Поглавље 7

Матричне факторизације и проблем најмањих квадрата

7.1 Матрична структура и алгоритамска комплексност

Концентрисаћемо се на методе за решавање квадратног система линеарних једначина

$$Ax = b, \tag{7.1}$$

где је $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ и $b \in \mathbb{R}^n$. Матрицу A зовемо матрицом коефицијената система линеарних једначина (7.1), а b вектор слободних чланова. Под претпоставком да је матрица A регуларна, следи да је решење система линеарних једначина (7.1) јединствено за било које вредности вектора b и дато је са

$$x = A^{-1}b.$$

Овакав базични проблем настаје у многим оптимизационим алгоритмима и често се јавља у већини израчунавања.

Стандардна метода за решавање квадратних система линеарних једначина $Ax = b$ захтева напор израчунљивости (енг. "computational effort") који расте апроксимативно као n^3. Ове методе не претпостављају ништа више од регуларности матрице A, према томе, генерално су применљиве.

Када је n величине:

- до неколико стотина или мање, ове генеричке методе су вероватно најбоље методе за коришћење, осим у захтевним апликацијама које раде у реалном времену (енг. "real-time applications");
- веће од хиљаду, генеричке методе за решавање квадратних система линеарних једначина $Ax = b$ постају мање практичне.

Структура матрице коефицијената   У многим случајевима матрица коефицијената A има посебну структуру или облик, који може бити искоришћен да се систем линеарних једначина

$Ax = b$ реши ефикасније, користећи методе које су прилагођене посебним структурама матрице A. На пример, у Њутновом систему

$$(\nabla^2 f)(x)\Delta_{x_{nt}} = -(\nabla f)(x),$$

матрица коефицијената је симетрична и позитивно дефинитна (матрица A формата $m \times n$ је позитивно дефинитна уколико за било које векторе $x \in \mathbb{R}^m$ и $y \in \mathbb{R}^n$ важи $x^\mathrm{T} Ay > 0$), што нам допушта да користимо методу решавања која је скоро дупло бржа од генеричке методе, а такође поседује и боље особине заокруживања. Постоји много других типова структура које је могуће експлоатисати, са уштедом у израчунавању или алгоритамским убрзањем, која је обично више него двоструко већа. У многим случајевима, напор израчунљивости је редукован на нешто што је пропорционално са n^2 или чак са n, за разлику од n^3 које се јавља у генеричким методама. Пошто су ове методе обично примењене када је n најмање 100, а врло често знатно веће, уштеде могу бити драматичне.

Може се испитивати широка разноликост структура матрице коефицијената. Једноставни примери су повезани са појмом реткости, т.ј. појмом нула и ненула елемената у матрици, који укључује: повезане, блок дијагоналне или ретке матрице. Финија употребљива структура је дијагонална структура ниског ранга. Многи чести облици конвексних оптимизационих проблема воде до линеарних једначина, чије матрице коефицијената имају ове употребљиве структуре. Постоји много других посебних типова матрица које су такође употребљиве: Теплицова матрица, Хенкелова матрица, циркулишућа матрица, које овде нећемо разматрати.

Позивамо се на генеричку методу, која не приказује никакав облик реткости матрица, као што је то случај за густе матрице. Позивамо се на методу која не приказује било какву структуру у матрицама, као на пример ону која се јавља код структурних матрица (структурне матрице су матрице посебног облика).

Утрошак алгоритма нумеричке линеарне алгебре се обично изражава укупним бројем операција над бројевима са покретним зарезом “floating-point operations ”неопходним за његово извршавање. Операција над бројевима са покретним зарезом може бити:

- сабирање;
- одузимање;
- множење;
- дељење.

Оцену комплексности алгоритма постижемо тако што пребројимо укупан број операција.

Решавање недовољно одређеног система линеарних једначина Недовољно одређени систем линеарних једначина је систем

$$Ax = b, \tag{7.2}$$

где је $A \in \mathbb{R}^{r \times n}$, при чему је $r < n$. Претпоставимо да је матрица A потпуног ранга врста, т.j. да је $r(A) = r$, тада постоји бар једно решење датог система за сваки вектор b.

У многим применама довољно је пронаћи само једно посебно решење $\hat{x}$.

Апроксимација и фитовање Најједноставнији проблем апроксимације помоћу норме је проблем облика

$$minimize\|Ax - b\|$$

где је $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ дата матрица, $b \in \mathbb{R}$ је дати вектор, а $x \in \mathbb{R}^n$ је непознати вектор и $\|\cdot\|$ је норма на $\mathbb{R}^m$. Норма на $\mathbb{R}^m$ је функција $\|\cdot\| : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^+$, која задовољава следеће услове: (i) $\|x\| \geqslant 0$; (ii) $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$; (iii) $\|x + y\| \leqslant \|x\| + \|y\|$. Решење проблема апроксимације помоћу норме се понекад назива апроксимативно решење од $Ax \approx b$ у односу на норму $\|\cdot\|$. Вектор $r = Ax - b$ се назива резидуал проблема, а његове компоненте се називају резидуали придружени x.

Проблем апроксимације помоћу норме $minimize\|Ax - b\|$ је конвексан проблем, који је увек решив, т.ј. увек постоји најмање једно оптимално решење. Његова оптимална вредност је нула ако и само ако $b \in \mathcal{R}(A)$, где је $b \in \mathcal{R}(A)$ скуп слика матрице A. Међутим, проблем је интересантнији и користан када $b \notin \mathcal{R}(A)$. Можемо претпоставити, без губитка општости да су колоне матрице A линеарно независне, а посебно да је $m \geqslant n$. Када је $m = n$ оптимална тачка је $A^{-1}b$, тако да можемо претпоставити да је $m > n$.

Интерпретација апроксимације Изражавајући Ax у облику

$$Ax = x_1a_1 + \ldots + x_na_n,$$

где су $a_1, \ldots, a_n \in \mathbb{R}^m$ колоне матрице A, можемо видети да је циљ апроксимационог проблема помоћу норме да се "фитује" или апроксимира вектор b линеарном комбинацијом колона матрице A, колико год је могуће близу, при чему се девијација мери помоћу норме $\|\cdot\|$.

Апроксимациони проблем се такође назива и регресиони проблем. У том контексту се вектори $a_1, \ldots, a_n$ називају регресори, а вектор $x_1a_1 + \ldots + x_na_n$, где је x оптимално решење проблема, се назива регресија од b (на регресоре).

Интерпретација процене Блиско повезана интерпретација проблема апроксимације помоћу норме се јавља у проблему процене параметарског вектора на базу несавршених линеарних векторских мерења. Посматрајмо модел линеарног мерења

$$y = Ax + v,$$

где је $y \in \mathbb{R}^m$ вектор мерења, $x \in \mathbb{R}^n$ је вектор параметара који се процењују и $v \in \mathbb{R}^m$ је грешка мерења, која је непозната, али се претпоставља да је мала у односу на норму $\|\cdot\|$. Проблем процене је да се смислено предвиди којем x одговара дато y.

Ако претпоставимо да x има вредност $\hat{x}$, онда ми имплицитно предвиђамо да v има вредност $y - A\hat{x}$. Претпоставимо да су мање вредности за v (у односу на норму $\|\cdot\|$) вероватније него веће вредности, највероватнија претпоставка за x је

$$\hat{x} = argmin_z\|Az - y\|.$$

7.2 Матричне факторизације

Видели смо да нам је у великом броју случајева потребно да одредимо инверзну матрицу A^{-1} инвертибилне квадратне матрице A.

Да бисмо то урадили врло често нам је корисно да матрицу A представимо у погоднијем облику, користећи факторизације:

- LU факторизација;
- QR факторизација;
- SVD факторизација;
- LDL^{T} факторизација;
- Чолески факторизација.

У наставку ћемо детаљније описати неке од наведених факторизација.

LU факторизација

LU факторизација правоугаоне матрице Свака несингуларна матрица $A \in \mathbb{R}^{n\times r}$ таква да је $r(A) = r$, може се факторисати као

$$A = PLU,$$

где је $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$ пермутациона матрица, $L \in \mathbb{R}^{n\times r}$ је јединична доња троугаона, т.ј. $l_{ij} = 0$, за $i < j$ и $l_{ii} = 1$, а $U \in \mathbb{R}^{r\times r}$ је несингуларна и горња троугаона. Број операција (енг. "flops") који је неопходан за овакву факторизацију, под условом да није уочена никаква структура у матрици A износи $\frac{2}{3}r^3 + r^2(n-r)$ операција.

Ако је матрица A ретка (енг. "sparse"), LU факторизација обично укључује пермутацију врста и колона, т.ј. матрица A се факторише као

$$A = P_1 LU P_2,$$

где су $P_1, P_2 \in \mathbb{R}^{r\times r}$ пермутационе матрице. LU факторизација ретке правоугаоне матрице се знатно ефикасније одређује, у смислу да је потребан мањи број операција за израчунавање него за густе матрице.

Наведена LU факторизација може се искористити за решавање недовољно одређеног система линеарних једначина.

LU факторизација квадратне матрице Свака несингуларна квадратна матрица $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ може се факторисати као

$$A = PLU,$$

где је $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$ пермутациона матрица, $L \in \mathbb{R}^{n\times n}$ је јединична доња троугаона матрица, а $U \in \mathbb{R}^{n\times n}$ је горња троугаона и несингуларна матрица.

QR факторизација Матрица $A \in \mathbb{R}^{n\times r}$, где је $r \leqslant n$ и $r(A) = r$ може се факторисати у облику

$$A = \begin{bmatrix} Q_1 & Q_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix},$$

где матрице $Q_1 \in \mathbb{R}^{n\times r}$ и $Q_2 \in \mathbb{R}^{n\times (n-r)}$ задовољавају

$$Q_1{}^{\mathrm{T}} Q_1 = I, \quad Q_2{}^{\mathrm{T}} Q_2 = I, \quad Q_1{}^{\mathrm{T}} Q_2 = 0,$$

док је $R \in \mathbb{R}^{r\times r}$ горња троугаона матрица са ненула елементима на главној дијагонали. Оваква факторизација се назива QR факторизација матрице A. За одређивање QR факторизације је неопходно $2r^2\left(n-\frac{r}{3}\right)$ операција.

Метода која користи QR факторизацију је накоричћенија метода за решавање недовољно одређених система једначина. Недостатак ове методе је тешкоћа да се изрази реткост. Фактор Q је обично густа матрице, чак и када је A веома ретка матрица.

LDL^{T} факторизација Свака несингуларна симетрична матрица $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ може се факторисати као

$$A = PLDL^{\mathrm{T}}P^{\mathrm{T}},$$

где је P пермутациона матрица, L је доња троугаона матрица са позитивним елементима на главној дијагонали, D је блок дијагонална са несингуларним 1×1 и 2×2 дијагоналним блоковима. Оваква факторизација се назива LDL^{T} факторизација матрице A. Број операција који је неопходан да се одреди LDL^{T} факторизација несингуларне симетричне матрице $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, под условом да никаква додатна структура у матрици A није пронађена, износи $\frac{1}{3}n^3$.

Чолески факторизација Ако је $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ симетрична и позитивно дефинитна, тада се матрица A може факторисати као

$$A = LL^{\mathrm{T}},$$

где је L доња троугаона и несингуларна матрица са позитивним дијагоналним елементима. Оваква факторизација се назива Чолески факторизација матрице A и може се интерпретирати као симетрична LU факторизација, где је $L = U^{\mathrm{T}}$. Матрица L, која је јединствено одређена матрицом A назива се Чолески фактор од A. Цена израчунавања Чолески факторизације густе матрице, т.ј. матрице која не приказује ниједну додатну структуру, износи $\frac{1}{3}n^3$, што је половина цене LU факторизације.

Чолески факторизација се може искористити за решавање система $Ax = b$, где је A симетрична позитивно дефинитна матрица.

Када у LDL^{T} факторизацији несингуларне симетричне матрице $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ дате са

$$A = PLDL^{\mathrm{T}}P^{\mathrm{T}},$$

изаберемо $P = I$ и $D = I$, добићемо

$$A = LL^{\mathrm{T}},$$

што представља Чолески факторизацију матрице A.

Спектрална факторизација Претпоставимо да је $A \in \mathbb{S}^n$, т.ј. да је A реална симетрична матрица формата $n\times n$. Таква матрица A се може факторисати као

$$A = Q\Lambda Q^{\mathrm{T}},$$

где је $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ортогонална матрица, т.ј. $Q^{\mathrm{T}}Q = I$ и $\Lambda = diag(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$. Реални бројеви $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ су сопствене вредности матрице A и представљају нуле полинома $\det(sI - A)$. Колоне матрице Q формирају ортонормиран систем сопствених вектора матрице A. Оваква факторизација се назива спектрална факторизација или факторизација по сопственим вредностима матрице A.

Уредимо сопствене вредности $\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \ldots \lambda_n$. Можемо користити нотацију $\lambda_i(A)$ да означимо i-ту по величини сопствену вредност матрице $A \in \mathbb{S}$. Највећу сопствену вредност матрице A можемо означити са $\lambda_1(A) = \lambda_{max}(A)$, док најмању сопствену вредност матрице A можемо означити са $\lambda_n(A) = \lambda_{min}(A)$.

Детерминанта и траг матрице A могу се изразити помоћу сопствених вредности матрице A, на следећи начин

$$\det(A) = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i, \qquad \mathrm{tr}(A) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i,$$

док спектралну и Фробенијусову норму, респективно, означавамо са

$$\|A\|_2 = \max_{i=1,2,\ldots,n} |\lambda_i| = \max\{\lambda_1, -\lambda_n\}, \qquad \|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Дефинитност и матричне неједнакости Највећа и најмања сопствена вредност матрице A задовољавају

$$\lambda_{\max}(A) = \sup_{x \neq 0} \frac{x^{\mathrm{T}} A x}{x^{\mathrm{T}} x}, \qquad \lambda_{\min}(A) = \inf_{x \neq 0} \frac{x^{\mathrm{T}} A x}{x^{\mathrm{T}} x}.$$

Специјално, за било који вектор x важи

$$\lambda_{\min}(A) x^{\mathrm{T}} x \leqslant x^{\mathrm{T}} A x \leqslant \lambda_{\max}(A) x^{\mathrm{T}} x.$$

Матрица $A \in \mathbb{S}^n$ је позитивно дефинитна ако за сваки ненула вектор x важи $x^{\mathrm{T}} A x > 0$. На основу $\lambda_{\min}(A) = \inf_{x \neq 0} \frac{x^{\mathrm{T}} A x}{x^{\mathrm{T}} x}$ и $\lambda_{\min}(A) x^{\mathrm{T}} x \leqslant x^{\mathrm{T}} A x$ можемо закључити да је матрица $A \in \mathbb{S}^n$ позитивно дефинитна ако и само ако су све сопствене вредности матрице A позитивне.

Матрица $A \in \mathbb{S}^n$ је позитивно полудефинитна или ненегативно дефинитна, ако за сваки ненула вектор x важи $x^{\mathrm{T}} A x \geqslant 0$. На основу $\lambda_{\min}(A) = \inf_{x \neq 0} \frac{x^{\mathrm{T}} A x}{x^{\mathrm{T}} x}$ и $\lambda_{\min}(A) x^{\mathrm{T}} x \leqslant x^{\mathrm{T}} A x$ можемо закључити да је матрица $A \in \mathbb{S}^n$ полудефинитна или ненегативно дефинитна ако и само ако су све сопствене вредности матрице A позитивне. ненегативне.

SVD факторизација Нека је дата матрица $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ таква да је $r(A) = r$. Матрица A се може факторисати као

$$A = U \Sigma V^{\mathrm{T}},$$

где матрица $U \in \mathbb{R}^{m \times r}$ задовољава $U^{\mathrm{T}} U = I$, а матрица $V \in \mathbb{R}^{n \times r}$ задовољава $V^{\mathrm{T}} V = I$, док је $\Sigma = diag(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r)$, при чему важи

$$\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \ldots \geqslant \sigma_r > 0.$$

Колоне матрице U се зову леви сингуларни вектори од A, док су колоне матрице V десни сингуларни вектори, а бројеви $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r$ су сингуларне вредности.

7.3 Проблеми најмањих квадрата

Пример 7.3.1 (Градијент матричне функције, Хесијан, градијентни спуст, градијентни раст). Нека је дата функција $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, дефинисана са

$$f(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + by^2),$$

или у матричној нотацији

$$f(X) = \frac{1}{2}X^{\mathrm{T}}SX,$$

где је су вектор X и матрица S одређени са

$$X = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \text{ и } S = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}.$$

Одредити градијент (∇f) и Хесијан $H = (\nabla^2 f)$ функције f, а затим формирати градијентни спуст функције f који је дат са

$$X_{k+1} = X_k - S_k(\nabla f)(X_k).$$

Објаснити појмове градијент, Хесијан, конвексност, градијентни спуст и градијентни раст.

Рад: Градијент функције f је пресликавање $(\nabla f) : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$, одређено на следећи начин

$$(\nabla f)(x, y) = \left(\frac{\partial f(x, y)}{\partial x}, \frac{\partial f(x, y)}{\partial y}\right) = \left(\frac{1}{2}\frac{\partial(x^2 + by^2)}{\partial x}, \frac{1}{2}\frac{\partial(x^2 + by^2)}{\partial y}\right) = (x, b).$$

Конвексност и матрица H (Хесијан) су повезани на следећи начин:

- функција f је конвексна ако је матрица H позитивно полудефинитна (што укључује позитивну дефинитност);
- функција f је строго конвексна ако је матрица H позитивно дефинитна.

□

Функција коју је неопходно минимизирати код проблема апроксимације методом најмањих квадрата је

$$f(x) = \|Ax - b\|_2^2,$$

где је $\|\cdot\|$ Еуклидова или l_2-норма.

На основу дефиниције Еуклидове норме, функцију $f(x)$ можемо представити на следећи начин

$$\begin{aligned}
f(x) =&((Ax)_1 - b_1)^2 + ((Ax)_2 - b_2)^2 + \ldots + ((Ax)_m - b_m)^2 \\
=&(Ax)_1^2 - 2(Ax)_1 b_1 + b_1^2 + (Ax)_2^2 - 2(Ax)_2 b_2 + b_2^2 + \ldots + (Ax)_m^2 - 2(Ax)_m b_m + b_m^2 \\
=&(Ax)_1^2 + (Ax)_2^2 + \ldots + (Ax)_m^2 \\
&- 2(Ax)_1 b_1 - 2(Ax)_2 b_2 - \ldots - 2(Ax)_m b_m \\
&+ b_1^2 + b_2^2 + \ldots + b_m^2 \\
=&(Ax)_1^2 + (Ax)_2^2 + \ldots + (Ax)_m^2 \\
&- 2b_1(Ax)_1 - 2b_2(Ax)_2 - \ldots - 2b_m(Ax)_m \\
&+ b_1^2 + b_2^2 + \ldots + b_m^2 \\
=&(Ax)^{\mathrm{T}} Ax - 2b^{\mathrm{T}} Ax + b^{\mathrm{T}} b.
\end{aligned}$$

Функција $f(x)$ достиже минимум у тачки x_0 ако и само ако важи

$$(\nabla f)(x_0) = 2A^{\mathrm{T}} A x_0 - 2A^{\mathrm{T}} b = 0,$$

т.ј. ако и само ако x_0 задовољава нормалну једначину

$$A^{\mathrm{T}} A x_0 = A^{\mathrm{T}} b,$$

која увек има решење. Под претпоставком да су колоне матрице A линеарно независне, решење проблема апроксимације најмањих квадрата је јединствено и гласи

$$x_0 = (A^{\mathrm{T}} A)^{-1} A^{\mathrm{T}} b.$$