

Wstęp do metod numerycznych

Inne rodzaje faktoryzacji

P. F. Góra

<http://th-www.if.uj.edu.pl/zfs/gora/>

2017

Transformacja Householdera

Niech $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{u} \neq 0$. Tworzymy macierz

$$\mathbf{P} = \mathbb{I} - 2 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2}. \quad (1)$$

W sposób oczywisty $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}$. Obliczmy

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^2 &= \left(\mathbb{I} - 2 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} \right) \left(\mathbb{I} - 2 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} \right) \\ &= \mathbb{I} - 2 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} - 2 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} + 4 \frac{\overbrace{\mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{u}\mathbf{u}^T}^{\|\mathbf{u}\|^2}}{\|\mathbf{u}\|^4} \\ &= \mathbb{I} - 4 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} + 4 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} \\ &= \mathbb{I} \end{aligned} \quad (2)$$

Skoro $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}$ oraz $\mathbf{P}^2 = \mathbb{I}$, $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}^{-1}$: macierz (1) jest macierzą symetryczną, rzeczywistą oraz ortogonalną. Macierz taką nazywamy ortogonalną macierzą rzutową.

Niech teraz w (1)

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1, \quad (3)$$

gdzie $\hat{\mathbf{e}}_1$ jest pierwszym wektorem jednostkowym. Macierz (1) wraz z (3) nazywam *macierzą Householdera*. Obliczam

$$\mathbf{P}\mathbf{x} = \mathbf{x} - \frac{2\mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{x}}{\|\mathbf{u}\|^2}. \quad (4a)$$

Zauważmy, że $\mathbf{u}^T\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1^T\mathbf{x} = \|\mathbf{x}\|^2 \mp \|\mathbf{x}\| x_1$, gdzie x_1 jest pierwszą składową wektora \mathbf{x} .

Analogicznie $\|\mathbf{u}\|^2 = (\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1)^T (\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1) = \mathbf{x}^T \mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| x_1 \mp \|\mathbf{x}\| x_1 + \|\mathbf{x}\|^2 = 2 (\|\mathbf{x}\|^2 \mp \|\mathbf{x}\| x_1)$. Wobec tego

$$\mathbf{P}_\mathbf{x} = \mathbf{x} - \frac{2\mathbf{u} (\|\mathbf{x}\|^2 \mp \|\mathbf{x}\| x_1)}{2 (\|\mathbf{x}\|^2 \mp \|\mathbf{x}\| x_1)} = \mathbf{x} - \mathbf{u} = \pm \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1. \quad (4b)$$

Efektem działania macierzy Householdera na wskazany wektor jest wyzerowanie wszystkich jego składowych, poza pierwszą, i “przelanie” całej jego długości na pierwszą składową. Złożoność obliczeniowa tej procedury wynosi $O(N)$.

Faktoryzacja QR

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Niech \mathbf{P}_1 oznacza transformację Householdera zbudowaną na pierwszej kolumnie macierzy \mathbf{A} . Otrzymujemy

$$\mathbf{P}_1 \mathbf{A} = \mathbf{A}_1 \quad (5)$$
$$\mathbf{P}_1 \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Transformacja Householdera \mathbf{P}_1 wyzerowała pierwszą kolumnę macierzy \mathbf{A} , za wyjątkiem elementu diagonalnego. Złożoność obliczeniowa tego kroku wynosi $O(N^2)$ (transformacja Householdera działa na N kolumn).

Niech teraz

$$\mathbf{P}_2 = \left[\begin{array}{c|cccc} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & & & & \\ 0 & & & & \\ 0 & & & & \\ 0 & & & & \end{array} \right] \quad (6)$$

$(N-1)\mathbf{P}_2$

gdzie $(N-1)\mathbf{P}_2 \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$ jest transformacją Householdera, zbudowaną na drugiej kolumnie macierzy \mathbf{A}_1 , poczynając od elementu diagonalnego w dół. Otrzymujemy

$$\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{A} = \mathbf{P}_2\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_2 = \left[\begin{array}{ccccc} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \dots \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \dots \\ & & \bullet & \bullet & \dots \\ & & \bullet & \bullet & \dots \\ & & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \right] \quad (7)$$

Następnie definiuję

$$\mathbf{P}_3 = \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & & & & \end{array} \right] \quad (8)$$

gdzie $(N-2)\mathbf{P}_3 \in \mathbb{R}^{(N-2) \times (N-2)}$ jest transformacją Householdera, zbudowaną na trzeciej kolumnie macierzy \mathbf{A}_2 , poczynając od elementu diagonalnego w dół. Stojąca w lewym górnym rogu macierz jednostkowa służy do tego, żeby nie zepsuć struktury, którą osiągnęliśmy w poprzednich kro-

kach. Otrzymujemy

$$\mathbf{P}_3\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{A} = \mathbf{P}_3\mathbf{A}_2 = \mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & & \bullet & \bullet & \cdots \\ & & & \bullet & \cdots \\ & & & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (9)$$

Widać, że po $N-1$ krokach osiągnę

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \cdots & \bullet \\ & \bullet & \bullet & \cdots & \bullet \\ & & \bullet & \cdots & \bullet \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & \bullet \end{bmatrix} = \underbrace{\mathbf{P}_{N-1}\mathbf{P}_{N-2}\cdots\mathbf{P}_1}_{\mathbf{Q}^T} \mathbf{A} \quad (10)$$

\mathbf{R} jest macierzą trójkątną górną. Ponieważ macierze \mathbf{P}_i są ortogonalne, ich iloczyn, oznaczony przez \mathbf{Q}^T także jest macierzą ortogonalną. Nie

musimy zapamiętywać poszczególnych macierzy P_i , wystarczy zapamiętać ich iloczyn.

Otrzymaliśmy zatem dla dowolnej macierzy kwadratowej *faktoryzację na macierz ortogonalną i trójkątną górną*:

$$A = QR. \quad (11)$$

Złożoność obliczeniowa faktoryzacji QR wynosi dla macierzy pełnych $O(N^3)$, czyli tyle samo, co faktoryzacji LU , jednak współczynnik przy wyrazie wiodącym jest gorszy niż dla LU . QR nie jest więc metodą “z wyboru” rozwiązywania układów równań liniowych. Jeśli jednak z jakichś względów faktoryzację QR możemy łatwo (lub musimy) obliczyć, układ równań linio-

wych rozwiązujemy jak następuje:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (12a)$$

$$\mathbf{QRx} = \mathbf{b} \quad (12b)$$

$$\mathbf{Rx} = \mathbf{Q}^T \mathbf{b} \quad (12c)$$

Koszt obliczeniowy przejścia od (12b) do (12c) wynosi $O(N^2)$. Równanie (12c) rozwiązujemy metodą *backsubstitution*, co także kosztuje $O(N^2)$. Jest to więc koszt mały w porównaniu z dokonaniem samej faktoryzacji.

Obroty Givensa

Transformacja Householdera służy do zerowania wielu składowych jakiegoś wektora. Jeżeli chcemy selektywnie wyzerować jakieś składowe — lub jeśli interesujący nas wektor ma jakąś szczególną postać — bardziej efektywne od transformacji Householdera będą *obroty Givensa*.

Niech x będzie pewnym wektorem i niech $y = G(i, j)x$. Składowe wektora y wynoszą

$$y_k = \begin{cases} cx_i + sx_j & k = i \\ -sx_i + cx_j & k = j \\ x_k & \text{poza tym} \end{cases} \quad (14)$$

Zażądajmy, aby $y_j = 0$. Widać, że musi zachodzić

$$c = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, \quad s = \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}. \quad (15)$$

Obrót Givensa (13) wraz z warunkami (15) zeruje j -tą składową wybranego wektora. Składowa i -ta przybiera wartość $\sqrt{x_i^2 + x_j^2}$.

Faktoryzacja QR macierzy trójdzielnej symetrycznej

Rozpatrzmy macierz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, trójdzielną symetryczną

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a & b & & & & \\ b & d & e & & & \\ & e & f & g & & \\ & & g & h & l & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \quad (16)$$

Zadziałajmy na nią macierzą Givensa taką, aby zerowała drugi element pierwszej kolumny

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} c_1 & s_1 & & & & \\ -s_1 & c_1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \end{bmatrix} \quad (17)$$

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{G}_1 \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \sqrt{a^2 + b^2} & \frac{ab+bd}{\sqrt{a^2+b^2}} & \frac{be}{\sqrt{a^2+b^2}} & & & & \\ & \frac{ad-b^2}{\sqrt{a^2+b^2}} & \frac{ae}{\sqrt{a^2+b^2}} & & & & \\ & e & f & g & & & \\ & & g & h & l & & \\ & & & \dots & \dots & \dots & \end{bmatrix} \quad (18)$$

Wiersze macierzy \mathbf{A}_1 począwszy od trzeciego w dół zgadzają się z wierszami macierzy \mathbf{A} . Obliczenie macierzy \mathbf{A}_1 wymaga wykonania stałej, *niezależnej od rozmiaru macierzy*, liczby operacji. W wyniku otrzymaliśmy macierz, w której poddiagonalne elementy pierwszej kolumny są zerami.

Macierz A_1 mnożymy przez macierz Givensa

$$G_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & c_2 & s_2 & & & \\ & -s_2 & c_2 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (19)$$

dobraną tak, aby zerowała trzeci element drugiej kolumny macierzy A_1 . Pierwszy wiersz i pierwsza kolumna nie zmieniają się, podobnie jak wiersze począwszy od czwartego. W rezultacie macierz $A_2 = G_2 A_1 = G_2 G_1 A$ ma zera w poddiagonalnych miejscach dwu pierwszych kolumn. Ten krok także wymaga stałej, niezależnej od rozmiaru macierzy, liczby operacji.

W kolejnym kroku macierz A_2 mnożymy przez taką macierz Givensa, która wyzeruje czwarty element trzeciej kolumny. I tak dalej.

W ten sposób, po $N-1$ krokach, ponosząc koszt numeryczny $O(N)$ (stały koszt na krok, $\sim N$ kroków), otrzymujemy

$$\mathbf{G}_{N-1} \cdots \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{A} = \mathbf{R} = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & & & & \\ & \bullet & \bullet & \bullet & & & \\ & & \bullet & \bullet & \bullet & & \\ & & & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & & & \bullet & \bullet & \\ & & & & & \bullet & \bullet \\ & & & & & & \bullet \end{bmatrix}, \quad (20a)$$

czyli

$$\mathbf{A} = \underbrace{\mathbf{G}_1^T \mathbf{G}_2^T \cdots \mathbf{G}_{N-1}^T}_{\mathbf{Q}} \mathbf{R} \quad (20b)$$

Macierz \mathbf{Q} jest ortogonalna. Macierz \mathbf{R} jest trójkątna górna (tak naprawdę ma ona tylko dwie niezerowe diagonale nad diagonalą główną). Widzimy, że (20b) jest faktoryzacją QR macierzy trójdzielnej symetrycznej.

Zastosowanie do rozwiązywania układu równan liniowych

Jeżeli chcemy użyć obrotów Givensa do rozwiązania układu równań liniowych

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (21)$$

gdzie \mathbf{A} jest trójdziagonalną macierzą symetryczną, postępując jak poprzednio otrzymujemy kolejno

$$\mathbf{G}_1 \mathbf{Ax} = \mathbf{G}_1 \mathbf{b} \quad (22a)$$

$$\mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{Ax} = \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{b} \quad (22b)$$

...

$$\mathbf{G}_{N-1} \cdots \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{Ax} \equiv \mathbf{Rx} = \mathbf{G}_{N-1} \cdots \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{b}. \quad (22c)$$

Oczywiście istotne jest tylko równanie (22c) — lewych stron poprzednich równań nie musimy wyliczać. Każde kolejne mnożenie po stronie prawej

wykonujemy w stałym czasie, a więc do postaci $\mathbf{R}\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{b}}$ dochodzimy w czasie $O(N)$. To równanie rozwiązujemy metodą *backsubstitution*, co, z uwagi na szczególną postać macierzy \mathbf{R} , także da się wykonać w czasie liniowym.

Przykład ten pokazuje, że możemy odnieść duży zysk na złożoności obliczeniowej, jeśli tylko dobierzemy odpowiedni algorytm odpowiadający strukturze — w tym wypadku rzadkości i symetryczności — macierzy.

Uwaga: Skumulowanej macierzy Givensa \mathbf{Q} nie musimy wyliczać w sposób jawny — gdybyśmy to chcieli zrobić, wymagałoby to $O(N^2)$ operacji.

Wzór Shermana-Morrisona

Twierdzenie: Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $\det \mathbf{A} \neq 0$ oraz $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^N$. Niech $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T$. Wówczas

$$\mathbf{A}_1^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}}. \quad (23)$$

Zauważmy, że ponieważ $\det \mathbf{A} \neq 0$, macierz \mathbf{A}^{-1} istnieje. Ponadto wyrażenie $\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}$ jest *liczbą* (skalarem).

Przykład

Niech $\mathbf{u} = \mathbf{v} = [1, 0, 0, 0, 1]^T$. Wówczas

$$\mathbf{uv}^T = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (24)$$

Niech teraz

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_1 = \mathbf{A} + \mathbf{uv}^T = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}. \quad (25)$$

Dowód.

$$\begin{aligned} & (\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T) \left(\mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \right) \\ &= \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} - \frac{1}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} \\ & \quad - \frac{1}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \mathbf{u} \underbrace{\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}}_{\text{to jest liczba!}} \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} \\ &= \mathbb{I} - \frac{1}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} \\ &= \mathbb{I} + \left(1 - \frac{1}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} - \frac{\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \right) \mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} = \mathbb{I}. \quad (26) \end{aligned}$$

□

Algorytm Shermana-Morrisona

Wzór Shermana-Morrisona (23) pozwala zkonstruować odwrotność macierzy A_1 jeśli znamy odwrotność A . Jednak w praktyce prawie **nigdy nie konstruujemy jawnej odwrotności macierzy!** Jak więc zastosować ten wzór?

Zauważmy, że **zapewne** chcemy obliczyć jakieś $A_1^{-1}b$, gdzie b jest znanym wektorem, przy założeniu, że **łatwo** potrafimy obliczyć $A^{-1}b$. Interesuje nas znalezienie

$$w = A_1^{-1}b = \left(A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1}u} \right) b \quad (27)$$

Algorytm wygląda następująco:

(a) Rozwiąż równanie

$$\mathbf{Az} = \mathbf{b} \quad (28a)$$

(b) Rozwiąż równanie

$$\mathbf{Aq} = \mathbf{u} \quad (28b)$$

(c) Oblicz

$$\mathbf{w} = \mathbf{z} - \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{z}}{1 + \mathbf{v}^T \mathbf{q}} \mathbf{q}. \quad (28c)$$

Problem sprowadza się więc do rozwiązania dwu równań (28a),(28b) z taką samą macierzą, które umiemy szybko rozwiązać, gdyż — na przykład — znamy faktoryzację macierzy \mathbf{A} . Zauważmy, że $\mathbf{v}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} = \mathbf{v}^T \mathbf{z}$ jest *liczbą*.

Przykład (c.d.)

Pierwsza z macierzy (25) jest macierzą symetryczną, dodatnio określoną i trójdziagonalną, a więc jej czynnik Cholesky'ego ma tylko dwie niezerowe diagonale, a koszt jego wyliczenia jest rzędu $O(N)$. Czynnik Cholesky'ego drugiej z tych macierzy jest pełną macierzą trójkątną (nastąpi *wypełnienie*) i koszt jego wyliczenia jest rzędu $O(N^3)$ (wyobraźmy sobie, że zamiast o macierzach 5×5 , mówimy o macierzach 1000×1000). Zastosowanie algorytmu (28) redukuje problem do znalezienia i dwukrotnego zastosowania rzadkiego czynnika Cholesky'ego pierwszej z macierzy (25). Da się to zrobić w czasie liniowym.

Osobliwe układy równań

Dany jest układ równań

$$\begin{bmatrix} \frac{7}{6} & -\frac{1}{3} & -\frac{5}{6} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{5}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{7}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (29)$$

Jak łatwo sprawdzić, wyznacznik główny tego układu równań wynosi zero, a więc układ równań (29) nie ma jednoznacznego rozwiązania. Ale może ma on rozwiązanie niejednoznaczne? Aby tak było, wszystkie jego wyznaczniki poboczne powinny zniknąć. Sprawdzamy:

$$\det \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{3} & -\frac{5}{6} \\ 1 & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ 1 & -\frac{1}{3} & \frac{7}{6} \end{bmatrix} = 2 \neq 0, \quad (30)$$

a więc układ równań (29) jest sprzeczny (nie ma rozwiązań). Z drugiej strony układ równań

$$\begin{bmatrix} \frac{7}{6} & -\frac{1}{3} & -\frac{5}{6} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{5}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{7}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (31)$$

ma rozwiązanie, ale jest ono niejednoznaczne (wszystkie wyznaczniki pomocnicze równają się zero).

Układy równań (29) i (31) różnią się tylko prawymi stronami: ich macierz jest taka sama (i jest osobliwa). Widzimy, że w przypadku osobliwej macierzy układu równań to prawa strona decyduje, czy układ ma rozwiązania, czy też ich nie ma; *domyślamy się*, że to, jakie prawe strony oznaczają istnienie rozwiązań, jakie zaś ich brak, musi jakoś być związane z własnościami (osobliwej) macierzy układu równań. *Wygodnie byłoby mieć metodę pozwalającą na zidentyfikowanie wektorów, dla których osobliwy układ równań ma rozwiązania* (wzory Cramera pozwalają jedynie *sprawdzić*, czy dana prawa strona prowadzi do istnienia rozwiązań). *Metodą taką jest SVD.*

Singular Value Decomposition

Twierdzenie 1. *Dla każdej macierzy $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$, $M \geq N$, istnieje faktoryzacja*

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} [\text{diag}(w_i)] \mathbf{V}^T, \quad (32)$$

gdzie $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ jest macierzą kolumnowo ortogonalną, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ jest macierzą ortogonalną oraz $w_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, N$. Rozkład ten nazywamy rozkładem względem wartości osobliwych (Singular Value Decomposition, SVD). Jeżeli $M = N$, macierz \mathbf{U} jest macierzą ortogonalną.

Nie przedstawiamy tu algorytmu tej faktoryzacji — w razie potrzeby można skorzystać z którejś ze sprawdzonych procedur bibliotecznych.

Złożoność obliczeniowa faktoryzacji *SVD* wynosi $O(N^3)$, ale współczynnik przy wyrazie wiodącym jest wysoki, więc nie jest to metoda “z wyboru” do rozwiązywania układów równań. Znajduje ona jednak ważne zastosowania w przypadku osobliwych lub źle uwarunkowanych układów równań. Aby to zrozumieć, trzeba najpierw omówić algebraiczne własności tej faktoryzacji.

Jądro i zasięg operatora

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$. *Jądrem operatora \mathbf{A}* nazywam

$$\text{Ker } \mathbf{A} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}\}. \quad (33)$$

Zasięgiem operatora \mathbf{A} nazywam

$$\text{Range } \mathbf{A} = \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^M : \exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}\}. \quad (34)$$

Jądro i zasięg operatora są przestrzeniami liniowymi. Jeśli $M = N < \infty$,
 $\dim(\text{Ker } \mathbf{A}) + \dim(\text{Range } \mathbf{A}) = N$.

Sens SVD

Sens *SVD* najlepiej widać w przypadku, w którym co najmniej jedna z wartości $w_i = 0$. Aby to zrozumieć, zobaczmy jak macierz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$, posiadająca faktoryzację (32), działa na pewien wektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{U} [\text{diag}(w_i)] \mathbf{V}^T \mathbf{x} \quad (35)$$

Dla ustalenia uwagi, niech $w_1 = 0$, $w_{i>1} \neq 0$.

Przypomnienie z algebry ☹

Macierz $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ jest macierzą *ortogonalną*, co oznacza, że jej kolejne kolumny stanowią ortonormalną bazę w \mathbb{R}^N . Wektor

$$\mathbf{z} = \mathbf{V}^T \mathbf{x} \quad (36)$$

stanowi rozkład wektora \mathbf{x} w bazie kolumn macierzy \mathbf{V} . Wyrażenie (35) możemy przepisać jako

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{U} [\text{diag}(w_i)] \mathbf{z}, \quad (37)$$

gdzie \mathbf{z} spełnia (36).

Sens SVD — przypadek 1

Przypuśćmy, że wektor \mathbf{x} jest równy pierwszej kolumnie macierzy \mathbf{V} . Wówczas $\mathbf{z} = [1, 0, 0, \dots, 0]^T$, gdyż \mathbf{x} jest prostopadły do wszystkich kolumn \mathbf{V} poczynając od drugiej. W takim wypadku

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} 0 & & & & & \\ & w_2 & & & & \\ & & w_3 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & w_N & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (38)$$

Zero z lewego górnego rogu macierzy diagonalnej zabije jedynkę w wektorze po prawej stronie tej równości, a z kolei zera z tego wektora zabiją niezerowe w_i . Ostatecznie $\mathbf{Ax} = \vec{0}$. Stało się tak dlatego, że wektor \mathbf{x} był równy kolumnie macierzy \mathbf{V} , odpowiadającej zerowemu współczynnikowi w_i . *Kolumny macierzy \mathbf{V} , odpowiadające zerowym współczynnikom w_i , stanowią bazę w jądrze operatora \mathbf{A} .*

Sens SVD — przypadek 2

Niech teraz wektor \mathbf{x} będzie “dowolny”, to znaczy nie pozostaje w jakiejś specjalnej relacji do macierzy \mathbf{V} . Wówczas $\mathbf{z} = \mathbf{V}^T \mathbf{x} = [z_1, z_2, z_3, \dots, z_N]^T$, a zatem z (37) mamy

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} 0 & & & & & \\ & w_2 & & & & \\ & & w_3 & & & \\ & & & \dots & & \\ & & & & w_N & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_N \end{bmatrix} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} 0 \\ w_2 z_2 \\ w_3 z_3 \\ \vdots \\ w_N z_N \end{bmatrix}. \quad (39)$$

Wynikiem ostatniego mnożenia będzie pewien wektor z przestrzeni \mathbb{R}^M . Ponieważ pierwszym elementem wektora $[0, w_2 z_2, \dots, w_N z_N]^T$ jest zero, **wynik ten nie zależy od pierwszej kolumny macierzy \mathbf{U}** . Kolumny macierzy \mathbf{U} są wzajemnie ortogonalne, a wektor \mathbf{Ax} nie zawiera przyczynku wzdłuż wektora będącego pierwszą kolumną \mathbf{U} , a jedynie przyczynki od wektorów

prostopadłych do tej kolumny. Widzimy zatem, że *kolumny macierzy U , odpowiadające niezerowym współczynnikom w_i , stanowią bazę w zasięgu operatora A .*

Dla macierzy osobliwych sens SVD sprowadza się do konstrukcji baz w jądrze i w zasięgu takiej macierzy. Jak za chwilę zobaczymy, można to uogólnić na przypadek macierzy nieosobliwych, ale bardzo źle uwarunkowanych.

Przykład

Macierz układów równań (29) i (31) ma następujący rozkład względem wartości osobliwych:

$$\begin{bmatrix} \frac{7}{6} & -\frac{1}{3} & -\frac{5}{6} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{5}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{7}{6} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}. \quad (40)$$

Widzimy, że wektor $[1, 1, 1]^T$ rozpina jądro tej macierzy, natomiast kombinacje liniowe wektorów $[-1, 2, -1]^T$, $[-1, 0, 1]^T$ stanowią jej zasięg.

Ponieważ rozważana macierz jest symetryczna i rzeczywista (i nieujemnie określona), jej rozkład *SVD* jest zarazem jej rozkładem diagonalnym (w przypadku ogólnym taka zgodność nie zachodzi).

SVD i odwrotność macierzy

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$. Zauważmy, że $|\det \mathbf{A}| = \prod_{i=1}^N w_i$, a zatem $\det \mathbf{A} = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy co najmniej jeden $w_i = 0$. Niech $\det \mathbf{A} \neq 0$. Wówczas równanie $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ ma rozwiązanie postaci

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{V} [\text{diag}(w_i^{-1})] \mathbf{U}^T \mathbf{b}. \quad (41)$$

Niech teraz $\det \mathbf{A} = 0$. Równanie $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ *także* ma rozwiązanie, o ile tylko $\mathbf{b} \in \text{Range } \mathbf{A}$. Rozwiązanie to ma postać $\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{A}}^{-1}\mathbf{b}$, gdzie

$$\tilde{\mathbf{A}}^{-1} = \mathbf{V} [\text{diag}(\tilde{w}_i^{-1})] \mathbf{U}^T. \quad (42a)$$

gdzie

$$\tilde{w}_i^{-1} = \begin{cases} w_i^{-1} & \text{gdy } w_i \neq 0, \\ 0 & \text{gdy } w_i = 0. \end{cases} \quad (42b)$$

SVD i macierze osobliwe

Wróćmy jeszcze raz do problemu osobliwych (z zerowym wyznacznikiem głównym) układów równań, wspomnianego już na stronie 38. Jeżeli $\det \mathbf{A} = 0$, układ równań z całą pewnością nie ma *jednoznacznego* rozwiązania. Może jednak mieć rozwiązanie (a nawet nieskończenie wiele rozwiązań), jeżeli prawa strona *należy do zasięgu* \mathbf{A} . Jest to równoważne warunkowi, że wszystkie wyznaczniki poboczne we wzorach Cramera zerują się. Wówczas **rozwiązaniem** układu równań jest każdy wektor postaci

$$\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{b} + \mathbf{x}_0, \quad (43)$$

gdzie $\tilde{\mathbf{A}}^{-1}$ jest pseudoodwrotnością daną przez (42), zaś $\mathbf{x}_0 \in \text{Ker} \mathbf{A}$ jest dowolnym wektorem należącym do jądra. Rozwiązanie z $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$ ma spośród nich najmniejszą normę. Zauważmy, że na wektory należące do zasięgu, pseudoodwrotność działa jak zwykła odwrotność macierzy.

Jeżeli b *nie* należy do zasięgu, wyrażenie (43) z $x_0 = 0$ daje rozwiązanie przybliżone i najlepsze w sensie najmniejszych kwadratów, co niekiedy jest bardzo użyteczne.

Przykład

Zastosowanie pseudoodwrotności (42) do układu (31) daje

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (44)$$

W tym wypadku pseudoodwrotność zachowuje się jak odwrotność (prawa strona równania (31) należy do zasięgu) i rozwiązanie (44) jest ścisłe.

Do rozwiązania (44) można dodać dowolny wektor postaci $[\alpha, \alpha, \alpha]$, a więc należący do jądra.

SVD i współczynnik uwarunkowania

Twierdzenie 2. Jeżeli macierz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ posiada rozkład (32) oraz $\det \mathbf{A} \neq 0$, jej współczynnik uwarunkowania spełnia

$$\kappa = \frac{\max_i |w_i|}{\min_i |w_i|}. \quad (45)$$

Jeśli macierz jest źle uwarunkowana, ale *formalnie* odwracalna, numeryczne rozwiązanie równania $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ może być zdominowane przez wzmocniony błąd zaokrąglenia. Aby tego uniknąć, często zamiast (bezużytecznego!) rozwiązania dokładnego (41), używa się *przybliżonego* (i użytecznego!) rozwiązania w postaci (42) z następującą modyfikacją

$$\tilde{w}_i^{-1} = \begin{cases} w_i^{-1} & \text{gdy } |w_i| > \tau, \\ 0 & \text{gdy } |w_i| \leq \tau, \end{cases} \quad (46)$$

gdzie τ jest pewną zadaną tolerancją.

Przykład

Mamy rozwiązać następujące dwa układy równań:

$$\begin{bmatrix} 0.666666667 & -0.166666666 & -0.333333333 \\ -0.166666666 & 0.166666667 & -0.166666666 \\ -0.333333333 & -0.166666666 & 0.666666667 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.284457048 \\ -0.577350273 \\ -0.129756514 \end{bmatrix} \quad (47a)$$

$$\begin{bmatrix} 0.666666667 & -0.166666666 & -0.333333333 \\ -0.166666666 & 0.166666667 & -0.166666666 \\ -0.333333333 & -0.166666666 & 0.666666667 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.284457052 \\ -0.577350265 \\ -0.129756510 \end{bmatrix} \quad (47b)$$

Równania te różnią się tylko prawymi stronami, przy czym norma różnicy prawych stron jest rzędu 10^{-8} . Błąd takich rozmiarów łatwo może pojawić się w wyniku jakichś poprzednich obliczeń lub na skutek niepewności danych “zewnętrznych”, z którymi pracujemy.

Macierz w układach równań (47) jest symetryczna i dodatnio określona, a jej czynnik Cholesky’ego wynosi

$$\begin{bmatrix} 0.816496581 & & \\ -0.204124145 & 0.353553392 & \\ -0.408248290 & -0.707106777 & 0.000077460 \end{bmatrix} \quad (48)$$

Rozwiązania równań (47) za pomocą faktoryzacji Cholesky'ego mają postać

$$\mathbf{x}_a = \begin{bmatrix} -0.179434106 \\ -5.237183389 \\ -1.593647668 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_b = \begin{bmatrix} 3.903048668 \\ 2.927782158 \\ 2.488835105 \end{bmatrix}. \quad (49)$$

Różnica rozwiązań jest, co do normy, rzędu 10, czyli jest rzędu 10^9 razy większa, niż różnica prawych stron.

Faktoryzacja *SVD* macierzy z układów (47) pokazuje, że wartości szczególne tej macierzy są w przybliżeniu równe $1, \frac{1}{2}, 10^{-9}$. Jeśli do rozwiązania układów równań (47) zastosować pseudoodwrotność (46) ($\tau = 10^{-8}$), w obu wypadkach otrzymamy

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1.861807320 \\ -1.154700538 \\ 0.447593757 \end{bmatrix}. \quad (50)$$

(50) jest jedynie *przybliżonym* rozwiązaniem równań (47). Jest ono jednak bardziej użyteczne, niż “ściśle” rozwiązania (49). Te dwa ostatnie najwyraźniej są zdominowane przez błąd, jaki wystąpił wzdłuż kierunku odpowiadającego najmniejszej wartości szczególnej macierzy. Nie wiemy — i nie mamy sposobu, aby to stwierdzić — które z dwu rozwiązań (49) jest “poprawne”. Przybliżone rozwiązanie (50) po prostu ignoruje wpływ tego kierunku, a więc i zaburzeń wzdłuż niego występujących.

Nadokreślone układy równań

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$, $M > N$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^M$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$. Wówczas układ równań

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (51)$$

ma więcej równań, niż niewiadomych. Układ taki, zwany nadokreślonym, w ogólności nie ma rozwiązań. Za pomocą SVD można jednak znaleźć jego rozwiązanie przybliżone. Mianowicie

$$\|\mathbf{A} (\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{b}) - \mathbf{b}\|_2 = \text{minimum}, \quad (52)$$

gdzie $\tilde{\mathbf{A}}^{-1}$ jest pseudoodwrotnością (42). Widzimy, że $\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{b}$ jest przybliżonym, najlepszym w sensie najmniejszych kwadratów rozwiązaniem układu (51). Metoda ta jest *powszechnie* używana w liniowym zagadnieniu najmniejszych kwadratów.