DESCOMPUNEREA VALORILOR SINGULARE

Valorile singulare ale unei matrice reale sau complexe dau informaţii preţioase despre caracteristicile matricei (rang, norme etc.), iar pe de altă parte (spre deosebire de valorile proprii în cazul matricelor pătrate) sunt perfect condiţionate numeric şi, în consecinţă, pot fi calculate cu o înaltă acurateţe.

Descompunerea valorilor singulare (**DVS**) ale unei matrice reprezintă o transformare extrem de utilă în evidenţierea multor proprietăţi structurale ale matricei respective, cerute în numeroase aplicaţii dintre care amintim rezolvarea cazului general al problemei celor mai mici pătrate fără sau cu restricţii liniare sau pătratice. De asemenea, algoritmul de calcul **DVS** reprezintă unica modalitate, numeric fiabilă, de determinare a rangului unei matrice. Dacă, într-o aritmetică exactă, conceptul matematic de rang al unei matrice este foarte bine definit, în prezenţa erorilor de rotunjire, generic, toate matricele sunt de rang matematic maximal. De aceea, într-o aritmetică aproximativă, se utilizează mai curând noţiunea de "rang numeric" care adaptează conceptul de rang matematic la un mediu computaţional real dat de tehnica de calcul actuală.

În prima parte a capitolului sunt prezentate unele noţiuni teoretice relative la conceptul de valori singulare şi principalele lor proprietăţi precum şi unele descompuneri derivate. Partea de conţinut prezintă algoritmul de calcul al descompunerii valorilor singulare pentru matricelor reale, mai des întâlnite în aplicaţii. În esenţă algoritmul **DVS** reprezintă o adaptare a algoritmului **QR** simetric, care evită calculul efectiv al valorilor proprii ale unei matrice produs de tipul A^TA sau AA^T acţionând exclusiv asupra matricei factor A. Cazul complex se poate reduce la cel real de dimensiune dublă sau se tratează absolut similar utilizându-se transformări unitare (complexe).

Descompunerea valorilor singulare

Fie o matrice $A \in R^{m\times n}$. Descompunerea valorilor singulare ale matricei A se poate introduce prin următoarea teoremă.

Teorema 1: Descompunerea valorilor singulare.
Oricare ar fi matricea $A \in R^{m\times n}$ există matricele ortogonale $U \in R^{m\times m}$, $V \in R^{n\times n}$ şi întregul $r \geq 0$ astfel încât

$$U^TAV = \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

unde

$$\Sigma_1 = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r) \in R^{r\times r}$$

cu

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0 .$$

În cazul complex sunt adevărate aceleaşi afirmaţii cu precizarea că matricele $U \in C^{m\times m}$, $V \in C^{n\times n}$ sunt unitare şi $U^HAV = \Sigma$.

Demonstraţie. Fie, pentru precizare, $m \geq n$. Considerăm numai cazul real.
Dacă $A = 0$, atunci teorema este adevărată cu $U = I_m$, $V = I_n$ şi $r = 0$.

Dacă $A \neq 0$, fie matricea simetrică, pozitiv semidefinită $C = A^TA \in R^{n\times n}$. Există o transformare ortogonală de asemănare, definită de matricea ortogonală $V \in R^{n\times n}$, care reduce matricea C la forma Schur , i.e.

$$V^T C V = \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_r, 0, \ldots, 0).$$

Valorile proprii nenule ale matricei C sunt pozitive întrucât $\lambda_i = e_i^T \Lambda e_i = e_i^T V A^T A V e_i = \|A V e_i\|^2 > 0$ şi, prin urmare, fără a reduce generalitatea, putem considera că acestea au fost ordonate descrescător, i.e

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \ldots \geq \lambda_r > 0, \quad \lambda_j = 0, \; j = r+1 : n .$$

şi defini numerele pozitive

$$\sigma_j = +\sqrt{\lambda_j}, \quad j = 1 : n.$$

$$V^T C V = \Lambda = \begin{bmatrix} \Sigma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Considerăm următoarea partiţie a matricei V

$$V = \lfloor V_1 \quad V_2 \rfloor,$$

unde $V_1 = V(:, 1 : r)$, $V_2 = V(:, r+1 : n)$

$$\begin{bmatrix} V_1^T C V_1 & V_1^T C V_2 \\ V_2^T C V_1 & V_2^T C V_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_1^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

şi de unde rezultă, printre altele, egalitatea blocurilor diagonale

$$V_1^T A^T A V_1 = \Sigma_1^2, \quad V_2^T A^T A V_2 = 0 .$$

Cum blocul $\Sigma_1 \in R^{r \times r}$ este o matrice nesingulară, rezultă $\Sigma_1^{-1} V_1^T A^T A V_1 \Sigma_1^{-1} = \left(A V_1 \Sigma_1^{-1}\right)^T A V_1 \Sigma_1^{-1} = I_r$, i.e. matricea

$$U_1 = A V_1 \Sigma_1^{-1} \in R^{m \times r}$$

are coloanele ortogonale şi, prin urmare, poate fi completată cu o matrice $U_2 \in R^{m \times (m-r)}$ până la o matrice

$$U = \lfloor U_1 \quad U_2 \rfloor$$

ortogonală. De asemenea, rezultă $U_1^T A V_1 = \Sigma_1$ şi $U_2^T A V_1 = U_2^T U_1 \Sigma_1 = 0$. Pe de altă parte, rezultă, evident, $A V_2 = 0$.

$$U^T A V = \begin{bmatrix} U_1^T A V_1 & U_1^T A V_2 \\ U_2^T A V_1 & U_2^T A V_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

În virtutea teoremei de mai sus observăm că

$$A = U \Sigma V^T = U_1 \Sigma_1 V_1^T,$$

relaţie care defineşte *descompunerea (*sau *factorizarea) valorilor singulare* ale matricei A. Numerele $\sigma_j > 0, \; j = 1 : r$ împreună cu numerele $\sigma_j = 0, \; j = r+1 : n$ se numesc *valori singulare* ale matricei A. Coloanele $v_j = V e_j \in R^n, \; j = 1 : n$, ale matricei V se numesc *vectori singulari* (la dreapta) ai lui A asociaţi valorilor singulare

$\sigma_j,\ j = 1 : n$, iar coloanele $u_j = Ue_j \in R^m,\ j = 1 : n$ ale matricei U se numesc *vectori singulari la stânga* ai lui A asociaţi aceloraşi valori singulare. Rezultă că orice matrice $A \in R^{m\times n}$ se poate scrie ca sumă de produse externe de vectori singulari ponderaţi cu valorile singulare nenule

$$A = U_1\Sigma_1 V_1^T = \sum_{j=1}^{r} \sigma_j u_j v_j^T ,$$

relaţie numită şi descompunerea *redusă* a valorilor singulare, unde matricele $W_j = u_j v_j^T,\ j = 1 : r$ se numesc *componentele principale* ale matricei A. Matricea Σ se numeşte *forma canonică pseudodiagonală* a matricei A.

În legătură cu unicitatea DVS a unei matrice A, din demonstraţia teoremei rezultă că valorile singulare sunt rădăcinile pătrate pozitive ale valorilor proprii ale matricei A^TA şi, în consecinţă, sunt unic determinate. În ceea ce priveşte matricele de transformare, vectorii singulari asociaţi valorilor singulare nenule, i.e. submatricele U_1 şi V_1 sunt, în esenţă (în sensul că putem multiplica simultan coloane individuale ale acestor matrice cu ± 1, iar în cazul complex cu orice număr de modul unitar), unice în timp ce submatricele U_2 şi V_2 pot fi orice completări ortogonale ale submatricelor U_1 şi V_1.
Cadrul definitoriu de mai sus al valorilor singulare sugerează următoarea procedură de calcul

1. Se calculează $C \leftarrow A^TA$
2. Folosind, de exemplu, algoritmul **QR** simetric se calculează
   $\lambda(C) = \Lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}$ cu $\lambda_i \le \lambda_{i-1},\quad i = 2 : n$
3. $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i},\quad i = 1 : n$,

care, din păcate, nu este recomandată în aplicaţii practice din cauza erorilor introduse în formarea produsului A^TA, erori ce pot fi amplificate ulterior pe parcursul calculelelor. Algoritmul de calcul al valorilor singulare care s-a impus în practică, numit algoritmul **DVS** este un algoritm **QR** "mascat" în sensul că acţionează exclusiv asupra matricei A într-un mod echivalent cu acţiunea algoritmului **QR** simetric cu deplasare implicită asupra matricei C.

Aplicaţii ale DVS

Descompunerea valorilor singulare reprezintă un instrument deosebit de util şi de sigur în rezolvarea a numeroase probleme cu caracter aplicativ din diverse domenii ştiinţifice şi tehnice, cum sunt teoria sistemelor, prelucrarea semnalelor, statistică etc.

1. Calculul normelor matriceale ortogonal invariante

Fie matricea $A \in R^{m\times n}$ $(A \in C^{m\times n})$. Vom spune că o normă matriceală $\|\cdot\| : R^{m\times n} \to R_+$ $(\|\cdot\| : C^{m\times n} \to R_+)$ este ortogonal (unitar) invariantă dacă $\|UAV\| = \|A\|$ pentru toate matricele U, V ortogonale (unitare).

Norma matriceală $\|\cdot\|_2$ indusă de norma euclidiană, i.e. definită de

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

numită *norma spectrală,* precum şi *norma Frobenius* $\|\cdot\|_F$ definită de

$$\| A \|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2} = \sqrt{tr(A^T A)}$$

sunt ortogonal invariante şi, în consecinţă, se exprimă foarte simplu în termenii valorilor singulare $\sigma_i \in \sigma(A)$. Concret, avem

$$\|A\|_2 = \sigma_1,$$

$$\|A\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \ldots + \sigma_r^2}.$$

Într-adevăr

$$\|A\|_2 = \|\Sigma\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|\Sigma x\|_2 = \max_{\|y\|_2=1} \|\Sigma y\|_2 = \max_{\|y\|_2=1} \sqrt{\sum_{i=1}^{r} \sigma_i^2 y_i^2} = \sigma_1,$$

se obţine imediat din $\|A\|_F = \|\Sigma\|_F$.

Desigur, pentru a calcula norma Frobenius a unei matrice determinarea prealabilă a valorilor singulare este o cale total neeficientă. În schimb, dacă se dispune de valorile singulare, calculul acestei norme pe baza relaţiei de definiţie devine ineficient. Calculul normei spectrale este echivalent cu evaluarea valorii singulare maxime, ceea ce presupune un efort de calcul important şi, de aceea, norma spectrală este utilizată destul de rar în aplicaţii dar joacă un rol important în dezvoltările teoretice.

Dacă matricea $A \in R^{n\times n}$ este pătrată şi nesingulară, având descompunerea valorilor singulare $A = U \Sigma V^T$, atunci matricea inversă A^{-1} are expresia

$$A^{-1} = V\Sigma^{-1}U^T = V \cdot \text{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1}, \frac{1}{\sigma_2}, \cdots, \frac{1}{\sigma_n}\right) \cdot U^T,$$

i.e.

$$\sigma(A^{-1}) = \left\{\frac{1}{\sigma_n}, \frac{1}{\sigma_{n-1}}, \cdots, \frac{1}{\sigma_1}\right\}$$

întrucât valorile singulare sunt ordonate întotdeauna descrescător. Rezultă că descompunerea valorilor singulare pentru matricea A^{-1} este $A^{-1} = \tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V}^T$, unde $\tilde{U} = V(:, n : -1 : 1)$, $\tilde{V} = U(:, n : -1 : 1)$, iar $\tilde{\Sigma} = \text{diag}\left(\frac{1}{\sigma_n}, \frac{1}{\sigma_{n-1}}, \cdots, \frac{1}{\sigma_1}\right)$. Aceste observaţii permit o exprimare interesantă a numerelor de condiţionare la inversare a matricei nesingulare **A**. Avem

$$\kappa_2(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}$$

şi

$$\kappa_F(A) = \|A\|_F \cdot \|A^{-1}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2 \cdot \sum_{i=1}^{n} \sigma_i^{-2}}.$$

Prin urmare, o matrice este cu atât mai bine condiţionată la inversare cu cât valorile sale singulare sunt mai grupate. În particular, matricele ortogonale (unitare) **Q**, având toate valorile singulare egale cu 1, au $\kappa_2(Q) = 1$ şi, prin urmare, sunt perfect condiţionate la inversare.

2. Calculul rangului

Două matrice $\mathbf{A}$ şi $\mathbf{B}$, de aceleaşi dimensiuni, se numesc *echivalente* dacă există matricele pătrate nesingulare $\mathbf{S}$ şi $\mathbf{T}$ astfel încât

$$\mathbf{B} = \mathbf{SAT}$$

şi *ortogonal (unitar) echivalente* dacă matricele $\mathbf{S}$ şi $\mathbf{T}$ sunt ortogonale (unitare).
Rangul unei matrice $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ este dat de numărul liniilor (sau coloanelor) sale liniar independente.
Considerăm cunoscut faptul că transformările de echivalenţă conservă rangul unei matrice. În consecinţă, din descompunerea valorilor singulare $\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V^T}$, rezultă că orice matrice este ortogonal (unitar) echivalentă cu forma sa canonică pseudodiagonală şi, prin urmare, obţinem imediat următorul rezultat.

Teorema 2. **Rangul unei matrice este egal cu numărul valorilor sale singulare nenule, i.e.**

$$\mathrm{rang}\,\mathbf{A} = \mathrm{rang}\,\Sigma = \mathbf{r}.$$

Din nefericire, aşa cum s-a mai menţionat, acest rezultat nu poate fi folosit ca atare în aprecierea numerică a rangului unei matrice date întrucât descompunerea valorilor singulare *calculată* într-un mediu de calcul aproximativ (cum este cel care foloseşte reprezentarea în format virgulă mobilă) este descompunerea valorilor singulare exactă a unei matrice uşor perturbate. Cum însă în vecinătatea oricărei matrice există o mulţime densă de matrice de rang maximal rezultă că există toate şansele ca forma canonică pseudodiagonală calculată, pe care o vom nota cu $\hat{\Sigma}$, să fie de rang maximal. De aceea, în practica numerică se utilizează conceptul de *rang numeric* care se defineşte în modul următor.

Definiţia 1. **Dată o toleranţă $\varepsilon > 0$, rangul numeric $\mathbf{r}$ al matricei $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ este definit de cel mai mic dintre rangurile matematice ale tuturor matricelor de aceleaşi dimensiuni aflate la o distanţă – definită corespunzător – de matricea A mai mică decât toleranţa, i.e.**

$$\mathbf{r}_\varepsilon = \min_{\substack{\mathrm{dist}(\mathbf{A},\mathbf{X})\le\varepsilon \\ \mathbf{X}\in\mathbf{R}^{m\times n}}} (\mathrm{rang}\,\mathbf{X}) .$$

Dacă se utilizează distanţa dintre două matrice definită cu ajutorul normei matriceale spectrale

$$\mathrm{dist}_2(\mathbf{A},\mathbf{X}) = \|\mathbf{A}-\mathbf{X}\|_2$$

sau, respectiv, cu ajutorul normei Frobenius

$$\mathrm{dist}_F(\mathbf{A},\mathbf{X}) = \|\mathbf{A}-\mathbf{X}\|_F ,$$

atunci descompunerea valorilor singulare oferă mijloace de exprimare comode a rangului numeric. Baza acestor rezultate rezidă în următoarea teoremă.

Teorema 3. **Fie $\mathbf{r} = \mathrm{rang}(\mathbf{A})$ şi $\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V^T} = \sum_{j=1}^{r} \sigma_j \mathbf{u}_j \mathbf{v}_j^T$ descompunerea valorilor singulare a matricei $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$, unde $\mathbf{u}_j = \mathbf{U}(:,j)$, $\mathbf{v}_j = \mathbf{V}(:,j)$ sunt coloanele matricelor ortogonale de transformare. Considerăm un întreg $\mathbf{k} < \mathbf{r}$ şi definim matricea**

$$A_k = \sum_{j=1}^{k} \sigma_j u_j v_j^T.$$

Atunci

$$\min_{\substack{\text{rang } X = k \\ X \in R^{m\times n}}} \|A - X\|_2 = \|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$$

şi

$$\min_{\substack{\text{rang } X = k \\ X \in R^{m\times n}}} \|A - X\|_F^2 = \|A - A_k\|_F^2 = \sum_{i=k+1}^{r} \sigma_i^2 .$$

Demonstraţie. Pentru precizare considerăm $m \geq n$ iar pentru simplificarea notaţiilor notăm norma vectorială euclidiană cu $\|\cdot\|$. Din datele teoremei, mai precis din expresia matricei A_k, avem în mod evident relaţia $U^T A_k V = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_k, 0, \cdots, 0)$ de unde rezultă egalitatea $U^T(A - A_k)V = \mathrm{diag}(0, \cdots, 0, \sigma_{k+1}, \cdots, \sigma_r, 0, \cdots, 0)$ şi, prin urmare, ţinând seama de conservarea normelor vizate la transformări ortogonale, obţinem $\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$ şi $\sigma(A) = \{\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n\}$ Fie acum o matrice $X \in R^{m\times n}$ de rang k dar altfel arbitrară. Pentru început, notând $V(:, 1 : k + 1) = V_{k+1}$, vom arăta că există un vector nenul $w \in R^n$ astfel încât $w \in \mathrm{Ker}X \cap \mathrm{Im}\, V_{k+1}$, i.e. $Xw = 0$ şi $w = V(:, 1 : k + 1)z$. Într-adevăr, considerând DVS $X = \tilde{U}_1 \tilde{\Sigma}_1 \tilde{V}_1^T$ a lui X, matricea $Y = \tilde{V}_1^T V_{k+1} \in R^{k\times(k+1)}$ având mai multe coloane decât linii are un subspaţiu nucleu $\mathrm{Ker}Y \neq \{0\}$, i.e. există un vector $z \in R^n \setminus \{0\}$ cu $\|z\| = 1$ astfel încât $Yz = 0$. Prin urmare, $w = V_{k+1}z$ este vectorul căutat. Pe această bază avem secvenţa de inegalităţi

$$\sigma_1^2(A - X) = \max_{\|y\|=1} \|(A - X)y\|^2 \geq \|(A - X)w\|^2 = \|Aw\|^2 = \|AV_{k+1}z\|^2 = \|U_{k+1}\Sigma_{k+1}z\| =$$

$$= \sum_{i=1}^{k+1} \sigma_i^2 z_i^2 = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i^2 z_i^2 + \sigma_{k+1}^2\Big(1 - \sum_{i=1}^{k} z_i^2\Big) = \sum_{i=1}^{k} (\sigma_i^2 - \sigma_{k+1}^2)z_i^2 + \sigma_{k+1}^2 \geq \sigma_{k+1}^2,$$

unde ultima inegalitate rezultă din ordonarea descrescătoare a valorilor singulare. Cum matricea X a fost o matrice arbitrară de rang k iar $\sigma_1^2(A - X) = \|A - X\|_2^2$ rezultă că prima egalitate a teoremei este demonstrată.

Pentru demonstrarea celei de a doua egalităţi a teoremei vom utiliza inegalitatea lui Weyl [28], conform căreia $\sigma_{i+j-1}(B + C) \leq \sigma_i(B) + \sigma_j(C)$. Luând matricea X o matrice arbitrară de rang k avem $\sigma_{k+1}(X) = 0$ şi, prin urmare, aplicând inegalitatea lui Weyl obţinem

$$\sigma_{k+i}(A) = \sigma_{k+i}(A - X + X) \leq \sigma_i(A - X) + \sigma_{k+1}(X) = \sigma_i(A - X) .$$

$$\|A - X\|_F^2 = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2(A - X) \geq \sum_{i=1}^{n-k} \sigma_i^2(A - X) \geq \sum_{i=k+1}^{n} \sigma_i^2(A)$$

ceea ce trebuia demonstrat.

Pe baza teoremei de mai sus se poate utiliza descompunerea valorilor singulare pentru exprimarea rangului numeric conform următorului rezultat.

Teorema 4. **Fie $\sigma(A) = \{\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n\}$ spectrul de valori singulare al matricei A.**

Dacă utilizăm funcţia distanţă atunci rangul numeric $\mathbf{r}$ al matricei $\mathbf{A}$ este egal cu numărul valorilor sale singulare superioare toleranţei ε, i.e. este întregul r_ε care satisface condiţia

$$\sigma_{r_\varepsilon} > \varepsilon \geq \sigma_{r_\varepsilon+1}.$$

Dacă utilizăm funcţia distanţă, atunci rangul numeric r_ε al matricei $\mathbf{A}$ rezultă din relaţia

$$\sum_{j>r_\varepsilon+1} \sigma_j^2 > \varepsilon^2 \geq \sum_{j>r_\varepsilon} \sigma_j^2 .$$

Demonstraţia acestor rezultate este imediată şi este lăsată în sarcina cititorului.
Important este faptul că expresiile de mai sus, pentru definirea rangului numeric, pot fi utilizate cu succes pentru calculul acestuia pe baza descompunerii valorilor singulare ale matricei date *calculate* cu algoritmul **DVS**. De exemplu, numărul $\hat{\mathbf{r}}_\varepsilon$ al valorilor singulare calculate $\hat{\sigma}_j$ superioare toleranţei date este o foarte bună estimare a numărului $\mathbf{r}_\varepsilon$ de valori singulare exacte σ_j superioare valorii toleranţei ε.
Încheiem acest paragraf cu sublinierea faptului că orice referire corectă, din punctul de vedere al calculului numeric, la rangul unei matrice trebuie să facă apel la valorile sale singulare şi la conceptul de rang numeric. De exemplu, cea mai bună măsură a apropierii unei matrice pătrate de o matrice singulară este dată de valoarea sa singulară minimă. Alte criterii cum ar fi valoarea determinantului sau cel mai mic dintre modulele valorilor proprii pot furniza în acest sens o apreciere cu totul eronată.

Rezolvarea problemei generale ale celor mai mici pătrate

Descompunerea valorilor singulare oferă o soluţie problemei generale a rezolvării, în sensul celor mai mici pătrate, a sistemelor liniare. Fie sistemul liniar cu m ecuaţii şi n necunoscute

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b},$$

respectiv cu $A \in R^{m\times n}$ şi $b \in R^m$. Cazurile în care matricea A este de rang maximal (monică şi/sau epică) au fost tratate în capitolele precedente ale lucrării. De aceea acum vom presupune situaţia generală în care

$$\mathrm{rang}(\mathbf{A}) \leq \min(m, n).$$

În cazul în care inegalitatea este satisfăcută strict, sistemul este, în general, incompatibil şi admite o infinitate de pseudosoluţii în sensul celor mai mici pătrate. Într-o astfel de situaţie se doreşte calculul pseudosoluţiei CMMP de normă euclidiană minimă numită *pseudosoluţia normală* a sistemului. Rezultatul fundamental care permite rezolvarea acestei probleme este dat de următoarea teoremă.

***Teorema 5. Soluţia problemei generale a celor mai mici pătrate*: Oricare ar fi matricea $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ şi vectorul $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^m$, sistemul $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ admite o pseudosoluţie normală unică $\mathbf{x}^* \in \mathbf{R}^n$. Dacă $\mathrm{rang}(\mathbf{A}) = \mathbf{r}$ şi $\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V}^T = \mathbf{U}_1\Sigma_1\mathbf{V}_1^T$ este decompunerea valorilor singulare a matricei A, atunci pseudosoluţia normală poate fi scrisă în forma**

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{A}^+\mathbf{b}$$

unde

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{V}_1\Sigma_1^{-1}\mathbf{U}_1^T \in \mathbf{R}^{n\times m}$$

este pseudoinversa (Moore-Penrose) a matricei A.

Demonstraţie: Considerăm reziduul de ecuaţie $r = b - Ax$ al sistemului (141) şi calculăm norma sa euclidiană ţinând seama de descompunerea valorilor singulare ale matricei A. Întrucât transformările ortogonale conservă norma euclidiană, avem

$$\|\mathbf{r}\| = \|\mathbf{b} - \mathbf{U}\,\Sigma\,\mathbf{V}^T\mathbf{x}\| = \|\mathbf{U}(\mathbf{U}^T\mathbf{b} - \Sigma\,\mathbf{V}^T\mathbf{x})\| = \|\mathbf{U}^T\mathbf{b} - \Sigma\,\mathbf{V}^T\mathbf{x}\|.$$

Introducem notaţiile şi partiţiile

$$\mathbf{d} = \mathbf{U}^T\mathbf{b} = \begin{bmatrix}\mathbf{d}'\\ \mathbf{d}''\end{bmatrix}\begin{matrix}\mathtt{r}\\ \mathtt{m-r}\end{matrix}, \qquad \mathbf{y} = \mathbf{V}^T\mathbf{x} = \begin{bmatrix}\mathbf{y}'\\ \mathbf{y}''\end{bmatrix}\begin{matrix}\mathtt{r}\\ \mathtt{n-r}\end{matrix},$$

cu care devine

$$\|\mathbf{r}\| = \|\mathbf{d} - \Sigma\,\mathbf{y}\| = \left\|\begin{bmatrix}\mathbf{d}' - \Sigma_1\mathbf{y}'\\ \mathbf{d}''\end{bmatrix}\right\| = \sqrt{\|\mathbf{d}' - \Sigma_1\mathbf{y}'\|^2 + \|\mathbf{d}''\|^2}.$$

Cum $\mathbf{d}''$ nu depinde de $\mathbf{x}$, minimul normei lui $\mathbf{r}$ corespunde minimului termenului $\|\mathbf{d}' - \Sigma_1\mathbf{y}'\| \geq 0$ care minim, datorită faptului că Σ_1 este nesingulară, este nul şi se obţine pentru

$$\mathbf{y}' = \Sigma_1^{-1}\mathbf{d}'.$$

toate pseudosoluţiile în sens CMMP ale sistemului se scriu sub forma

$$\mathbf{x} = \mathbf{V}\begin{bmatrix}\Sigma_1^{-1}\mathbf{d}'\\ \mathbf{y}''\end{bmatrix}$$

cu $\mathbf{y}'' \in \mathbf{R}^{n-r}$ arbitrar. Dintre acestea există una singură de normă euclidiană minimă, şi anume cea care corespunde lui $y'' = 0$, întrucât

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\|\Sigma_1^{-1}\mathbf{d}'\|^2 + \|\mathbf{y}''\|^2}.$$

În concluzie, unica pseudosoluţie normală este

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{V}\begin{bmatrix}\Sigma_1^{-1}(\mathbf{U}^T\mathbf{b})(1:r)\\ 0\end{bmatrix} = \mathbf{V}_1\Sigma_1^{-1}\mathbf{U}_1^T\mathbf{b}.$$

Teorema este demonstrată.
Rezultatele de mai sus pot fi extinse fără dificultăţi la cazul matricelor complexe $\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{m\times n}$.

Evident, calculul pseudosoluţiei normale se face fără a calcula explicit pseudoinversa matricei A ci utilizând în mod eficient ultima din relaţiile de mai sus, i.e.

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{V}_1\Sigma_1^{-1}\mathbf{U}_1^T\mathbf{b} = \sum_{j=1}^{r}\frac{\mathbf{V}(:,j)\cdot(\mathbf{U}(:,j))^T\mathbf{b}}{\sigma_j},$$

unde r este rangul matricei $\mathbf{A}$ iar $\sigma_j,\ j = 1 : r$ sunt valorile sale singulare nenule. Rezultă următoarea schemă de calcul.

1. Se calculează DVS $\mathbf{U}^T\mathbf{AV} = \Sigma$ cu acumularea transformărilor U şi V.
2. Se determină r - rangul (numeric al) matricei A.
3. $x = 0$

4. Pentru $j = 1 : r$

1. $\beta = (U(:, j))^T b$
2. $\beta = \dfrac{\beta}{\sigma_j}$
3. $x = x + V(:, j) \cdot \beta$

Problema CMMP poate fi extinsă impunând minimizarea normei euclidiene a reziduului de ecuaţie a unui sistem liniar supradeterminat în prezenţa diverselor tipuri de restricţii.

3. Calculul pseudoinversei

Pseudoinversa unei matrice generalizează conceptul de inversă, definit pentru matricele pătrate şi nesingulare, la cazul unei matrice $m \times n$ oarecare.

Definiţia 5. **Fie matricea $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m \times n}$. O matrice $\mathbf{X} \in \mathbf{R}^{n \times m}$ se numeşte pseudoinversa matricei $\mathbf{A}$ dacă satisface următoarele patru condiţii Moore-Penrose**

$$\begin{cases} \mathbf{AXA} = \mathbf{A} \\ \mathbf{XAX} = \mathbf{X} \\ (\mathbf{AX})^T = \mathbf{AX} \\ (\mathbf{XA})^T = \mathbf{XA} \end{cases}$$

În cazul complex pseudoinversa este o matrice complexă care satisface cele patru condiţii de mai sus în care transpunerea se înlocuieşte cu conjugarea hermitică.

Următorul rezultat afirmă existenţa şi unicitatea pseudoinversei şi sugerează o modalitate eficientă de calcul a acesteia.

Teorema 5. **Orice matrice $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m \times n}$ admite o pseudoinversă unică. Dacă $\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V}^T$ este descompunerea valorilor singulare a matricei $\mathbf{A}$, atunci pseudoinversa sa este**

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}^+ = \mathbf{V\Sigma}^+\mathbf{U}^T,$$

unde $\mathbf{\Sigma}^+$ este pseudoinversa matricei Σ şi are expresia

$$\mathbf{\Sigma}^+ = \begin{bmatrix} \mathbf{\Sigma}_1^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{n \times m}.$$

Demonstraţie. Pentru început observăm că $\mathbf{\Sigma\Sigma}^+ = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{m \times m}$ şi $\mathbf{\Sigma}^+\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbf{R}^{n \times n}$, de unde rezultă că Σ^+ satisface cele patru condiţii Moore-Penrose.

În continuare avem egalităţile

$$\mathbf{AA}^+\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V}^T\mathbf{V\Sigma}^+\mathbf{U}^T\mathbf{U\Sigma V}^T = \mathbf{U\Sigma\Sigma}^+\mathbf{\Sigma V}^T = \mathbf{U\Sigma V}^T = \mathbf{A},$$

Pentru demonstraţia unicităţii, presupunem existenţa a două pseudoinverse $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in \mathbf{R}^{n \times m}$ şi fie $\mathbf{D} = \mathbf{X} - \mathbf{Y}$. Din condiţiile Moore-Penrose rezultă

$$\begin{cases} \mathbf{ADA} = 0 \\ \mathbf{DAD} + \mathbf{DAY} + \mathbf{YAD} = \mathbf{D} \\ (\mathbf{AD})^T = \mathbf{AD} \\ (\mathbf{DA})^T = \mathbf{DA}. \end{cases}$$

De aici obţinem $(\mathbf{AD})^T\mathbf{AD} = \mathbf{ADAD} = \mathbf{0}$, de unde rezultă $AD = 0$. Similar $(\mathbf{DA})^T\mathbf{DA} = \mathbf{DADA} = \mathbf{0}$, deci $\mathbf{DA} = 0$. Din a doua din relaţiile de mai sus rezultă **D=0**, deci **X=Y**. Prin urmare pseudoinversa unei matrice este unică.

Pentru calculul pseudoinversei unei matrice se calculează DVS după care se utilizează expresia (154), conform căreia obţinem următoarea expresie de calcul

$$\mathbf{A}^+ = \sum_{k=1}^{r} \frac{\mathbf{v}_k \mathbf{u}_k^T}{\sigma_k}, \qquad \mathbf{r} = \mathbf{rang}(\mathbf{A}), \qquad \mathbf{u}_k = \mathbf{U}(:,k), \ \mathbf{v}_k = \mathbf{V}(:,k)$$

sau, pe componente,

$$\mathbf{A}^+(\mathbf{i},\mathbf{j}) = \sum_{k=1}^{r} \frac{\mathbf{v}_{ik}\mathbf{u}_{jk}}{\sigma_k}, \qquad \mathbf{i} = 1 : \mathbf{n}, \qquad \mathbf{j} = 1 : \mathbf{m}.$$

Observaţie. Menţionăm că pentru matricele $A \in R^{m\times n}$ *monice* pseudoinversa se identifică cu *pseodoinversa Moore-Penrose* $\mathbf{A}^+ = \left(\mathbf{A}^T\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{A}^T$, care este o inversă la stânga întrucât $\mathbf{A}^+\mathbf{A} = \mathbf{I}_n$, iar pentru matricele $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ *epice* pseudoinversa se identifică *pseudoinversa normală* $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^T\left(\mathbf{AA}^T\right)^{-1}$, care este o inversă la dreapta întrucât $\mathbf{AA}^+ = \mathbf{I}_m$.

Una dintre proprietăţile cele mai interesante ale pseudoinversei (care se demonstrează fără dificultate) este aceea că pseudoinversa unei matrice $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{m\times n}$ este unica soluţie de normă Frobenius minimă a problemei de minimizare

$$\min_{\mathbf{X}\in\mathbf{R}^{n\times m}} \left\| \mathbf{AX} - \mathbf{I}_m \right\|_F.$$