

Wstęp do metod numerycznych

Faktoryzacja SVD

Metody iteracyjne

P. F. Góra

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

2013

Singular Value Decomposition

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

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} [\text{diag}(w_i)] \mathbf{V}^T, \quad (1)$$

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.

Jądro i zasięg operatora

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

$$\text{Ker } \mathbf{A} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}\} . \quad (2)$$

Zasięgiem operatora \mathbf{A} nazywam

$$\text{Range } \mathbf{A} = \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^M : \exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}\} . \quad (3)$$

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

Po pierwsze, co to jest $\mathbf{z} = [z_1, z_2, \dots, z_N]^T = \mathbf{V}^T \mathbf{x}$? Ponieważ \mathbf{V} jest macierzą ortogonalną, \mathbf{z} jest rozkładem wektora \mathbf{x} w bazie kolumn macierzy \mathbf{V} . Korzystając z (1), dostajemy

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{U} [\text{diag}(w_i)] \mathbf{V}^T \mathbf{x} = \mathbf{U} [\text{diag}(0, w_2, \dots, w_N)] \mathbf{z} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} 0 \\ w_2 z_2 \\ \vdots \\ w_N z_N \end{bmatrix}. \quad (4)$$

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}** . Widzimy zatem, że **kolumny macierzy \mathbf{U} , odpowiadające niezerowym współczynnikom w_i , stanowią bazę w zasięgu operatora \mathbf{A}** .

Co by zaś się stało, gdyby \mathbf{x} był równoległy do wektora stanowiącego pierwszą kolumnę \mathbf{V} ? Wówczas $\mathbf{z} = 0$, a wobec tego $\mathbf{Ax} = 0$. Ostatecznie więc widzimy, że **kolumny macierzy \mathbf{V} , odpowiadające zerowym współczynnikom w_i , stanowią bazę w jądrze operatora \mathbf{A}** .

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

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{V} [\text{diag}(w_i^{-1})] \mathbf{U}^T \mathbf{b}. \quad (5)$$

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

$$\tilde{\mathbf{A}}^{-1} = \mathbf{V} [\text{diag}(\tilde{w}_i^{-1})] \mathbf{U}^T. \quad (6a)$$

gdzie

$$\tilde{w}_i^{-1} = \begin{cases} w_i^{-1} & \text{gdy } w_i \neq 0, \\ 0 & \text{gdy } w_i = 0. \end{cases} \quad (6b)$$

SVD i macierze osobliwe

Wróćmy jeszcze raz do problemu osobliwych (z zerowym wyznacznikiem głównym) układów równań, wspomnianego już na stronie 5. Jeżeli $\det A = 0$, układ równań z całą pewnością nie ma *jednoznacznego* rozwiązania. Może jednak mieć rozwiązanie (a nawet nieskończenie wiele rozwiązań), jeżeli prawa strona *należy do zasięgu A*. Jest to równoważne warunkowi, że wszystkie wyznaczniki poboczne we wzorach Cramera zerują się. Wówczas **rozwiązaniem** układu równań jest każdy wektor postaci

$$\mathbf{x} = \tilde{A}^{-1}\mathbf{b} + \mathbf{x}_0, \quad (7)$$

gdzie \tilde{A}^{-1} jest pseudoodwrotnością daną przez (6), zaś $\mathbf{x}_0 \in \text{Ker}A$ jest dowolnym wektorem należącym do jądra. Rozwiązanie z $\mathbf{x}_0 = 0$ 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 (7) z $x_0 = 0$ daje rozwiązanie przybliżone i najlepsze w sensie najmniejszych kwadratów, co niekiedy jest bardzo użyteczne.

SVD i współczynnik uwarunkowania

Twierdzenie 2. Jeżeli macierz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ posiada rozkład (1) oraz $\det \mathbf{A} \neq 0$, jej współczynnik uwarunkowania spełnia

$$\kappa = \frac{\max_i |w_i|}{\min_i |w_i|}. \quad (8)$$

Jeśli macierz jest źle uwarunkowana, ale *formalnie* odwracalna, numeryczne rozwiązanie równania $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ może być zdominowane przez wzmożony błąd zaokrąglenia. Aby tego uniknąć, często zamiast (bezużytecznego!) rozwiązania dokładnego (5), używa się *przybliżonego* (i użytecznego!) rozwiązania w postaci (6) z następującą modyfikacją

$$\tilde{w}_i^{-1} = \begin{cases} w_i^{-1} & \text{gdy } |w_i| > \tau, \\ 0 & \text{gdy } |w_i| \leq \tau, \end{cases} \quad (9)$$

gdzie τ jest pewną zadaną tolerancją.

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

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (10)$$

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

$$\|\mathbf{A} (\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{b}) - \mathbf{b}\|_2 = \text{minimum}, \quad (11)$$

gdzie $\tilde{\mathbf{A}}^{-1}$ jest pseudoodwrotnością (6). Widzimy, że $\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{b}$ jest przybliżonym, najlepszym w sensie najmniejszych kwadratów rozwiązaniem układu (10). Metoda ta jest *powszechnie* używana w liniowym zagadnieniu najmniejszych kwadratów.

Metody iteracyjne

W metodach dokładnych otrzymane rozwiązanie jest dokładne z dokładnością do błędów zaokrąglenia, które, dodajmy, dla układów źle uwarunkowanych mogą być *znaczne*.

W metodach iteracyjnych rozwiązanie dokładne otrzymuje się, teoretycznie, w granicy nieskończenie wielu kroków — w praktyce liczymy na to, że po skończonej (i niewielkiej) ilości kroków zbliżymy się do wyniku ścisłego w granicach błędu zaokrąglenia.

Rozpatrzmy układ równań:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \quad (12a)$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \quad (12b)$$

$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \quad (12c)$$

Przepiszmy ten układ w postaci

$$x_1 = (b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3)/a_{11} \quad (13a)$$

$$x_2 = (b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3)/a_{22} \quad (13b)$$

$$x_3 = (b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2)/a_{33} \quad (13c)$$

Gdyby po prawej stronie (13) były “stare” elementy x_j , a po lewej “nowe”, dostalibyśmy metodę iteracyjną

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij}x_j^{(k)} \right) / a_{ii} \quad (14)$$

Górny indeks $x^{(k)}$ oznacza, że jest to przybliżenie w k -tym kroku. Jest to tak zwana **metoda Jacobiego**.

Zauważmy, że w metodzie (14) nie wykorzystuje się najnowszych przybliżeń: Powiedzmy, obliczając $x_2^{(k+1)}$ korzystamy z $x_1^{(k)}$, mimo iż znane jest już wówczas $x_1^{(k+1)}$. **Za to metodę tę łatwo można zrównoleglić.** Sugeruje to następujące ulepszenie:

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij}x_j^{(k)} \right) / a_{ii} \quad (15)$$

Jest to tak zwana **metoda Gaussa-Seidela**.

Jeżeli macierz $A = \{a_{ij}\}$ jest rzadka, obie te metody iteracyjne będą efektywne *tylko i wyłącznie* wówczas, gdy we wzorach (14), (15) uwzględnimy ich strukturę, to jest uniknie redundantnych mnożeń przez zera.

Trochę teorii

Metody Jacobiego i Gaussa-Seidela należą do ogólnej kategorii

$$\mathbf{M}\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{N}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b} \quad (16)$$

gdzie $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$ jest *podziałem (splitting)* macierzy. Dla metody Jacobiego $\mathbf{M} = \mathbf{D}$ (część diagonalna), $\mathbf{N} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})$ (części pod- i ponad-diagonalne, bez przekątnej). Dla metody Gaussa-Seidela $\mathbf{M} = \mathbf{D} + \mathbf{L}$, $\mathbf{N} = -\mathbf{U}$. Rozwiązanie równania $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ jest punktem stałym iteracji (16).

Definicja *Promieniem spektralnym* (diagonalizowalnej) macierzy G nazywam

$$\rho(G) = \max\{|\lambda| : \exists y \neq 0 : Gy = \lambda y\} \quad (17)$$

Twierdzenie 3. *Iteracja (16) jest zbieżna jeśli $\det M \neq 0$ oraz $\rho(M^{-1}N) < 1$.*

Dowód. Przy tych założeniach iteracja (16) jest odwzorowaniem zwężającym. □

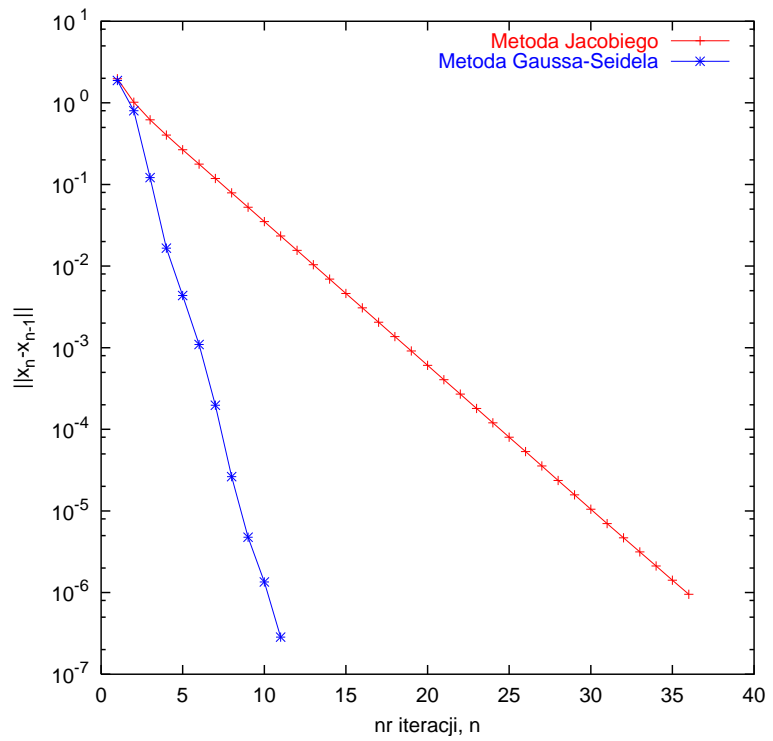
Twierdzenie 4. *Metoda Jacobiego jest zbieżna jeśli macierz A jest silnie diagonalnie dominująca.*

Twierdzenie 5. *Metoda Gaussa-Seidela jest zbieżna jeśli macierz A jest symetryczna i dodatnio określona.*

Przykład

Rozwiązujemy układ równań:

$$\begin{array}{rrcrcl} 3x & + & y & + & z & = & 1 \\ x & + & 3y & + & z & = & 1 \\ x & + & y & + & 3z & = & 1 \end{array}$$



SOR

Jeśli $\rho(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N})$ w metodzie Gaussa-Seidela jest bliskie jedności, zbieżność

metody jest bardzo wolna. Można próbować ją poprawić:

$$x_i^{(k+1)} = w \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^N a_{ij}x_j^{(k)} \right) / a_{ii} + (1-w)x_i^{(k)}, \quad (18)$$

gdzie $w \in \mathbb{R}$ jest *parametrem relaksacji*. Metoda ta zwana jest *successive over-relaxation*, SOR. W postaci macierzowej

$$\mathbf{M}_w \mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{N}_w \mathbf{x}^{(k)} + w\mathbf{b} \quad (19)$$

$\mathbf{M}_w = \mathbf{D} + w\mathbf{L}$, $\mathbf{N}_w = (1-w)\mathbf{D} - w\mathbf{U}$. *Teoretycznie* należy dobrać takie w , aby zminimalizować $\rho(\mathbf{M}_w^{-1}\mathbf{N}_w)$.