält.
- Die Kondition $\text{cond}_2(A) = \|D\|_2 \|D^{-1}\|_2$ einer regulären Diagonalmatrix ist der Betrag des betragsmäßig größten Diagonalelements geteilt durch den Betrag des betragsmäßig kleinsten Diagonalelements.

Betrachtet man nicht-quadratische Matrizen, so ist es auch hilfreich, zunächst die Eigenschaften von Matrizen zu verstehen, bei denen alle Elemente mit unterschiedlichen Zeilen- und Spaltenindex Null sind.

1.2 Allgemeine Diagonale Matrizen

Definition 1. Sei $\mu := \min\{m, n\}$. Dann sei für beliebige reelle Zahlen

$$d_1, d_2, \dots, d_\mu$$

die diagonale Matrix $D \in \mathbb{R}^{m \times n}$ definiert als

$$d_{i,j} = \begin{cases} d_i & \text{für } i = j, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

bzw.

$$D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_\mu) \in \mathbb{R}^{m \times n}.$$

Für $m < n$ bedeutet dies

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & d_m & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

und für $m > n$

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & d_n \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}.$$

Offensichtlich haben für beliebige m und n die Matrizen $D^T D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $DD^T \in \mathbb{R}^{m \times m}$ reelle, nichtnegative Eigenwerte. Die μ größten Eigenwerte dieser beiden quadratischen Matrizen

$$d_1^2, \dots, d_\mu^2$$

stimmen überein und die restlichen Eigenwerte sind Null.

1.3 Diagonale Matrizen mit nichtnegativen und absteigenden Diagonalelementen

Definition 2. Für $\mu := \min\{m, n\}$ seien

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \sigma_\mu \geq 0.$$

und

$$\Sigma := \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_\mu) \in \mathbb{R}^{m \times n}.$$

Für Σ gilt:

- Die Matrizen $\Sigma^T \Sigma \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $\Sigma \Sigma^T \in \mathbb{R}^{m \times m}$ haben reelle, nichtnegative Eigenwerte. Die μ größten Eigenwerte dieser beiden quadratischen Matrizen

$$\sigma_1^2 \geq \sigma_2^2 \geq \dots \sigma_\mu^2 \geq 0$$

stimmen überein und die restlichen Eigenwerte sind Null.

- Für alle induzierten Matrixnormen gilt:

$$\|\Sigma\|_2 := \sup_{x \neq 0} \frac{\|\Sigma x\|_2}{\|x\|_2} = \max_{\|x\|_2=1} \|\Sigma x\|_2 = \sigma_1.$$

- Für die Kondition gilt:

$$\text{cond}_2(A) = \frac{\max_{\|x\|_2=1} \|\Sigma x\|_2}{\min_{\|x\|_2=1} \|\Sigma x\|_2} = \frac{\sigma_1}{\sigma_\mu}.$$

Zudem gilt für $r := \text{Rang}(\Sigma)$ und Einheitsvektoren e_i :

- $\text{Kern}(\Sigma) = \text{Spann}(e_{r+1}, e_{r+2}, \dots, e_n)$,
- $\text{Bild}(\Sigma) = \text{Spann}(e_1, e_2, \dots, e_r)$.

1.4 Visualisierung

Für $m = n = 3$ und

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.6 & 0 \\ 0 & 0 & 0.3 \end{pmatrix} \quad (1)$$

bilden wir durch Multiplikation alle Punkte der Einheitskugel auf ein Ellipsoid ab und die Standardbasis auf die Hauptachsen. Da $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3$, ist die Halbachse in x-Richtung größer gleich der Halbachse in y-Richtung größer gleich der Halbachse in z-Richtung, vgl. Abbildung 1.

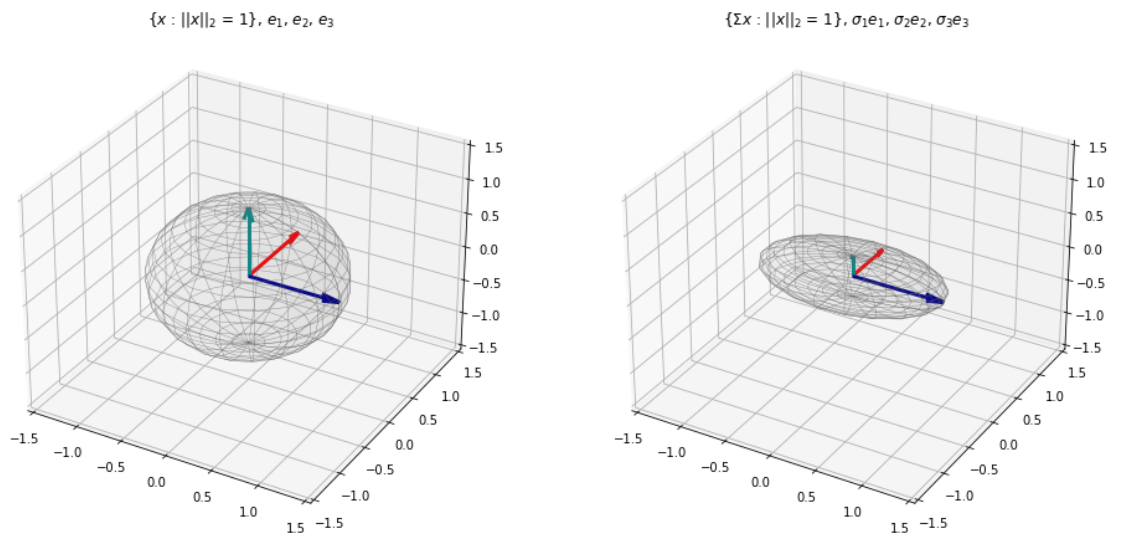


Abbildung 1: Abbildung der Einheitskugel unter der Matrix Σ aus Gleichung (1).

Aufgabe 1. Ordnen Sie die folgenden Aussagen den Bildern von Abbildungen 2 und 3 zu:

1. $\text{Kern}(\Sigma) = \text{Spann}(e_2, e_3) \subset \mathbb{R}^3$

• Bild A

2. $\text{Kern}(\Sigma) = \text{Spann}(e_3) \subset \mathbb{R}^3$

• Bild B

3. $\text{Kern}(\Sigma) = \text{Spann}(e_2) \subset \mathbb{R}^2$

• Bild C

4. $\text{Bild}(\Sigma) = \text{Spann}(e_1, e_2) \subset \mathbb{R}^3$

• Bild D

5. $\text{Bild}(\Sigma) = \text{Spann}(e_1) \subset \mathbb{R}^2$

• Bild E

6.

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

• Bild F

7.

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Tipp: Achten Sie auf die Skalierung der Achsen. Mehrfachnennungen sind möglich.

Bild A:

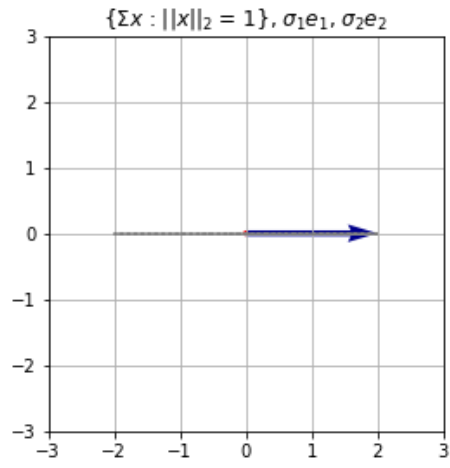
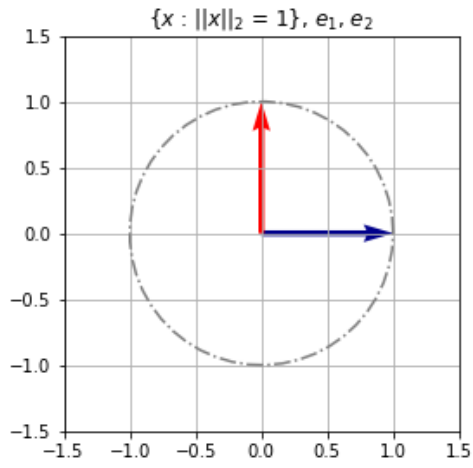


Bild B:

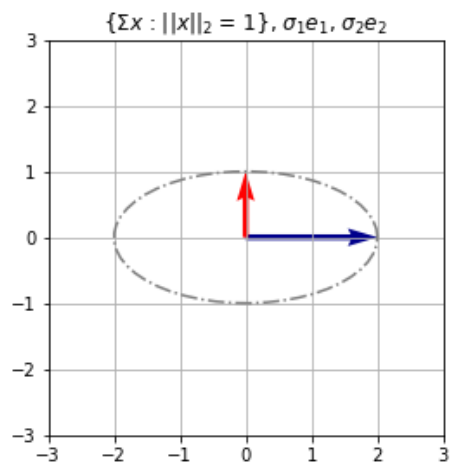
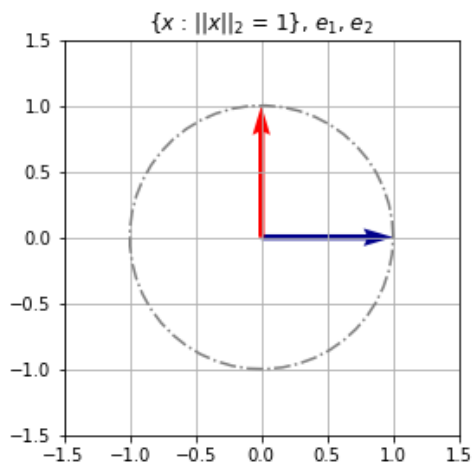


Bild C:

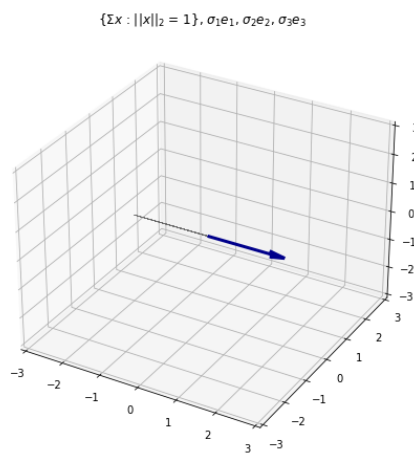
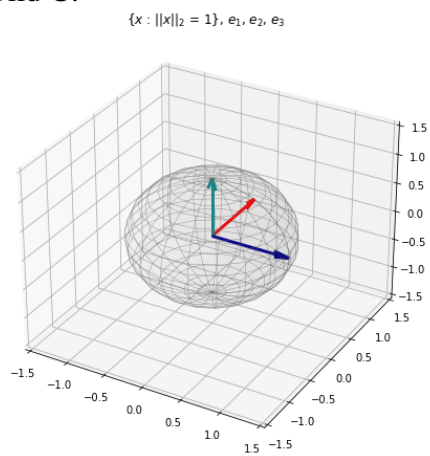


Abbildung 2: Bilder A, B und C zu Aufgabe 1.

Bild D:

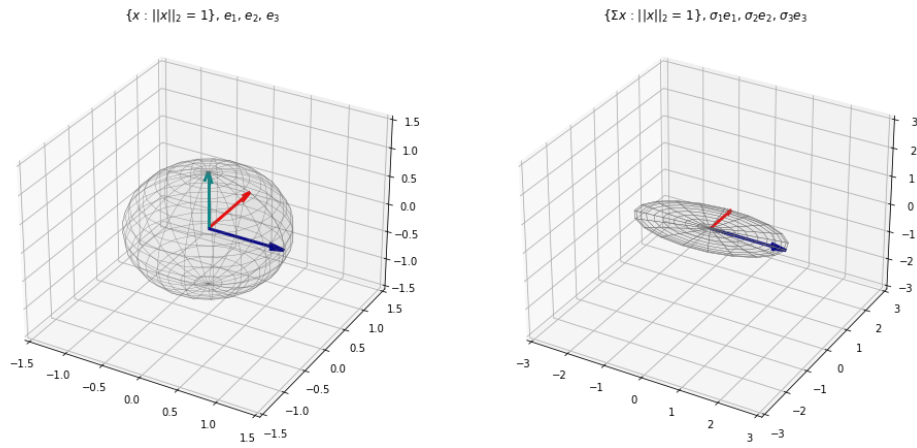


Bild E:

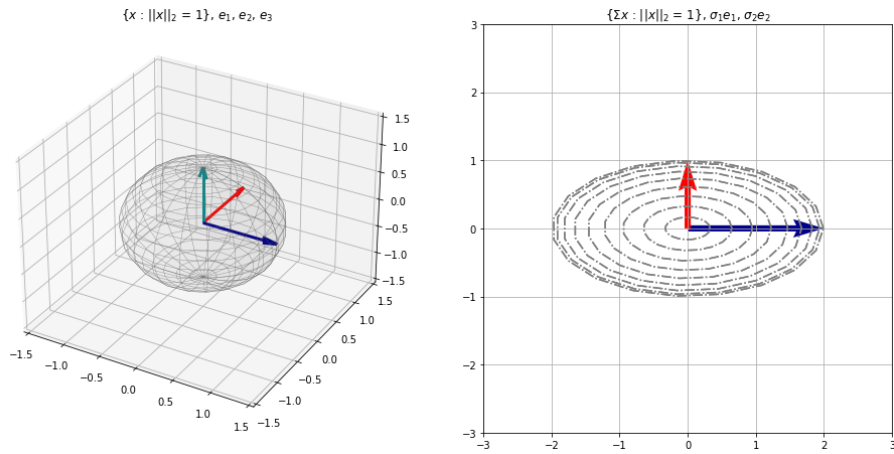


Bild F:

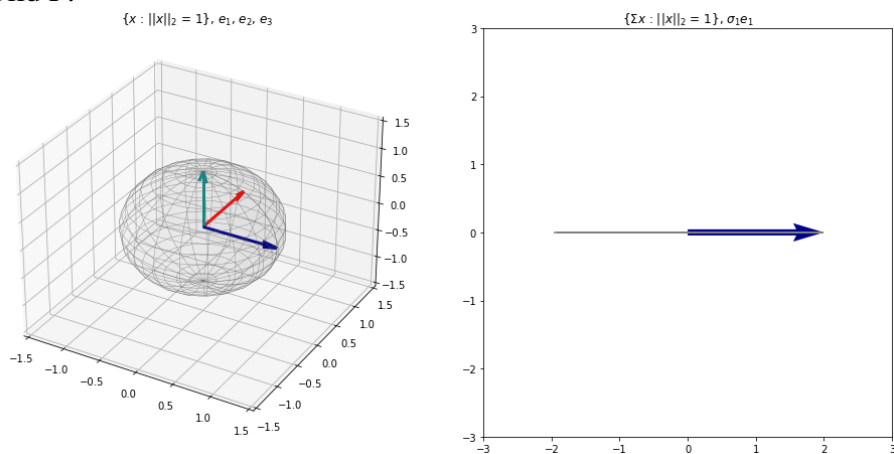


Abbildung 3: Bilder D, E und F zu Aufgabe 1.

2 Orthogonale Matrizen

2.1 Definition und Eigenschaften

Definition 3. Eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist orthogonal genau dann wenn $QQ^T = I$.

Die Definition bedeutet, dass die Spaltenvektoren $q_i \in \mathbb{R}^n$ einer orthogonalen Matrix

$$Q = (q_1 \quad q_2 \quad \dots \quad q_n)$$

eine Orthonormalbasis sind und dies auch für die Zeilenvektoren gilt.

Lemma 1. Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine orthogonale Matrix. Dann gilt:

1. Q^T ist orthogonal,
2. $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$,
3. $\|Q\|_2 = 1$,
4. $\|QA\|_2 = \|A\|_2$ für alle $A \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $\|BQ\|_2 = \|B\|_2$ für alle $B \in \mathbb{R}^{p \times m}$,
5. Das Produkt von orthogonalen Matrizen ist orthogonal.

Beweis:

1. Da $QQ^T = I$, folgt $Q^T = Q^{-1}$, womit $Q^T Q = Q^{-1} Q = I$.
2. Aus der Definition der Spektralnorm folgt:

$$\|Qx\|_2^2 = x^T Q^T Q x = x^T x = \|x\|_2^2 \quad \forall x \in \mathbb{R}^m.$$

3. Aus der letzten Eigenschaft erhalten wir:

$$\|Q\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Qx\|_2 = 1.$$

4. Analog ergibt sich

$$\|QA\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|QAx\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \|A\|_2$$

und für $y = Qx$

$$\|BQ\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|BQx\|_2 = \max_{\|Q^T y\|_2=1} \|BQ Q^T y\|_2 = \max_{\|y\|_2=1} \|By\|_2 = \|B\|_2.$$

5. Seien Q_1, Q_2 orthogonale Matrizen. Dann gilt

$$Q_1 Q_2 (Q_1 Q_2)^T = Q_1 Q_2 Q_2^T Q_1^T = I.$$

q.e.d.

2.2 Beispiele in \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3

Die Identitätsmatrix ist die einfachste orthogonale Matrix. Wir betrachten weitere wohlbekanntere orthogonale Matrizen in \mathbb{R}^2 und \mathbb{R}^3 .

2.2.1 Permutationen

- In \mathbb{R}^2 :

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

- In \mathbb{R}^3 :

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

2.2.2 Einfache Spiegelungen

- In \mathbb{R}^2 :

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- In \mathbb{R}^3 :

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

2.2.3 Drehungen

- Drehungen bzw. Rotationen in \mathbb{R}^2 um einen Winkel α :

$$R_\alpha = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}.$$

- Drehungen bzw. Rotationen in \mathbb{R}^3 um einen Winkel α :

– Um die x-Achse

$$R_\alpha^x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}.$$

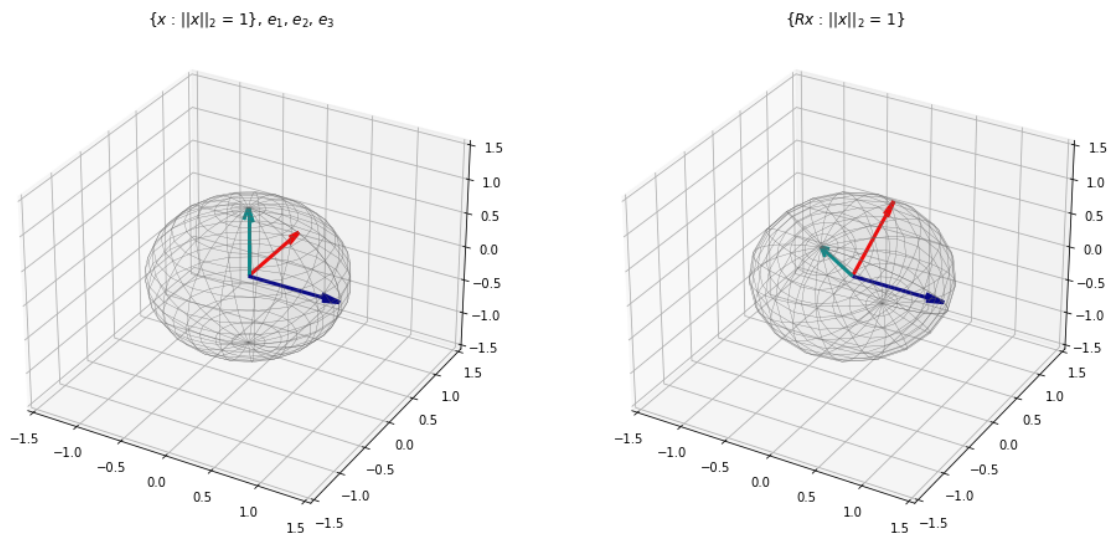


Abbildung 4: Rotation der Einheitskugel um die x-Achse, d.h. für $R = R_{\frac{\pi}{4}}^x$.

– Um die y-Achse

$$R_{\alpha}^y = \begin{pmatrix} \cos \alpha & 0 & \sin \alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha & 0 & \cos \alpha \end{pmatrix}.$$

– Um die z-Achse

$$R_{\alpha}^z = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

2.2.4 Kombinationen

Alle Kombinationen von Permutationen, Spiegelungen und Drehungen können durch entsprechende orthogonale Matrizen beschrieben werden, so ist z.B. für beliebige Winkel α_1, α_2 die Matrix

$$Q := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha_1 & -\sin \alpha_1 & 0 \\ \sin \alpha_1 & \cos \alpha_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha_2 & 0 & \sin \alpha_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \alpha_2 & 0 & \cos \alpha_2 \end{pmatrix}$$

auch orthogonal.

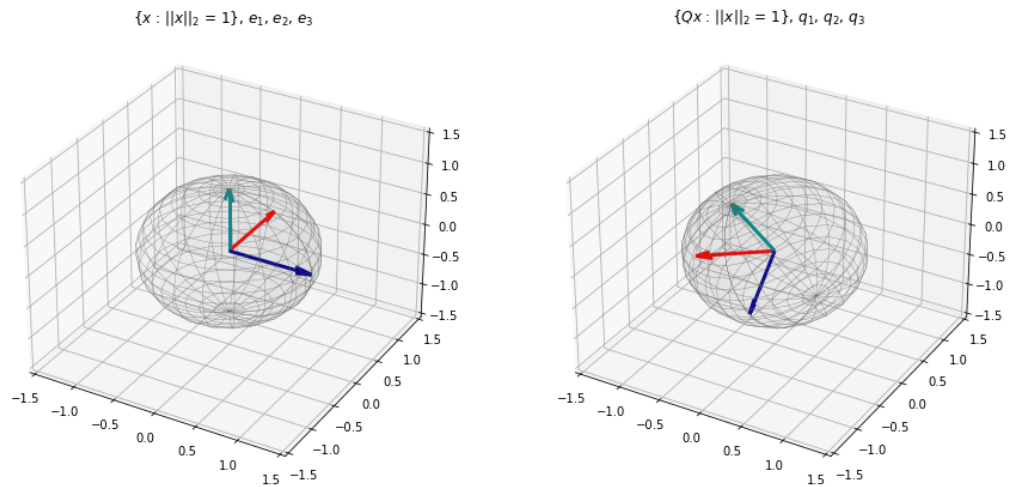


Abbildung 5: Einheitskugel (links) mit Standardbasis und Bild für eine orthogonale Matrix Q (rechts) mit $q_1 = Qe_1$, $q_2 = Qe_2$, $q_3 = Qe_3$. Die orthogonale Matrix $Q^T = Q^{-1}$ bildet wiederum das rechte Bild auf das linke ab, d.h. insbesondere $Q^T q_1 = e_1$, $Q^T q_2 = e_2$, $Q^T q_3 = e_3$.

3 Die Singulärwertzerlegung

3.1 Definition und Eigenschaften

Definition 4. Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Bezeichnen wir die ersten μ übereinstimmenden Eigenwerte von $A^T A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $AA^T \in \mathbb{R}^{m \times m}$ mit

$$\sigma_1^2 \geq \sigma_2^2 \geq \dots \geq \sigma_\mu^2 \geq 0$$

und die letzten mit

$$\sigma_{\mu+1} = \dots = \sigma_\nu = 0,$$

$\mu := \min\{m, n\}$, $\nu = \max\{m, n\}$, so heißen die σ_j mit $1 \leq j \leq \mu$ Singulärwerte von A .

Für symmetrische Matrizen sind die Singulärwerte die Beträge der Eigenwerte. Sind alle Eigenwerte einer symmetrischen Matrix nichtnegativ, so stimmen die Eigenwerte und Singulärwerte überein.

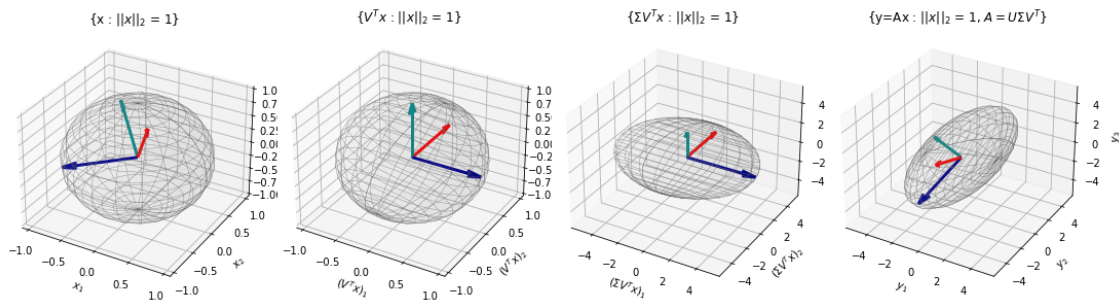


Abbildung 6: Einheitskugel (ganz links) mit Orthogonalbasis v_1, v_2, v_3 , die von V^T auf die Standardbasis abgebildet wird, $V^T v_1 = e_1, V^T v_2 = e_2, V^T v_3 = e_3$. In der Mitte wird die Kugel auf ein Ellipsoid abgebildet, vgl. Abbildung 1. Ganz rechts sehen wird das Bild des Ellipsoids mit den Vektoren $Av_1 = \sigma_1 u_1, Av_2 = \sigma_2 u_2, Av_3 = \sigma_3 u_3$.

Satz 1. (Existenzsatz der SVD [1])

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $\mu := \min\{m, n\}$. Dann existieren orthogonale Matrizen

$$U \in \mathbb{R}^{m \times m}, \quad U^T U = I \in \mathbb{R}^{m \times m}, \quad V \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad V^T V = I \in \mathbb{R}^{n \times n},$$

mit

$$U^T A V = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_\mu) =: \Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}.$$

Für die Singulärwertzerlegung

$$A = U \Sigma V^T$$

mit den Singulärwerten

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

mit $\mu := \min\{m, n\}$, $U = (u_1, \dots, u_m), V = (v_1, \dots, v_n)$ heißen

- σ_i Singulärwerte,
- u_i linke Singulärvektoren,
- v_i rechte Singulärvektoren,

und es folgt aus dem Spaltenvergleich von $AV = U\Sigma$ bzw. $A^T U = V\Sigma$:

$$Av_i = \sigma_i u_i, \quad A^T u_i = \sigma_i v_i, \quad i = 1, \dots, \mu.$$

Zudem sind folgende Eigenschaften leicht nachweisbar:

- $\text{Rang}(A) = r$,
- $\text{Kern}(A) = \text{Spann}(v_{r+1}, v_{r+2}, \dots, v_n)$,
- $\text{Bild}(A) = \text{Spann}(u_1, u_2, \dots, u_r)$,
- die Spektralnorm erfüllt $\|A\|_2 = \sigma_1$,
- $\text{cond}_2(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_\mu}$.

3.2 Überlegungen zur Eindeutigkeit

Die Singulärwerte einer Matrix sind eindeutig bestimmt, die orthogonalen Matrizen U und V müssen immer zueinander passen, sind aber nicht eindeutig.

- Für eine „Matrix“ $A = (a) \in \mathbb{R}^{1 \times 1}$ mit $a \geq 0$ existieren zwei Singulärwertzerlegungen

$$(a) = (1)(a)(1) \quad (a) = (-1)(a)(-1).$$

- Selbst für eine Diagonalmatrix $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit nichtnegativen Einträgen ist die SVD nicht eindeutig. De facto gilt für jede Matrix der Form

$$I_s^m = \text{diag}(\text{sgn}_1, \dots, \text{sgn}_m) \in \mathbb{R}^{m \times m}, \quad \text{sgn}_i \in \{-1, 1\}$$

auch $\Sigma = I_s^m \Sigma I_s^n$. Somit gibt es auch für jede Matrix $A = U \Sigma V^T$ weitere Singulärwertzerlegungen $A = (U I_s^m) \Sigma (I_s^n V^T)$.

- Für eine Diagonalmatrix mit identischen Diagonalelementen $d > 0$, d.h. $D = d \cdot I$ für die Identitätsmatrix I , existieren unendlich viele Singulärwertzerlegungen, da für alle orthogonalen Matrizen Q gilt

$$D = d \cdot I = (Q Q^T)(d \cdot I) = (Q)(d \cdot I)(Q^T) = (Q)(D)(Q^T).$$

- Matrizen mit zwei identischen Singulärwerten haben unendlich viele Singulärwertzerlegungen. So sind z.B. für eine Singulärwertzerlegung mit Matrizen $U, V \in \mathbb{R}^3$ und jedes beliebige $\alpha \in \mathbb{R}$

$$A = U \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 \\ 0 & 0 & d \end{pmatrix} V^T = (U R_\alpha^x) \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & d & 0 \\ 0 & 0 & d \end{pmatrix} (R_{-\alpha}^x V^T).$$

auch die rechten Ausdrücke Singulärwertzerlegungen.

Numerische Verfahren liefern lediglich eine Singulärwertzerlegung.

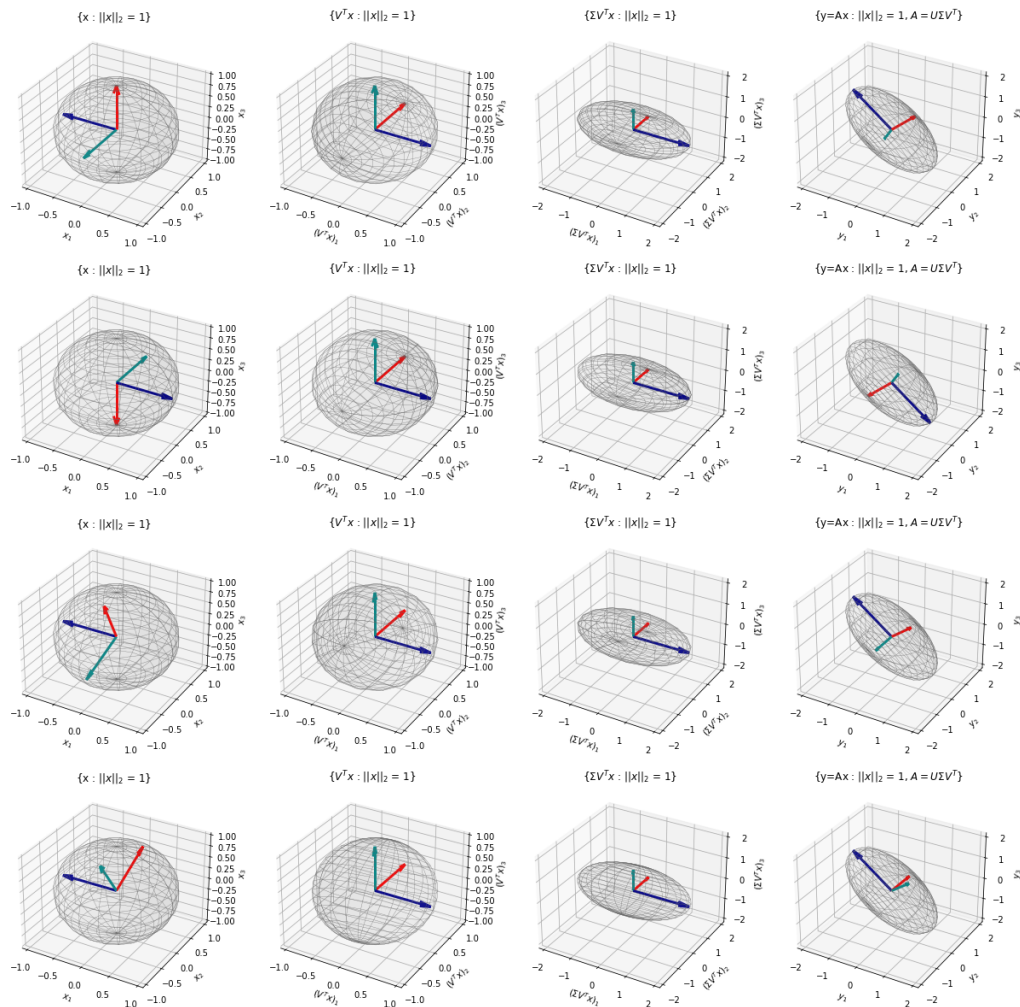


Abbildung 7: Bilder zu vier unterschiedlichen Singulärwertzerlegungen für eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ mit Singulärwerten $\sigma_1 = 2, \sigma_2 = \sigma_3 = 1$.

3.3 Singuläre und Rechteckige Matrizen

Aufgabe 2. Ordnen Sie die folgenden Aussagen den Bildern von Abbildungen 8 zu:

1.

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

• Bild A

2.

$$A = \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

• Bild B

3.

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 3 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

• Bild C

4.

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ -3 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

• Bild D

Tipp: Achten Sie auf die Dimensionen der Räume.

Bild A:

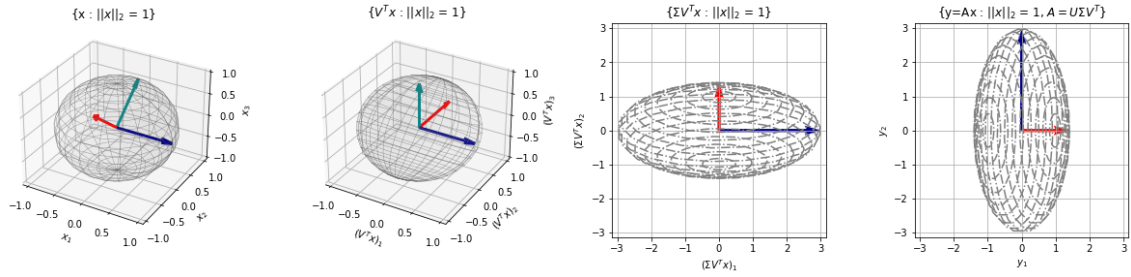


Bild B:

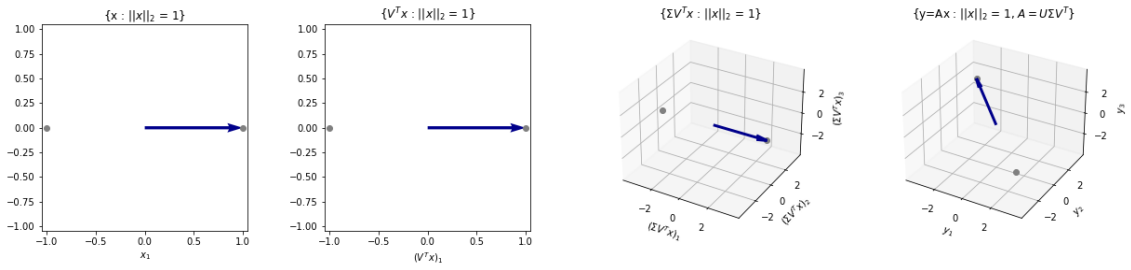


Bild C:

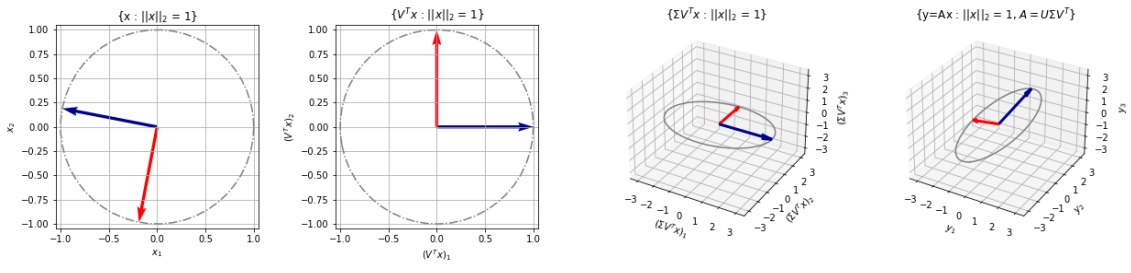


Bild D:

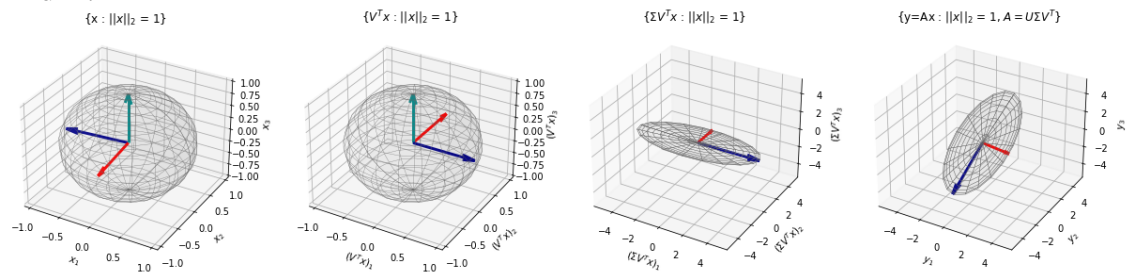


Abbildung 8: Bilder A, B, C, D zu Aufgabe 2.

3.4 Aufteilung und Approximation

Aus $A = U\Sigma V^T$ folgt $A = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T$, d.h., A ist darstellbar als gewichtete Summe der Matrizen $u_i v_i^T \in \mathbb{R}^{m \times n}$, wobei die Singulärwerte die entsprechenden Gewichte sind:

$$\begin{aligned} A &= U\Sigma V^T = (u_1, \dots, u_m) \Sigma (v_1, \dots, v_n)^T \\ &= (u_1, \dots, u_m) \Sigma \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_n^T \end{pmatrix} = \underbrace{\sum_{i=1}^m (0, \dots, u_i, 0, \dots, 0)}_{=(u_1, \dots, u_m)} \Sigma \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_n^T \end{pmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^r (0, \dots, u_i \sigma_i, 0, \dots, 0) \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_n^T \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^r u_i \sigma_i v_i^T = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T. \end{aligned}$$

Satz 2. (Approximationssatz [1])

Sei $A = U\Sigma V^T$ die Singulärwertzerlegung von $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Sei

$$k < r = \text{Rang}(A)$$

und

$$A_k := \sum_{i=1}^k \sigma_i u_i v_i^T.$$

Dann gilt

$$\min_{\text{Rang}(B)=k} \|A - B\|_2 = \|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}.$$

Beweis Aus $U^T A_k V = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_k, 0, \dots, 0)$ folgt $\text{Rang}(A_k) = k$,

$$U^T (A - A_k) V = \text{diag}(0, \dots, 0, \sigma_{k+1}, \dots, \sigma_\mu),$$

und somit $\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$. Offensichtlich gilt $\text{Rang}(A_k) = k$ und $\ker(A_k) = \text{Spann}(v_{k+1}, \dots, v_n)$.

Sei nun $\text{Rang}(B) = k$ für eine Matrix $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Dann gibt es $n - k$ orthonormale Vektoren x_1, \dots, x_{n-k} , mit $\text{Kern}(B) = \text{Spann}(x_1, \dots, x_{n-k})$.

Da $(n - k) + (k + 1) = n + 1$, folgt aus Dimensionsgründen zudem

$$\text{Spann}(x_1, \dots, x_{n-k}) \cap \text{Spann}(v_1, \dots, v_{k+1}) \neq \{0\}.$$

Sei nun $z \in \text{Spann}(x_1, \dots, x_{n-k}) \cap \text{Spann}(v_1, \dots, v_{k+1}) \neq \{0\}$, $z \neq 0$ und $\|z\|_2 = 1$. Da $Bz = 0$,

$$1 = \|z\|_2^2 = \|V^T z\|_2^2 = \sum_{i=1}^n (v_i^T z)^2 = \sum_{i=1}^{k+1} (v_i^T z)^2 \quad \text{und} \quad \|\Sigma V^T z\|_2^2 = \sum_{i=1}^{k+1} \sigma_i (v_i^T z)^2,$$

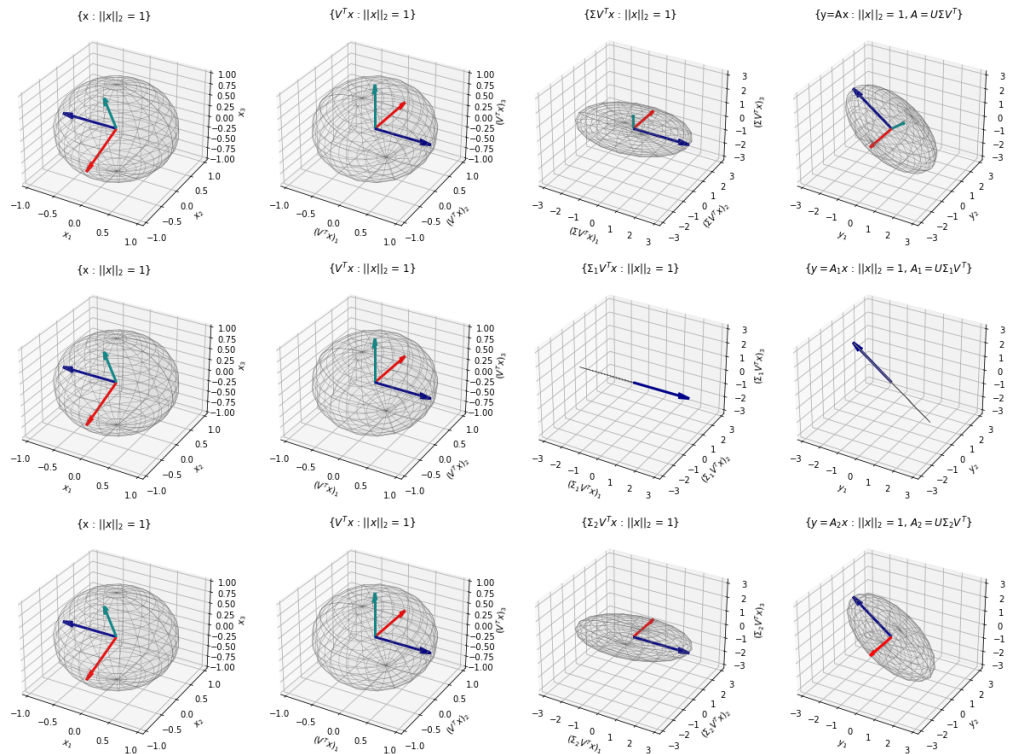


Abbildung 9: Bilder zu A und den Approximationen A_1 und A_2 für eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ mit Singulärwerten $\sigma_1 = 3, \sigma_2 = 2, \sigma_3 = 1$.

ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \|A - B\|_2^2 &\underset{\|z\|_2=1}{\geq} \|(A - B)z\|_2^2 \underset{Bz=0}{=} \|Az\|_2^2 \\
 &= \|U\Sigma V^T z\|_2^2 = \|\Sigma V^T z\|_2^2 = \sum_{i=1}^{k+1} \sigma_i^2 (v_i^T z)^2 \\
 &\geq \sigma_{k+1}^2 \sum_{i=1}^{k+1} (v_i^T z)^2 = \sigma_{k+1}^2 = \|A - A_k\|_2^2.
 \end{aligned}$$

q.e.d.

Dieser Approximationssatz wird für Modellreduktionen und Datenkompression eingesetzt. Eine schöne Visualisierung für $m, n \gg 3$ ist z.B. in [3], [4] zu finden.

Literatur

- [1] Gene H. Golub and Charles F. van Loan: Matrix Computations, The Johns Hopkins University Press, 1983.
- [2] <http://www.ams.org/samplings/feature-column/fcarc-svd>
- [3] <https://de.mathworks.com/company/newsletters/articles/professor-svd.html>
- [4] Gilbert Strang, Linear Algebra for Everyone, Wellesley-Cambridge Press, 2020.

Anhang

Einige Grundlagen

Eigenvektoren und Eigenwerte von Matrizen

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine beliebige, quadratische Matrix. Die Menge

$$\sigma(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} : Ax = \lambda x, x \neq 0\}$$

ist das Spektrum von A . Jedes Element aus $\sigma(A)$ heißt Eigenwert von A . Ist $\lambda \in \sigma(A)$, so heißt jeder Vektor $x \neq 0$ mit $Ax = \lambda x$ Eigenvektor zum Eigenwert λ .

Eine symmetrische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ hat nur reelle Eigenwerte und die Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.

Norm und Kondition von Matrizen

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^m}$ bzw. $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^n}$ Normen in \mathbb{R}^m bzw. \mathbb{R}^n . Dann heißt

$$\|A\| := \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_{\mathbb{R}^m}}{\|x\|_{\mathbb{R}^n}} = \max_{\|x\|_{\mathbb{R}^n}=1} \|Ax\|_{\mathbb{R}^m}$$

die durch $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^n}$ und $\|\cdot\|_{\mathbb{R}^m}$ induzierte Matrixnorm. Wegen der Kompaktheit der Sphäre $\{x \in \mathbb{R}^n : \|x\|_{\mathbb{R}^n} = 1\}$ und der Stetigkeit der Norm wird das Maximum tatsächlich angenommen.

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $\|\cdot\|$ Norm in \mathbb{R}^m . Dann ist die Kondition von A

$$\text{cond}(A) = \frac{\max_{\|x\|=1} \|Ax\|}{\min_{\|x\|=1} \|Ax\|}.$$