Kako se lotiš: Numerična linearna algebra

Patrik Žnidaršič

Prevedeno 28. junij 2024

1 Singularni razcep

Za matriko $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ ranga r, kjer je $m \geq n$, obstaja singularni razcep $A = U\Sigma V^T$, kjer sta $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$ in $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ortogonalni, $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ pa je diagonalna matrika singularnih vrednosti, torej lastnih vrednosti $A^H A$. Če razdelimo

$$A = \begin{bmatrix} U_1 & U_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} V_1 & V_2 \end{bmatrix}^T, = U_1 \Sigma_r V_1^T$$

kjer imata U_1 in V_1 r stolpcev, potem stolpci U_1 tvorijo bazo slike $\operatorname{im} A$, stolpci V_2 pa bazo jedra $\ker A$. Stolpci V so desni lastni vektorji $A^H A$.

Singularni razcep lahko uporabimo za računanje PSEVDOINVERZA. Ta je definiran kot taka matrika $A^+ \in \mathbb{C}^{n\times n}$, za katero velja $AA^+A = A$, $A^+AA^+ = A^+$, $(AA^+)^H = AA^+$ ter $(A^+A)^H = A^+A$. Če poznamo singularni razcep A, potem je $A^+ = U\Sigma^+U^H$ za

$$\Sigma^+ = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \frac{1}{\sigma_n} & & & \\ & & & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \end{bmatrix}.$$

Psevdoinverz matrike ranga 1 $C = ab^T$ za vektorja $a \in \mathbb{R}^m, b \in \mathbb{R}^n$, je oblike $C^+ = ba^T/(\|a\|_2^2 \|b\|_2^2)$. Podobno, če lahko razcepimo $C = AB^T$ za matriki polnega ranga A in B, dobimo $C^+ = B(B^TB)^{-1}(A^TA)^{-1}A^T$.

Psevdoinverz je uporaben za reševanje nedoločenih sistemov. Če je $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ ranga r, potem je matrika, ki minimizira $\|XA - I_n\|_F$, in ima od vseh takih najmanjšo normo $\|X\|_F$, ravno $X = A^+$.

1.1 Totalni najmanjši kvadrati

Če imamo dan predoločen sistem $Ax = b$, običajno iščemo minimum $\|Ax - b\|_2$. Dejansko s tem rešujemo $Ax = r + b$, kjer je $\|r\|_2$ čim manjši. Pri totalnih najmanjših kvadratih namesto tega iščemo popravek tudi v A, torej taki $\tilde{A}, \tilde{b}$, da je $\tilde{b} \in \operatorname{im} \tilde{A}$ in norma $\left\| [\tilde{A}, \tilde{b}] - [A, b] \right\|_F$ čim manjša.

V dobro postavljenem problemu bo $b \notin \operatorname{im} A$ ter $\operatorname{rang}[\tilde{A}, \tilde{b}] = n$, tako da je $[\tilde{A}, \tilde{b}]$ ravno matrika ranga n, ki najbolje aproksimira $[A, b]$. Če naredimo singularni razcep $[A, b]$, potem bo naša rešitev $[\tilde{A}, \tilde{b}] = \sum_{i \leq n} \sigma_i u_i v_i^T = [A, b] - \sigma_{n+1} u_{n+1} v_{n+1}^T$. Rešitev sistema $\tilde{x}$ je tedaj enak vektorju v_{n+1}, skaliranemu tako, da ima na zadnjem mestu -1.

2 Občutljivost lastnih vrednosti

Če je λ_i enostavna lastna vrednost A, s pripadajočima desnim in levim lastnim vektorjem x_i, y_i, potem je OBČUTLJIVOST λ_i definirana kot

$$\frac{1}{s_i} = \frac{\|y_i\|_2 \|x_i\|_2}{y_i^H x_i}.$$

Za ocenjevanje lastnih vrednosti imamo na voljo Grešgorinova izreka. Prvi pravi, da lastne vrednosti A ležijo v uniji krogov

$$K_i = \{z \in \mathbb{C} \mid |z - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|\}.$$

Če ta unija razpade na več povezanih komponent, je v vsaki komponenti toliko lastnih vrednosti, kolikor krogov jo sestavlja. Pri ocenjevanju si lahko pomagaš s podobnostno transformacijo XAX^{-1}. Klasičen tip naloge je, da imaš dan nek razred možnih X, ti pa iščeš vrednost parametra, kjer dobiš čim bolj natančno oceno za eno od lastnih vrednosti. Pri tem moraš le poskrbeti, da se ta krog ne bo dotaknil ostalih.

3 Simetrični problem lastnih vrednosti

Najenostavnejša metoda za računanje lastnih vrednosti je potenčna metoda. Ta izračuna le največjo lastno vrednost, potem pa lahko z uporabo HOTELLINGOVE REDUKCIJE poiščeš še naslednje; redukcija poteka tako, da izračunaš $B = A - \lambda_1 \frac{x_1 y_1^T}{y_1^T x_1}$, in nato nadaljuješ s potenčno metodo na B. Pri tem sta x_i, y_i desni in levi lastni vektor za λ_i. V primeru simetrične A sta enaka.

Za simetrične matrike je možna tudi Householderjeva redukcija, kjer poiščeš zrcaljenje P, za katerega je

$$A = P \begin{bmatrix} \lambda_1 & u^T \\ 0 & B \end{bmatrix} P^T.$$

Potem poiščeš lastne pare B. Če je x lastni vektor za λ za matriko B, potem dobiš lastni vektor matrike A kot (y, x) za $y = \frac{u^T x}{\lambda - \lambda_1}$.

3.1 Rayleighova iteracija

Rayleighova iteracija je le poseben primer inverzne iteracije, kjer si v vsakem koraku izberemo premik $\rho_k = \rho(z_k, A)$, rešimo $(A - \rho_k I)y_{k+1} = z_k$, in nato posodobimo $z_{k+1} = \frac{y_{k+1}}{\|y_{k+1}\|}$.

3.2 QR iteracija

Dano imamo tridiagonalno matriko T. V vsakem koraku izberemo premik σ_k ter izračunamo QR razcep $T_k - \sigma_k I = Q_k R_k$. Potem je $T_{k+1} = R_k Q_k + \sigma_k I$.

Običajno vzamemo Rayleighov premik, $\sigma_k = \rho(e_n, T_k) = [T_k]_{nn}$. QR iteracija je ekvivalentna Rayleighovi iteraciji za začetni približek $z_0 = e_n$.

3.3 Deli in vladaj

Algoritem deli in vladaj je rekurziven. Simetrično tridiagonalno matriko T prvo razdelimo na

$$T = \begin{bmatrix} T_1 & \\ & T_2 \end{bmatrix} + b_m v v^T,$$

kjer je $v = e_m + e_{m+1}$. Potem problem rekurzivno rešimo za matriki T_1 in T_2, da dobimo $T_1 = Q_1 \Lambda_1 Q_1^T$ in $T_2 = Q_2 \Lambda_2 Q_2^T$. Za tem izračunamo lastne pare matrike

$$\begin{bmatrix} \Lambda_1 & \\ & \Lambda_2 \end{bmatrix} + b_m u u^T = \tilde{Q} \Lambda \tilde{Q}^T$$

za

$$u = \begin{bmatrix} Q_1 & \\ & Q_2 \end{bmatrix} v.$$

Na koncu vrnemo Λ in

$$Q = \begin{bmatrix} Q_1 & \\ & Q_2 \end{bmatrix} \tilde{Q}.$$

Eden od korakov v postopku je izračun lastnih vrednosti matrike $D + \rho u u^T$, kjer je D diagonalna in u vektor. Pri tem velja naslednje:

- Če je $u_i = 0$ je d_i lastna vrednost in e_i lastni vektor.
- Če je $u_i = u_{i+1}$, je d_i lastna vrednost za $u_i e_{i+1} + u_{i+1} e_i$.
- Ko odstranimo posebna primera, so lastne vrednosti rešitve sekularne enačbe

  $$f(\lambda) = 1 + \rho \sum_{i=1}^{n} \frac{u_i^2}{d_i - \lambda},$$

  pripadajoč lastni vektor pa je $(D - \lambda I)^{-1} u$.

Namesto uporabe Newtonove metode v algoritmu f aproksimiramo z enostavnejšo racionalno funkcijo. Za to ločimo vsoto na člene, manjše od d_k, in na člene, večje od d_k. Potem aproksimiramo $f(\lambda) \approx 1 + \rho h_1(\lambda) + \rho h_2(\lambda)$, kjer sta

$$h_1(\lambda) = \frac{c_1}{d_k - \lambda} + c_1' \qquad\qquad h_2(\lambda) = \frac{c_2}{d_{k+1} - \lambda} + c_2'$$

določeni tako, da se ujemata s pripadajočo vsoto in njenim odvodom v točki x_r. Potem sta ničli $h = 1 + \rho h_1 + \rho h_2$ taki, da je le ena v intervalu (d_{k+1}, d_k); to vzamemo za naslednji približek.

3.4 Bisekcija

Pri metodi bisekcije uporabimo LDL razcep, $T - \lambda I = LDL^T$, kjer je L bidiagonalna, na diagonali ima enice, ostali elementi so na prvi poddiagonali. Matrika D je diagonalna. Izkaže se, da je inercija, tj. število pozitivnih in negativnih lastnih vrednosti, enaka za $T - \lambda I$ in D; v koraku bisekcije preštejemo število pozitivnih in negativnih diagonalnih elementov D (ki jih izračunamo po enostavnem postopku, $d_1 = a_1 - \lambda$ in $d_r = a_r - \lambda - b_{r-1}^2/d_{r-1}$), ter glede na to število odločamo, če smo lastno vrednost preskočili ali ne. Če kje dobimo $d_i = -\infty$, to ni težava; v parih $(0, -\infty)$ se pojavi natanko ena pozitivna in natanko ena negativna lastna vrednost, in ju štejemo tako.

4 Posplošeni problem lastnih vrednosti

Posplošeni problem lastnih vrednosti je oblike $Ax = \lambda Bx$. Pri tem lahko izračunamo matriko $C = AB^{-1}$ in poiščemo njene lastne vrednosti; zaradi izgube simetrije pa to ni dobra ideja. Raje uporabimo razcep Choleskega, $B = VV^T$ (če je B spd.), in rešimo $V^{-1}AV^{-T}y = \lambda y$ za $y = V^T x$.

Druga možnost je posplošena Rayleighova iteracija, kjer v vsakem koraku izračunamo posplošeni Rayleighov kvocient $\rho(z_k, A, B) = \frac{z_k^T A z_k}{z_k^T B z_k}$, nato rešimo $(A - \rho_k B)y_{k+1} = Bz_k$ in nastavimo $z_{k+1} = \frac{y_{k+1}}{\|y_{k+1}\|}$.

Imamo tudi hujše posplošitve, recimo polinomski problem lastnih vrednosti, kjer rešujemo $P(\lambda)x = 0$ za $P(\lambda) = A_0 + \lambda A_1 + \cdots + \lambda^n A_n$.