Конспект лекций по основам матричных вычислений
М.В. Рахуба

ПМИ ФКН ВШЭ, 2 курс, основной поток
2024-2025

Составители:

Маркотенко А.Е.

Исходный код

Содержание

Лекция 1. Основы матричного анализа

21 января 2025 г.

1.1 Векторные нормы

Определение:
Пусть V – линейное пространство над $\mathbb{F} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$.
Тогда $\|\cdot\| : V \to \mathbb{R}$ — *норма*, если:

1. $\|x\| \geq 0 \quad \forall x \in V$
2. $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
3. $\|\alpha x\| = |\alpha|\|x\| \quad \forall \alpha \in \mathbb{F}, \forall x \in V$
4. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \quad \forall x, y \in V$

Следствие (Обратное неравенство треугольника):

$$|\|z\| - \|x\|| \leq \|z - x\|$$

Доказательство:
Подставим в (4.) $y = z - x$:

$$\|x + z - x\| \leq \|x\| + \|z - x\| \Longleftrightarrow \|z\| - \|x\| \leq \|z - x\| \Longrightarrow |\|z\| - \|x\|| \leq \|z - x\|$$

■

Примеры:
Пусть $V = \mathbb{F}^n$ и $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$.

- $\|x\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2} = \sqrt{\underbrace{[\overline{x_1}, \ldots \overline{x_n}]}_{\substack{x^* \\ \text{(Эрмитово сопряжение)}}} * \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}} = \sqrt{x^* x}$
- $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$
- $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$
- $\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}, \quad p \geq 1$

Теорема:
$\|\cdot\| : \mathbb{C}^n \to \mathbb{R}$ — непрерывная функция относительно $\|\cdot\|_2$.

$$\forall x, \forall \varepsilon > 0 \ \exists \delta > 0 : \forall z : \|x - z\|_2 < \delta \hookrightarrow |\|x\| - \|z\|| < \varepsilon$$

Доказательство:

$$|\|x\| - \|z\|| \leq \|x - z\| = \left\| \sum_i (x_i - z_i) e_i \right\| \leq \sum_i |x_i - z_i| * \|e_i\|$$

По неравенству Коши-Буняковского:

$$\sum_i |x_i - z_i| * \|e_i\| \leq \sqrt{\sum_i |x_i - z_i|^2} \underbrace{\sqrt{\sum_i \|e_i\|}}_{C} = C * \|x - z\|_2$$

■

Теорема:
Любые две нормы $\|\cdot\|_a$ и $\|\cdot\|_b$ на конечномерном пространстве V эквивалентны,
то есть $\exists C_1, C_2 > 0$ и $\forall x \in V$:

$$C_1\|x\|_a \leq \|x\|_b \leq C_2\|x\|_a$$

Доказательство:
$\|\cdot\|_b$ — непрерывная на $S^{n-1} = \{y \in V : \|y\|_2 = 1\}$ функция, по теореме Вейерштрасса об ограничености непрерывной функции на компакте, получаем:

$$0 \underbrace{<}_{y\neq 0} \tilde{C}_1 \leq \|y\|_b \leq \tilde{C}_2, \quad y = \frac{x}{\|x\|_2}$$

$$\tilde{C}_1\|x\|_2 \leq \|x\|_b \leq \tilde{C}_2\|x\|_2$$

$$\tilde{\tilde{C}}_1\|x\|_2 \leq \|x\|_a \leq \tilde{\tilde{C}}_2\|x\|_2$$

Объединив получим:

$$\frac{\tilde{C}_1}{\tilde{\tilde{C}}_2}\|x\|_a \leq \tilde{C}_1\|x\|_2 \leq \|x\|_b \leq \tilde{C}_2\|x\|_2 \leq \frac{\tilde{C}_2}{\tilde{\tilde{C}}_1} * \|x\|_a$$

■

Следствие:
Можем говорить о сходимости $x_k \to x$ при $\|x_k - x\| \to 0, k \to \infty$ вне зависимости от $\|\cdot\|$.

1.2 Матричные нормы

Определение:
$\|\cdot\|$ — матричная норма, если:

1. Норма на $V = \mathbb{F}^{m\times n}, \quad \forall m, n \in \mathbb{N}$
2. Для любых A и B, допускающих умножение:

   $\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$ (субмультипликативность)

Примеры:

Vec — операция записи матрицы по столбцам в вектор

- $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{ij}^2} = \|\mathrm{Vec}(A)\|_2 = \sqrt{\mathrm{tr}(A^*A)} = \sqrt{\mathrm{tr}(AA^*)}$ — норма Фробениуса
- $\|A\|_C = \max_{i,j}|a_{ij}|$ — норма Чебышева, не является матричной
- $\|A\|_{\mathrm{sum}} = \sum_{i,j}|a_{ij}|$

Определение:
Операторная норма:

$$\|A\|_{a\to b} = \sup_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|_b}{\|x\|_a} = \sup_{x\neq 0}\left\|A\frac{x}{\|x\|_a}\right\|_b = \sup_{\|y\|_a=1}\|Ay\|_b = \max_{\|y\|_a=1}\|Ay\|_b$$

При $a = b = p \geq 1$ называется p-норма матрицы

$$\|A\|_p = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p}$$

Спойлер:

$$\|A\|_2 = \sigma_1(A) = \sqrt{\lambda_1(A^*A)} = \sqrt{\lambda_1(AA^*)}$$

1.3 Ортогональность и унитарные матрицы

Определение:
$(\cdot, \cdot) : V \times V \to F$ — скалярное произведение, если

1. $(x, x) \geq 0,\ x = 0 \Leftrightarrow (x, x) = 0$
2. $(x, y) = \overline{(y, x)}$
3. $(\alpha x, y) = |\alpha|(x, y)$
4. $(x + y, z) = (x, z) + (y, z)$

Примеры:
- $\sum_i x_i \overline{y_i} = y^* x$ — естественное скалярное произведение на $\mathbb{C}^n$
- $(A, B)_F = \sum_{i,j} a_{ij} \overline{b_{ij}} = \mathrm{tr}\big(B^* A\big)$ — естественное скалярное произведение на $\mathbb{C}^{m \times n}$

Полезные неравенства:
- $|(x, y)| \leq (x, x)^{\frac{1}{2}} * (y, y)^{\frac{1}{2}}$ — КБШ
- $\left|y^* x\right| \leq \|x\|_p \|y\|_q$, где $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ — Гельдера

Определение:
$U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ — унитарная, если

$$U^{-1} = U^*$$

Ортогональность строк и столбцов U
Так как $UU^* = U^*U = I$:

$$U^* U = \begin{bmatrix} u_1^* \\ \vdots \\ u_n^* \end{bmatrix} [u_1, ..., u_n] = \begin{bmatrix} u_1^* u_1 & ... & u_1^* u_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_n^* u_1 & ... & u_n^* u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

Утверждение (1):
Если $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ — унитарная, то $\forall x \in \mathbb{C}^n$:

$$\|Ux\|_2 = \|x\|_2$$

Доказательство:

$$\|Ux\|_2^2 = (Ux)^* Ux = x^* \underbrace{U^* U}_{I} x = x^* x = \|x\|_2^2$$

■

Утверждение (2):
Если $U \in \mathbb{C}^{m\times m}, V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ — унитарные, то $\forall A \in \mathbb{C}^{m\times n}$:

$$\|UAV\|_F = \|A\|_F$$
$$\|UAV\|_2 = \|A\|_2$$

Доказательство:

$$\|UAV\|_F^2 = \operatorname{tr}\big((UAV)^*UAV\big) = \operatorname{tr}\big((AV)^*AV\big) = \operatorname{tr}\big(AV(AV)^*\big) = \operatorname{tr}\big(AA^*\big) = \|A\|_F^2$$

$$\|UAV\|_2 = \sup_{x\neq 0}\frac{\|UAVx\|_2}{\|x\|_2} = \sup_{x\neq 0}\frac{\|AVx\|_2}{\|x\|_2} = \sup_{x\neq 0}\frac{\|AVx\|_2}{\|Vx\|_2} = \sup_{Vx\neq 0}\frac{\|AVx\|_2}{\|Vx\|_2} = \sup_{y\neq 0}\frac{\|Ay\|_2}{\|y\|_2} = \|A\|_2$$

■

1.4 Разложение Шура

Смутные воспоминания с первого курса:

- Матрицы A и B подобны, если $\exists S : A = SBS^{-1}$
- Собственное разложение матрицы $A = S\Lambda S^{-1}$, где Λ диагональная матрица с собственными значениями. Существует не всегда 😢 .
- ЖНФ матрицы $A = SJS^{-1}$, где

$$J = \begin{bmatrix} J_1(\lambda_1) & & \\ & \ddots & \\ & & J_{k(\lambda_k)} \end{bmatrix}$$

  Существует всегда, но не подходит для вычислений 😢 .

Теорема (Разложение Шура): $\forall A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ найдется унитарная $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ и верхнетреугольная матрица $T \in \mathbb{C}^{n\times n}$, такие что

$$A = UTU^*, \quad T = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \dots & * \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

Доказательство (По индукции):

- Для $n = 1$ — очевидно
- $\exists(\lambda_1, v_1) : Av_1 = \lambda_1 v_1,\ \|v_1\|_2 = 1.$
  Построим $U_1 = [v_1, \dots, v_n] \in \mathbb{C}^{n\times n}$ — унитарная

$$U_1^* A U_1 = \begin{bmatrix} v_1^* \\ \vdots \\ v_n^* \end{bmatrix} A[v_1, \dots, v_n] = \begin{bmatrix} v_1^* \\ \vdots \\ v_n^* \end{bmatrix} [Av_1, \dots, Av_n] = \begin{bmatrix} v_1^*Av_1 & v_1^*Av_2 & \dots \\ v_2^*Av_1 & \ddots & \\ \vdots & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda & * \\ 0 & A_1 \end{bmatrix} \overset{\text{по индукции}}{=}$$

$$\overset{\text{по индукции}}{=} \begin{bmatrix} \lambda & * \\ 0 & U_2T_2U_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix} * \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda & * \\ 0 & T_2 \end{bmatrix}}_{\text{верхнетреугольная}} * \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{bmatrix}^*$$

■

Лекция 2. Малоранговое приближение матриц – 1

28 января 2025 г.

2.1 Нормальные матрицы

Определение:
$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ — нормальная, если

$$A^*A = AA^*$$

Примеры:
- $AA^* = A^*A = I$ — унитарная
- $A^* = A$ — эрмитова
- $A^* = -A$ — косоэрмитова

Определение:
Матрица A называется унитарно диагонализуемой, если существуют унитарная матрица U и диагональная матрица Λ такая, что $A = U\Lambda U^*$.

Теорема:
Матрица A унитарно диагонализуема $\Longleftrightarrow$ A — нормальная.

Доказательство:
- $\Longrightarrow$

$$\begin{aligned} A^*A &= (U\Lambda U^*)^* U\Lambda U^* = U\Lambda^* U^* U\Lambda U^* = U\Lambda^*\Lambda U^* \\ &= U\Lambda\Lambda^* U^* = U\Lambda U^* U\Lambda^* U^* = U\Lambda U^*(U\Lambda U^*)^* = AA^* \end{aligned}$$

- $\Longleftarrow$

  Применим разложение Шура, тогда $A = UTU^*$.

$$A^*A = AA^* \Longleftrightarrow UT^*TU^* = UTT^*U \Longleftrightarrow T^*T = TT^*$$

  Докажем по индукции, что $T^*T = TT^* \Longrightarrow T$ — диагональна.

  База — очевидно.

$$T = \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & C \end{bmatrix}, \quad TT^* = \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & C \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \overline{a} & 0 \\ b^* & C^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |a|^2 + \|b\|_2^2 & bC^* \\ Cb^* & CC^* \end{bmatrix}$$

$$T^*T = \begin{bmatrix} |a|^2 & \overline{a}b \\ b^*a & b^*b + C^*C \end{bmatrix}$$

  $|a|^2 = |a|^2 + \|b\|_2^2 \Longrightarrow b = 0 \Longrightarrow C^*C = C^*C$ — диагональна по индукции

■

Следствие:
- A — унитарная $\Longleftrightarrow$ A — нормальная и $|\lambda| = 1$, где λ элементы матрицы Λ
- A — эрмитова $\Longleftrightarrow$ A — нормальная и $\lambda \in \mathbb{R}$
- A — косоэрмитова $\Longleftrightarrow$ A — нормальная и $\lambda \in i * \mathbb{R}$

2.2 Знакоопределенные матрицы

Определение:

1. Эрмитова $A \in \mathbb{F}^{n \times n},\ \mathbb{F} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ называется положительно определенной, если

$$\forall x \in \mathbb{F}^n \setminus \{0\} : x^* A x > 0$$

2. Эримтова $A \in \mathbb{F}^{n \times n},\ \mathbb{F} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ называется неотрицательно определенной (положительно полуопределенной), если

$$\forall x \in \mathbb{F}^n : x^* A x \geq 0$$

Примеры:

Матрица Грама $A^* A$

- $(A^* A)^* = A^* A^{**} = A^* A^*$ — эрмитова
- $x^* A^* A x = (Ax)^* A x = \|A\|_2^2 \geq 0\ \forall x \Longrightarrow$ неотрицательно определенная
- Пусть (λ_i, v_i) — собственная пара матрицы $A^* A$, тогда

$$0 \leq v_i^* A^* A v_i = \lambda_i v_i^* v_i = \lambda_i \|v_i\|_2^2 \Longrightarrow \lambda_i \geq 0$$

2.3 Сингулярное разложение (SVD)

Теорема:

Пусть $A \in \mathbb{F}^{m \times n},\ \mathbb{F} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ имеет ранг r. Тогда существуют унитарные $U \in \mathbb{F}^{m \times m}$ и $V \in \mathbb{F}^{n \times n}$ и числа $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > 0$:

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

Доказательство:

1. $A^* A$ — эрмитова и все ее собственные занчения неотрицательны, значит мы можем предствить ее в следующем виде

$$A^* A = V \Lambda V^* \Longleftrightarrow V^* A^* A V = \Lambda = \Sigma_n^2, \quad \Sigma_n = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_n), \quad \sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_n > 0$$

2. Пусть $r : \sigma_r > 0, \sigma_{r+1} = 0, \Sigma_r = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r)$.
   Так как V — унитарна, то каждый из ее r первых столбцов будет ортогонален каждому из $n - r$ последних. Обозначим

$$V = [V_r\ \ V_r^{\perp}]$$

   Тогда равенство $V^* A^* A V = \Sigma_n^2$ можно записать следующим образом

$$\begin{bmatrix} V_r^* A^* A V_r & * \\ * & V_r^{\perp *} A^* A V_r^{\perp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_r^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

   Рассмотрим получившиеся равенства:

   - $V_r^* A^* A V_r = \Sigma_r^2$
     $\underbrace{\Sigma_r^{-1} V_r^* A^*}_{U_r^*} \underbrace{(A V_r \Sigma_r^{-1})}_{U_r} = I$
     $A V_r = U_r \Sigma_r$
   - $V_r^{\perp *} A^* A V_r^{\perp} = 0$
     $\operatorname{tr}\Big(\big(A V_r^{\perp}\big)^* A V_r^{\perp} \Big) = 0$
     $\big\| A V_r^{\perp} \big\|_F^2 = 0 \Leftrightarrow A V_r^{\perp} = 0$

   Получаем

$$AV = [AV_r \ \ AV_r^{\perp}] = [U_r\Sigma_r \ \ 0] = [U_r \ \ U_r^{\perp}]\begin{bmatrix}\Sigma_r & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}$$

где $U_r^{\perp}$ получена путем произвольного дополнения U_r до ортогонального базиса. Таким образом, $AV = U\Sigma$, откуда $A = U\Sigma V^{-1} = U\Sigma V^*$.

3. $\Sigma = U^*AV$ следовательно $r = \operatorname{rank}(A)$.

■

Следствие:

1. Сингулярные числа определяются однозначно и равны

$$\sigma_i(A) = \sqrt{\lambda_i(AA^*)} = \sqrt{\lambda_i(A^*A)}, \quad i = 1, \dots, r$$

Доказательство:

$$A = U\Sigma V^*$$
$$A^*A = V\begin{bmatrix}\Sigma_r^2 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}V^*$$

Отсюда $\sigma_i(A) = \sqrt{\lambda_i(AA^*)}$. Сингулярные числа определены однозначно, так как собственные значения определены однозначно.

■

2. $Av_i = \sigma_i u_i, \quad A^*u_i = \sigma_i v_i, \quad i = 1, \dots, r$

Доказательство:

$$A = U\Sigma V^*$$
$$AV = U\Sigma \Longrightarrow Av_i = \sigma_i u_i$$
$$A^*U = V\Sigma \Longrightarrow A^*u_i = \sigma_i v_i$$

■

3. $A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^*$

Доказательство:
Просто расписываем произведение матриц $U\Sigma V^*$.

Виды записи SVD

1. Полное SVD — `np.linalg.svd(A)`

$$A_{m\times n} = U_{m\times m}\Sigma_{m\times n}V_{n\times n}^*$$

бессмыслено занимает много памяти, в случае когда m сильно больше n 😢

2. Тонкое SVD — `np.linalg.svd(A, full_matrices=False)`

$$A_{m\times n} = U_{m\times k}\Sigma_{k\times k}V_{k\times n}^*, \quad k = \min(m, n)$$

3. Компактное SVD, $k = r$.

Утверждение:

- $\|A\|_2 = \|\Sigma\|_2 = \sigma_1(A)$
- $\|A\|_F = \|\Sigma\|_F = \sqrt{\sigma_1(A)^2 + \dots + \sigma_{r(A)}^2}$

Теорема (Полярное разложение):
Пусть $A \in \mathbb{F}^{m\times n}$, причем $m > n$. Тогда существуют $W \in \mathbb{F}^{m\times n}$ с ортонормированными столбцами $(W^*W = I)$ и положительно полуопределенная $H \in \mathbb{F}^{n\times n}$:

$$A = WH$$

Доказательство:
Возьмем тонкое SVD для A

$$A = U\Sigma V^* = \underbrace{UV^*}_{W}\underbrace{V\Sigma V^*}_{\geq 0}$$

■

Лекция 3. Малоранговое приближение матриц – 2

4 февраля 2025 г.

3.1 QR разложение

Теорема (QR разложение): Для $A \in \mathbb{F}^{m\times n}, m \geq n$ найдется $Q \in \mathbb{F}^{m\times n}$ с ортонормированными столбцами $(Q^*Q) = I$ и верхнетреугольная $R \in \mathbb{F}^{n\times n}$:

$$A = QR$$

Доказательство:

- В полноранговом случае Грам-Шмидт (ГШ):

$$\begin{aligned}
\tilde{q}_1 &= a_1, & q_1 &= \frac{\tilde{q}_1}{\|\tilde{q}_1\|_2} \\
\tilde{q}_2 &= a_2 - q_1(q_1^* a_2), & q_2 &= \frac{\tilde{q}_2}{\|\tilde{q}_2\|_2} \\
&\vdots & &\vdots \\
\tilde{q}_n &= a_n - q_1(q_1^* a_n) - \ldots - q_{n-1}(q_{n-1}^* a_n), & q_n &= \frac{\tilde{q}_n}{\|\tilde{q}_n\|_2}
\end{aligned}$$

  Матрица R — верхнетреугольная, так как a_i представляетсялинейной комбинацией q_j при $j < i$:

$$[a_1 \ \ldots \ a_n] = [q_1 \ \ldots \ q_n] \underbrace{\begin{bmatrix} * & * & \ldots & * \\ 0 & * & \ldots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & * \end{bmatrix}}_{R}$$

- В случае неполного ранга и $m = n$:

  Воспользуемся SVD разложением, так как $r = \operatorname{rank}(A) < n$, то

$$A = U\Sigma V^*, \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \sigma_r & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \end{bmatrix}$$

  Построим матрицу A_k следующим образом

$$A_k = U \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \sigma_r & & & \\ & & & \frac{1}{k} & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \frac{1}{k} \end{bmatrix} V^* \longrightarrow A, \text{при } k \to \infty$$

Так как $\operatorname{rank}(A_k) = n$, то мы можем посчитать QR разложение для них

$$A_k = Q_k R_k, \quad \{Q : Q^* Q = I\} \text{ — компактное}$$

Теперь докажем, что $\mathbb{Q} = \{Q : Q^* Q = I\}$ — компактное, для этого достаточно доказать ограниченность и замкнутость.

- $\|Q\|_2 = 1 \Longrightarrow$ ограниченно
- Рассмотрим $f(Q) = Q^* Q - I = 0$, она непрерываная. Заметим, что $\mathbb{Q} = f^{-1}(\{0\})$, $\{0\}$ — замкнуто $\Longrightarrow f^{-1}(\{0\})$ — тоже замкнуто

Зная что $\mathbb{Q}$ — компактное, мы можем выделить подпоследовательность

$$Q_{k_j} \to Q,\ j \to \infty, \text{где } Q \in \mathbb{Q}$$

$$A_{k_j} = Q_{k_j} R_{k_j} \Longleftrightarrow R_{k_j} = Q^*_{k_j} A_{k_j} \text{ — сходится к верхнетреугольной}$$

- Для прямоугольных A, берем квадратную $A' = [A, 0] = QR$.

1. Процесс Грама-Шмидта неустойчив!
2. Мы познакомимся с устойчивыми алгоримами позже, а пока пользуемся

$Q, R =$ `np.linalg.qr(A)`

3. Количество операций с плавающей точкой

$$\#\text{FLOPs} = O(mn^2)$$

3.2 Скелетное разложение

Теорема:
Для любой матрицы $A \in \mathbb{F}^{m \times n}, \mathbb{F} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ ранга r найдутся $U \in \mathbb{F}^{m \times r}$ и $V \in \mathbb{F}^{n \times r}$:

$$A = UV^T$$

Доказательство:
Пусть $u_1, ..., u_r$ — базис пространства столбцов A

$$a_i = [u_1, ..., u_r] \begin{bmatrix} c_{1i} \\ \vdots \\ c_{ri} \end{bmatrix} = Uc_i$$

$$[a_1, ..., a_n] = [Uc_1, ..., Uc_n] = U[c_1, ..., c_n] = UV^T$$

Виды записи:
- Индексная запись (разделенные переменные i и j):

$$a_{ij} = \sum_{\alpha=1}^{r} u_{i\alpha} v_{i\alpha}$$

Удобна для многомерных пространств:

$$a_{ijk} = \sum_{\alpha=1}^{r} u_{i\alpha} v_{i\alpha} w_{k\alpha}$$

- Сумма матриц ранга 1:

$$A = u_1 v_1^T + ... + u_r v_r^T$$

Неединственность и приведение к виду SVD:

- $A = UV^T = (US)(S^{-1}V^T) = \tilde{U}\tilde{V}^T$
- Скелетное $\to$ SVD:

$$A = UV^T = Q_u R_u (Q_v R_v)^T = Q_u \underbrace{R_u Q_v^T}_{\text{SVD } \hat{U}\hat{\Sigma}\hat{V}^*} R_v^T = \left(Q_u \hat{U}\right)\hat{\Sigma}\left(\hat{V}^* R_v^T\right) = \hat{\hat{Q}}\hat{\Sigma}\hat{\hat{V}}^T \text{ — компактное SVD}$$

3.3 Проекторы

Определение:

$P \in \mathbb{C}^{n \times n}$ — ортопроектор на $S \in \mathbb{C}^n$, если

1. $\mathrm{Im}(P) = S$
2. $P^2 = P$
3. $P^* = P$

Если выполнены только 1 и 2, то P называется проектором на S

Замечание:

- Рассмотрим

$$(Px)^*(x - Px) = x^* P^* (I - P)x = x^* P(I - P)x = x^*(P - P^2)x = x^*(P - P)x = 0$$

- $(I - P)$ — ортопроектор на $S^\perp$

Теорема (ATATA): Пусть $A \in C^{m \times n}$ полного размера и $m \geq n$. Тогда ортопроектор на $\mathrm{Im}(A)$ имеет вид:

$$P = A(A^*A)^{-1}A^*$$

Доказательство:

1. $Px = A\left((A^*A)^{-1}A^*x\right) \Rightarrow \mathrm{Im}(P) \subseteq \mathrm{Im}(A)$
   $PA = A \Rightarrow PAx = Ax \Rightarrow \mathrm{Im}(A) \subseteq \mathrm{Im}(P)$
2. $P^2 = A(A^*A)^{-1}A^*A(A^*A)^{-1}A^* = A(A^*A)^{-1}A^* = P$
3. $P^* = \left(A(A^*A)^{-1}A^*\right)^* = A(A^*A)^{-1}A^* = P$

Следствие:

Для ортогонального базиса Q имеем

$$P = Q^*Q$$

На практике ортогонализуем столбцы A через QR

Утверждение:

Пусть SVD матрицы A ранга r имеет вид:

$$A = \begin{bmatrix} U_r & \tilde{U}_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_r & \tilde{V}_r \end{bmatrix}^*$$

Тогда:

1. $U_r U_r^*$ — ортопроектор на $\mathrm{Im}(A)$
2. $\tilde{V}_r \tilde{V}_r^*$ — ортопроектор на $\ker(A)$

3. $\tilde{U}_r \tilde{U}_r^*$ — ортопроектор на $\mathrm{Im}(A)^\perp \equiv \ker(A^*)$
4. $V_r V_r^*$ — ортопроектор на $\ker(A)^\perp \equiv \mathrm{Im}(A^*) \Longrightarrow$
   $\Longrightarrow A = U_r U_r^* A = A V_r V_r^* = U_r U_r^* A V_r V_r^*$

3.4 Приближение матрицами меньшего ранга

Определение:
Норма $\|\cdot\|$ — унитарно-инвариантная, если $\forall A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ и $\forall$ унитарных $U \in \mathbb{C}^{m\times n}, V \in \mathbb{C}^{n\times n}$:

$$\|UAV\| = \|A\|$$

Примеры:
- $\|A\|_2 = \sigma_1(A) = \|\sigma\|_\infty$, где σ — вектор сингулярных чисел
- $\|A\|_F = \sqrt{\sigma_1^2(A) + ... + \sigma_r^2(A)} = \|\sigma\|_2$
- $\|A\|_* \overset{\text{def}}{=} \sigma_1(A) + ... + \sigma_r(A) = \|\sigma\|_1$ — ядерная норма
- $\|A\|_{p,\ \text{shatten}} = \|\sigma\|_p$ — Шаттеновские нормы

Теорема (Эккарта-Янга-Мирского):
Пусть $k < \mathrm{rank}(A)$ и

$$A_k = U_k \Sigma_k V_k^* = U \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \sigma_k & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \end{bmatrix} V^* \quad \text{(Усеченное SVD)}$$

тогда

$$\min_{B:\,\mathrm{rank}(B)\le k} \|A - B\| = \|A - A_k\| = \begin{cases} \sigma_{k+1}, & \text{для } \|\cdot\|_2 \\ \sqrt{\sigma_{k+1}^2 + ...\sigma_r^2}, & \text{для } \|\cdot\|_F \\ \sigma_{k+1} + ...\sigma_r, & \text{для } \|\cdot\|_* \end{cases}$$

для любой унитарно-инвариантной $\|\cdot\|$.

Лекция 4. Малоранговое приближение матриц – 3

11 февраля 2025 г.

4.1 Наилучшее приближение матрицей с заданным рангом

Доказательство (Для $\|\cdot\|_2$):

$$\|A\|_2 = \sup_{\|y\|_2} \|Ay\|_2$$

$$\exists z : \|z\|_2 = 1, z \in \ker(B) \cap \operatorname{span}\{v_1, \dots, v_{k+1}\}$$

$$\|A - B\|_2 \geq \|(A-B)z\|_2 = \|Az\|_2 = \|U\Sigma V^* z\|_2 = \|\Sigma V^* z\|_2 =$$

$$= \sqrt{\sum_{i=1}^{k+1} \sigma_i^2 |v_i^* z|^2} \geq \sigma_{k+1} \sqrt{\sum_{i=1}^{k+1} |v_i^* z|^2} = \sigma_{k+1} \|V^* z\|_2 = \sigma_{k+1}$$

При $B = A_k$

$$\|A - A_k\|_2 = \left\| U \left(\Sigma - \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_k & \\ & & & 0 & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \right) V^* \right\|_2 = \left\| \begin{bmatrix} 0 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 0 & \\ & & & \sigma_{k+1} & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \right\|_2 = \sigma_{k+1}$$

Альтернативные формулировки с помощью ортопроектора

$$\|A - A_k\| = \min_{\substack{U \in \mathbb{C}^{m\times k} \\ U^*U = I}} \|A - UU^*A\| = \min_{\substack{V \in \mathbb{C}^{n\times k} \\ V^*V = I}} \|A - AVV^*\| = \min_{\substack{U \in \mathbb{C}^{m\times k}, V \in \mathbb{C}^{n\times k} \\ U^*U = I, V^*V = I}} \|A - UU^*AVV^*\|$$

Доказательство:

Применим усеченное SVD, тогда

$$A_k = U_k U_k^* A = A V_k V_k^* = U_k U_k^* A V_k V_k^*$$

■

4.2 Наилучшее приближение матрицей с заданным образом

Утверждение:

Пусть $Q \in \mathbb{C}^{n\times k}, Q^*Q = I$. Тогда

$$\min_{C \in \mathbb{C}^{k\times n}} \|A - QC\|_F = \|A - QQ^*A\|_F$$

Доказательство:

$$\|A - QC\|_F^2 = \left\| [Q \;\; Q^\perp]^* (A - QC) \right\|_F^2 = \left\| \begin{bmatrix} Q^*(A - QC) \\ (Q^\perp)^*(A - QC) \end{bmatrix} \right\|_F^2 = \|Q^*A - C\|_F^2 + \underbrace{\left\| (Q^\perp)^* A \right\|_F^2}_{\text{const}}$$

$$\Downarrow$$

$$C = Q^*A$$

Простейший рандомизированный алгоритм

1. Генерируем матрицу $\Omega \in \mathbb{R}^{n\times(k+p)}$ с элементами $\sim N(0,1)$
2. $Y := A\Omega$
3. $Q, R = \mathrm{QR}(Y)$
4. $A \approx QQ^*A$

Итоговая сложность $O(mnk)$

Не доделано