сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P10-80-702

Л.М.Сороко

ПСЕВДООБРАЩЕНИЕ
ПРИ ПОМОЩИ СИНГУЛЯРНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ
I. Теория метода

1980

Введение. Рассмотрим систему из трех линейных уравнений с двумя неизвестными:

$$\left.\begin{aligned} 2x_1 + x_2 &= 4, \\ x_1 + 2x_2 &= 5, \\ x_1 - x_2 &= -1, \end{aligned}\right\} \qquad /1/$$

которая характеризуется прямоугольной матрицей

$$[H] = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} . \qquad /2/$$

Никаких априорных данных об искомом векторе $\vec{x} = (x_1, x_2)$ не известно. Как решить такую систему? Если /1/ представляет совместную систему уравнений, то их число можно уменьшить до числа неизвестных компонент вектора $\vec{x}$ при помощи линейных комбинаций между исходными уравнениями этой системы. Если /1/ является несовместной системой уравнений, то ее решают методами регрессионного анализа. Так как заранее неизвестно, является ли система уравнений совместной или нет, то необходимо пользоваться универсальным алгоритмом, который охватывает оба эти случая и допускает автоматическое решение системы уравнений /1/ при помощи ЭВМ.

Один из методов решения системы уравнений /1/ заключается в том, чтобы найти такую псевдообратную прямоугольную матрицу $[H]^+$, которая дает решение задачи в виде оценки

$$\vec{x} = [H]^+ \vec{z}, \qquad /3/$$

где $\vec{z} = (z_1, z_2, z_3)$ - вектор-столбец правой части системы уравнений /1/. Итерационные алгоритмы построения псевдообратной матрицы $[H]^+$ даны в /1/. Для системы уравнений /1/ псевдообратная матрица равна

$$[H]^+ = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}, \qquad /4/$$

и для $\vec{z} = [4,\ 5,\ -1]$ получаем оценку решения:

$$\hat{\vec{x}} = [H]^+ \vec{z} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}. \qquad /5/$$

Искомые величины равны $x_1 = 1$, $x_2 = 2$. Можно убедиться в том, что исходная система уравнений /1/ является совместной.

Если же $\vec{z}' = [4, 5, 0]$, то оценка решения, найденная при помощи той же псевдообратной матрицы /4/, имеет вид:

$$\hat{\vec{x}}' = [H]^+ \vec{z}' = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix}. \qquad /6/$$

Теперь $x_1' = 4/3$, $x_2' = 5/3$. Вторая система уравнений с правой частью, задаваемой вектором $\vec{z}' = [4, 5, 0]$, является несовместной. Найденный ответ /6/ удовлетворяет критерию наименьших квадратов.

Псевдообращение. Существует несколько видов псевдообратных матриц, каждый из которых предназначен для решения различных классов задач. Так, например, псевдообратная матрица $[H]^+$, определяемая выражением [1]

$$\begin{aligned} [H]^+ &= \lim_{\alpha \to 0} \left[[H]^T [H] + \alpha^2 [I] \right]^{-1} [H]^T = \\ &= \lim_{\alpha \to 0} [H]^T \left[[H][H]^T + \alpha^2 [I] \right]^{-1}, \end{aligned} \qquad /7/$$

где $[I]$ - единичная матрица, а $[H]^T$ - транспонированная матрица от $[H]$, позволяет найти вектор-оценку минимальной нормы

$$\hat{\vec{f}} = [H]^+ \vec{s}, \qquad /8/$$

которая удовлетворяет уравнению

$$[H]\vec{f} = \vec{s} \qquad /9/$$

и дает минимальное значение невязки

$$\|\hat{\vec{f}} - [H]\vec{s}\|^2. \qquad /10/$$

Если число столбцов в матрице $[H]$ больше числа строк, а ее строки линейно-независимы, то псевдообратная такой матрицы, равная

$$[H]^+ = [H]^T [[H][H]^T]^{-1} \quad , \qquad /11/$$

содержит больше строк, чем столбцов /рис. 1/.

Если число строк в матрице $[H]$ больше числа столбцов, а ее столбцы линейно-независимы, то псевдообратная такой матрицы содержит больше столбцов, чем строк /рис. 2/. В первом случае мы имеем дело с неопределенной задачей, во втором – с переопределенной.

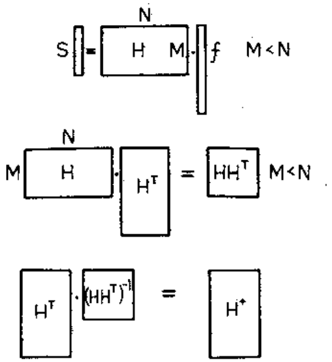

Рис. 1. Схема недоопределенной задачи. Число столбцов в матрице $[H]$ больше числа строк. Сверху показано графическое изображение уравнения /9/. Снизу – процесс нахождения псевдообратной матрицы $[H]^+$ при помощи соотношения /11/.

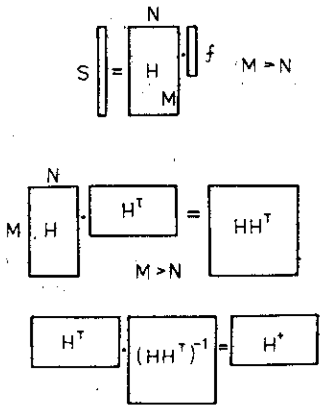

Рис. 2. Схема переопределенной задачи. Число строк в матрице $[H]$ больше числа столбцов. Сверху – графическое изображение уравнения /9/. Снизу – процесс нахождения псевдообратной матрицы $[H]^+$ при помощи соотношения /11/.

Рассмотрим некоторые примеры псевдообратных матриц.

1/ Если $[H]$ – 1x1 – матрица или скаляр h, то ее псевдообратная матрица $[H]^+$ равна

$$[H]^+ = \begin{cases} \dfrac{1}{h}, & \text{если} \quad h \neq 0, \\ 0, & \text{если} \quad h = 0. \end{cases} \qquad /12/$$

2/ Если $[H]$ – диагональная $N{\times}N$ матрица вида

$$[H] = \mathrm{diag}[\lambda_0, \lambda_1, \ldots, \lambda_{N-1}], \qquad /13/$$

то ее псевдообратная матрица равна

$$[H]^+ = \mathrm{diag}[\lambda_0^+, \lambda_1^+, \ldots, \lambda_{N-1}^+], \qquad /14/$$

где

$$\lambda_k^+ = \begin{cases} \dfrac{1}{\lambda_k}, & \text{если } \lambda_k \neq 0, \\ 0, & \text{если } \lambda_k = 0, \quad k = 0,1,\ldots,N-1. \end{cases} \qquad /15/$$

3/ Если $[H]$ – симметричная матрица размером $N\times N$, то при помощи ортогонального преобразования $[T]$ матрицу $[H]$ можно привести к диагональному виду

$$[H] = [T][\Lambda][T]^T, \qquad /16/$$

где $[\Lambda]$ – диагональная матрица с диагональными элементами λ_k, $k = 0, 1, \ldots, N-1$. Если матрицу ортогонального преобразования $[T]$ записать в виде

$$[T] = [\vec{t}_0 \mid \vec{t}_1 \mid \ldots \mid \vec{t}_{N-1}], \qquad /17/$$

где $\vec{t}_k$, $k = 0, 1, \ldots, N-1$, – векторы-столбцы, из которых состоит матрица $[T]$, то

$$[H] = [T][\Lambda][T]^T = \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_k \vec{t}_k \vec{t}_k^{\,T}, \qquad /18/$$

а ее псевдообратная равна

$$[H]^+ = \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_k^+ \vec{t}_k \vec{t}_k^{\,T}, \qquad /19/$$

где $\vec{t}_k \vec{t}_k^{\,T}$ – прямое произведение вектора $\vec{t}_k$ на вектор $\vec{t}_k^{\,T}$, которое представляет собой квадратную матрицу размером $N\times N$ с рангом, равным 1.

4/ Псевдообратная от суммы двух матриц $[A]$ и $[B]$ равна

$$[[A] + [B]]^+ = [[I] + [A]^+ [B]]^{-1} [A]^+, \qquad /20/$$

если известна псевдообратная $[A]^+$, или равна

$$[[A] + [B]]^+ = [[I] + [B]^+ [A]]^{-1} [B]^+, \qquad /21/$$

если известна псевдообратная $[B]^+$.

5/ Достаточными признаками псевдообратной матрицы являются:

а/ $[H][H]^+$ и $[H]^+[H]$ – симметричные матрицы,

б/ $[H][H]^+[H] = [H]$, /22/

в/ $[H]^+[H][H]^+ = [H]^+$.

6/ Псевдообратная от произведения двух матриц $[A]$ и $[B]$ равна

$$[[A][B]]^+ = [B_1]^+[A_1]^+ \quad , \qquad /23/$$

где

$$\left.\begin{aligned} [B_1] &= [A]^+[A][B] \ , \\ [A_1] &= [A][B_1][B_1]^+ \ . \end{aligned}\right\} \qquad /24/$$

7/ Если размеры матриц $[A]$ и $[B]$ равны $N\times r$ и $M\times r$ соответственно, а ранг матриц $[A]$ и $[B]$ равен r, то

$$[[A][B]]^+ = [B]^+[A]^+ . \qquad /25/$$

Сингулярное разложение. Наиболее мощным алгоритмом построения псевдообратной матрицы $[H]^+$ является метод сингулярных разложений [2,3,4], который будет изложен ниже. Пусть исходная матрица $[H]$ размером $M\times N$ имеет ранг, равный r. Тогда существуют две матрицы ортогональных преобразований $[U]$ и $[V]$ размерами $M\times M$ и $N\times N$ соответственно, такие, что

$$[U]^T[H][V] = \left[\begin{array}{c|c} [\Lambda] & [0] \\ \hline [0] & [0] \end{array}\right] , \qquad /26/$$

где $[\Lambda]$ – диагональная матрица размером $r\times r$ с положительно определенными диагональными элементами. Если матрицы $[U]$ и $[V]$ записать в виде [5]

$$\begin{aligned} [U] &= [\ \vec{u}_0 \ \vdots\ \vec{u}_1 \ \vdots\ \cdots \ \vdots\ \vec{u}_{r-1}\ ], \\ [V] &= [\ \vec{v}_0 \ \vdots\ \vec{v}_1 \ \vdots\ \cdots \ \vdots\ \vec{v}_{r-1}\ ], \end{aligned} \qquad /27/$$

где $\vec{u}_i$, $i = 0,1,\ldots,(r-1)$, – M -компонентные векторы-столбцы матрицы $[U]$, а $\vec{v}_i$, $i = 0,1,\ldots,(r-1)$, – N -компонентные векторы-столбцы матрицы $[V]$, то

$$[H] = \sum_{i=0}^{r-1} \lambda_i \vec{v}_i \vec{u}_i^{\,T}, \qquad /28/$$

где λ_i^2, $i = 0,1, \ldots, (r-1)$, – положительно определенные собственные значения матриц $[H][H]^T$ и $[H]^T[H]$. Векторы $\vec{u}_i$, $i = 0,1,\ldots,(r-1)$, являются ортонормированными собственными векторами матрицы $[H][H]^T$, а векторы $\vec{v}_i$, $i=0,1,\ldots,(r-1)$, – ортонормированными собственными векторами матрицы $[H]^T[H]$. Прямое произведение векторов $\vec{v}_i \vec{u}_i^T$ представляет собой матрицу размером $M \times N$, ранг которой равен 1 /рис. 3/.

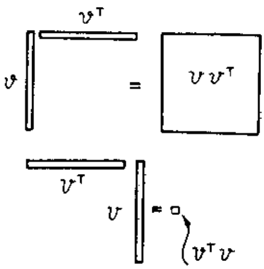

Рис.4. Схема формирования прямого /вверху/ и скалярного /внизу/ произведения двух векторов.

Тогда псевдообратная $[H]^+$ равна [3,4]

$$[H]^+ = \sum_{i=0}^{r-1} \lambda_i^{-1} \vec{u}_i \vec{v}_i^{\,T}. \qquad /29/$$

Величины λ_i, $i = 0,1,\ldots,(r-1)$, называются сингулярными значениями матрицы $[H]$, а векторы $\vec{u}_i$ и $\vec{v}_i$, $i=0,1,\ldots,(r-1)$, – ее сингулярными векторами. Напомним, что векторы $\vec{u}_i$ и $\vec{v}_i$, $i=0,1,\ldots,(r-1)$, являются собственными векторами произведений $[H][H]^T$ и $[H]^T[H]$ соответственно. В силу инвариантности собственных значений относительно операции транспонирования исходной матрицы собственные значения λ_i^2, $i=0,1,\ldots,(r-1)$, являются общими как для матрицы $[H][H]^T$, так и для матрицы $[H]^T[H]$.

Если вместо полной суммы /28/ взять усеченную сумму вида

$$[H_k] = \sum_{i=0}^{k-1} \lambda_i \vec{u}_i \vec{v}_i^{\,T}, \quad k < r, \qquad /30/$$

то в силу ортонормированности векторов $\vec{u}_i$ и $\vec{v}_i$ норма разности между $[H]$ и $[H_k]$ будет равна

$$\|[H] - [H_k]\|^2 = \sum_{i=k}^{r-1} \lambda_i^2 . \qquad /31/$$

Соотношение /31/ означает, что процедура усечения суммы /28/ отвечает критерию наименьших квадратов и что в рамках критерия минимума среднеквадратичной ошибки усечения не существует другого, оптимального, линейного разложения матрицы $[H]$, чем сингулярное разложение.

Если псевдообратную матрицу $[H]^+$ записать в виде ряда /29/, то псевдообратная оценка решения уравнения /9/ примет вид

$$\hat{\vec{f}} = [H]^+ \vec{s} = \sum_{i=0}^{r-1} \lambda_i^{-1} (\vec{u}_i^T \vec{s}) \vec{v}_i \;, \qquad /32/$$

где $\vec{u}_i^T \vec{s}$ - скаляр /см. рис. 3/. В такой записи оценка $\hat{\vec{f}}$ равна сумме конечного числа составляющих векторов, направленных вдоль нормированных векторов $\vec{v}_i$, с весовыми коэффициентами, равными

$$\lambda_i^{-1} (\vec{u}_i^T \vec{s}) \;. \qquad /33/$$

Последовательные оценки $\hat{\vec{f}}_k$ и $\hat{\vec{f}}_{k-1}$ связаны соотношением

$$\Lambda \hat{\vec{f}}_k = \hat{\vec{f}}_k - \hat{\vec{f}}_{k-1} = \lambda_k^{-1} (\vec{u}_k^T \vec{s}) \vec{v}_k \;. \qquad /34/$$

При вычислении оценки $\hat{\vec{f}}$ в памяти ЭВМ должны быть записаны r сингулярных значений λ_i , $i = 0, 1, \ldots, (r-1)$, где r - ранг матрицы $[H]$, а также собственные векторы $\vec{u}$ и $\vec{v}$, $i = 0, 1, \ldots, (r-1)$. Совокупность измеряемых величин правой части уравнения /9/ в виде вектора $\vec{s}$ преобразуем в r скаляров:

$$\vec{u}_i^T \vec{s}, \quad i = 0, 1, \ldots, (r-1) \;, \qquad /35/$$

которые также записывают в память ЭВМ.

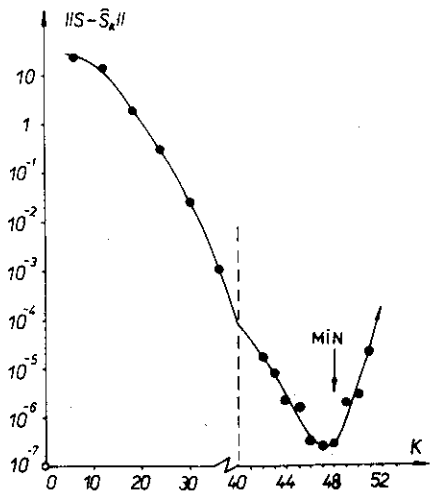

Рис.4. Зависимость нормы невязки от номера итерации k /6/. Минимум расположен при $k \approx 47$. Размер матрицы изображения равен 256x256.

Применение. Метод сингулярных разложений был успешно использован для псевдообращения как одномерных, так и двумерных сигналов, например при устранении размытия изображения /4,5/. Для матрицы изображений размером 256x256 число требуемых итераций равнялось $k \approx 40$-100 в зависимости от степени размытия регистрируемого изображения. На рис. 4 дана кривая нормы невязки /6/

$$\|\vec{s} - \vec{s}_k\|, \qquad /36/$$

где $\vec{s}$ - известное исходное изображение, записанное в виде распакованного вектора /7/ размером N^2, а $\vec{s}_k$ - оценка исходного изображения, полученная после k -й итерации. Метод сингулярных разложений был использован для восстановления изображений, полученных при помощи неизопланатической изображающей системы /6,8/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Алберт А. Регрессия, псевдообращение и рекурсивное оценивание. "Наука", М., 1977.
2. Golub G.H., Reinsch C. Singular value decomposition and least squares solutions. Numer.Math., 1970, v. 14, No. 5, p. 403-420.
3. Andrews H.C., Patterson C.L. Outer product expansion and their uses in digital image processing. The Amer.Math. Monthly, 1975, v. 82, No.1, p. 1-13.
4. Andrews H.C., Patterson C.L. Outer product expansion and their uses in digital image processing. IEEE Trans., 1976, v. C-25, No 2, p. 140-148.
5. Andrews H.C., Patterson C.L. Singular value decomposition and digital image processing. IEEE Trans., 1976, v. ASSP-24, No 1, p. 26-53.
6. Adler N., Andrews H.C. Space variant point spread function pseudoinversion. Los Angles, Univ.South.Calif., Image Proc. instit., Report 530, 1974, p. 50.
7. Pratt W.K. Vector space formulation of two-dimensional signal processing operations. Comp.Graph.Image Proc., 1975, v. 4, No 1, p. 1-24.
8. Andrews H.C. Space variant pseudoinverse restoration. Los Angles, Univ.South.Calif., Image Proc. Instit., Report 560, 1975, p. 36-42.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 октября 1980 года.