

Wykład VII

Wartości i wektory własne (EVD) Wartości osobliwe i dekompozycja SVD

- (EVD) • Zastosowania w technice i obliczeniach numerycznych
- (EVD) • Zadanie wyznaczenia wartości i wektorów własnych macierzy
- (EVD) • Klasyfikacja zagadnień własnych - przypadki szczególne
- (EVD) • Wprowadzenie do metod rozwiązywania zadania, dekompoz. QR
 - Dekompozycja SVD i rozwiązywanie układów nadokreślonych

Zastosowania analizy własnej w technice i obliczeniach numerycznych

Sprowadzanie opisu systemu dynamicznego z zależnościami wzajemnymi do problemów niezależnych (*structure analysis*).

Wydzielanie składowych nieskorelowanych - KLT - *Karhunen-Loeve Transform*, redukcja wymiarowości opisu danych przez pominięcie najmniej istotnych elementów związanych z najmniejszymi wartościami własnymi - PCA - *Principal Component Analysis*. Analiza spektralna grafów z zastosowaniem np. w algorytmach pozycjonowania stron internetowych.

Selekcja i ekstrakcja najistotniejszych (najbardziej różnicujących) cech w klasyfikacji, np. rozpoznawaniu kształtów – liter, twarzy, sygnałów, zmian zwyrodnieniowych na zdjęciach rentgenowskich, automatycznym rozpoznawaniu celu na polu walki.

Optymalny kształt sygnałów transmitowanych przez dyspersyjny kanał w telekomunikacji (*eigenfilter*), wyznaczanie optymalnego korektora linii transmisyjnej z formy kwadratowej (*Rayleigh quotient*), dodawanie cyklicznego prefiksu w transmisji OFDM/DMT w celu uzyskania macierzy spłotowej linii z wektorami własnymi równymi wierszom FFT.

Wskaźnik uwarunkowania układu równań liniowych $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ ($\kappa = \lambda_{\max}/\lambda_{\min}$). Podobnie sztywność układu dynamicznego opisanego równaniem stanu $\mathbf{x}' = \mathbf{Ax}$.

Zadanie wyznaczenia wartości i wektorów własnych macierzy

Podstawowe sformułowanie zagadnienia własnego ma postać:

$$\mathbf{Ax} = \lambda \mathbf{x} \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{x}, \lambda = ?$$

czyli dla macierzy kwadratowej \mathbf{A} poszukiwane są takie wartości λ i wektora \mathbf{x} , dla których transformacja tego wektora przez macierz \mathbf{A} ma skutek identyczny jak jego mnożenie przez stałą λ . Wektory \mathbf{x} nazywane są wektorami własnymi, zaś skojarzone stałe λ to wartości własne.

Jest to równoważne homogenicznemu układowi równań ze względu na λ i \mathbf{x} :

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

który ma nietrywialne rozwiązanie $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ tylko wtedy, gdy:

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0$$

W ten sposób otrzymujemy znany z kursu matematyki, numerycznie mało praktyczny, sposób obliczania wartości własnych poprzez wyznaczanie wielomianu charakterystycznego macierzy i poszukiwanie miejsc zerowych tego wielomianu. Taki algorytm miałby złożoność $N!$ i dodatkowo wspomniane już (pierwszy wykład) złe uwarunkowanie.

Zapisując problem macierzowo (zbiórco dla wszystkich wektorów/wartości własnych) poszukujemy dekompozycji macierzy \mathbf{A} na składowe \mathbf{P} (zawiera wektory własne \mathbf{p}_i w kolumnach) i \mathbf{D} (diagonalna z wartościami własnymi λ_i na diagonalu), dla której zachodzi:

$$\mathbf{AP} = \mathbf{PD} \quad \text{lub inaczej} \quad \mathbf{A} = \mathbf{PDP}^{-1}$$

Przykłady Wartości i wektory własne szczególnych macierzy

Macierz diagonalna

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \quad \mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

Macierz obrotu lewoskrętnego na płaszczyźnie

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) \\ -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{bmatrix}$$

Ma rzeczywiste wartości własne tylko dla kąta $\varphi = \{0, \pi\}$ (sprawdź przez obrót dowolnego wektora).

Macierz stochastyczna o sumie elementów w kolumnie równej 1 (lewa macierz stochastyczna)

Macierz taka zawiera prawdopodobieństwa (liczby od 0.0 do 1.0) tranzycji w tzw. łańcuchach Markowa używanych w sterowaniu, genetyce, analizie sieci. **Największa wartość własna** macierzy stochastycznej jest **równa 1.0** na mocy **twierdzenia Perrona-Frobeniusa**. Np.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0.1 & 0 & 0.4 \\ 0.6 & 0.9 & 0.2 \\ 0.3 & 0.1 & 0.4 \end{bmatrix}$$

=1

```
A=[0.1 0 0.4; 0.6 0.9 0.2; 0.3 0.1 0.4];
[P,D]=eig(A)
```

Niektóre ważne własności wartości i wektorów własnych

Macierz o wymiarach $N \times N$ ma co najwyżej N różnych wektorów własnych i skojarzonych z nimi wartości własnych.

Wektory własne wyznaczają tylko kierunki i mogą mieć dowolną długość. Zazwyczaj normuje się je do jednostkowej długości w celu jednoznacznej reprezentacji.

Wartości własne mogą być rzeczywiste lub zespolone. Zbiór wartości własnych jest nazywany widmem macierzy.

Wektory własne dla różnych wartości własnych są liniowo niezależne.

Macierze hermitowskie (tj. macierze zespolone dla których $\mathbf{A}^H = (\mathbf{A}^*)^T = \mathbf{A}$) mają wartości własne rzeczywiste.

Szczególny przypadek macierzy hermitowskiej – macierz rzeczywista symetryczna ma wartości własne rzeczywiste i wektory własne wzajemnie ortogonalne (wtedy $\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}^T$ i $\mathbf{A} = \mathbf{P}\mathbf{D}\mathbf{P}^T$).

Macierz rzeczywista symetryczna dodatnio określona ma dodatnie wartości własne.

Wyznacznik macierzy jest równy iloczynowi jej wartości własnych.

Mnożenie macierz-wektor jako transformacja wektorowa, kierunki niezmiennicze

Operację macierzową $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ możemy interpretować jako transformację wektora \mathbf{x} w wektor \mathbf{y} . Jeśli \mathbf{x} będzie wektorem własnym \mathbf{A} to efekt transformacji będzie taki sam jak mnożenie przez skalar (czyli tylko skalowanie, zmiana długości wektora). Kierunek wskazywany przez wektor własny jest więc kierunkiem niezmienniczym, nie ulega zmianie w wyniku transformacji.

Przykład: Kierunki niezmiennicze dla macierzy diagonalnej (tylko skalowanie)

Ponieważ \mathbf{A} ma postać diagonalną wymaganą dla \mathbf{D} to kierunki niezmiennicze (wskazywane przez wektory własne) pokrywają się z kierunkami osi układu współrzędnych.

Rozkład na wartości/wektory własne w kategoriach macierzy składowych

Mając rozkład macierzy \mathbf{A} ($N \times N$) na wektory/wartości własne, tj. $\mathbf{A} = \mathbf{P}\mathbf{D}\mathbf{P}^T$ (niech dla prostoty \mathbf{A} będzie macierzą symetryczną), możemy ostatnią równość zapisać w bardziej czytelnej postaci, ponieważ \mathbf{D} jest diagonalna, a \mathbf{P} ortogonalna:

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^N \lambda_i \mathbf{p}_i \mathbf{p}_i^T$$

gdzie \mathbf{p}_i to i -ty wektor własny (kolumna macierzy \mathbf{P}).

Macierz \mathbf{A} jest więc dekomponowana na macierze składowe o rzędzie 1, definiowane przez poszczególne wektory własne i skalowane wartościami własnymi (*Mercer's or Spectral theorem*)

Przykład Wyznaczanie wartości/wektorów własnych macierzy równania stanu metodą bezpośrednią i ich **znaczenie dla dynamiki obiektu**

Dla obiektu dynamicznego opisanego transmitancją drugiego rzędu dwuinercyjną (np. czujnik temperatury w obudowie):

$$G(s) = \frac{K}{(1 + sT_1)(1 + sT_2)}$$

macierz **A** równania stanu, determinująca własności dynamiczne obiektu, ma zawartość:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -\frac{T_1 + T_2}{T_1 T_2} & -\frac{1}{T_1 T_2} \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$R(\lambda) = \det[\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}] = \lambda^2 + \frac{T_1 + T_2}{T_1 T_2} \lambda + \frac{1}{T_1 T_2} = \left(\lambda + \frac{1}{T_1} \right) \left(\lambda + \frac{1}{T_2} \right)$$

$$\lambda_1 = -\frac{1}{T_1} \quad \lambda_2 = -\frac{1}{T_2}$$

$$p_1 = [1 \quad -T_1]^T \quad p_2 = [1 \quad -T_2]^T$$

Sprawdzenie w Symbolic Toolbox:

`syms T1 T2`

`[P,D]=eig(1/(T1*T2)*[-(T1+T2), -1; T1*T2, 0])`

Możemy zapisać dekompozycję: $\mathbf{A} = \mathbf{P} \mathbf{D} \mathbf{P}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -T_1 & -T_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{T_1} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{T_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{-T_2}{T_1 - T_2} & \frac{-1}{T_1 - T_2} \\ \frac{T_1}{T_1 - T_2} & \frac{1}{T_1 - T_2} \end{bmatrix}$

Równanie jednorodne $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A} \mathbf{x}$ jest zastąpione rozprzężonym (*decoupled*) $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{D} \mathbf{y}$, gdzie $\mathbf{y} = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{x}$.

Rozwiązujemy łatwe równanie rozprzężone i przechodzimy na końcowe rozwiązanie przez $\mathbf{x} = \mathbf{P} \mathbf{y}$.

Więcej informacji na ten temat znajdziesz np. w: Kaczorek T. „Macierze w Automatyce i Elektrotechnice”

Przykład Obszar rozrzutu dwuelementowego wektora losowego ?

TRUDNE !

Ponieważ elipsa rozrzutu jest definiowana przez wyrażenie:

$$\mathbf{x}^T \Sigma^{-1} \mathbf{x} = r$$

a macierz kowariancyjną Σ (symetryczną) możemy zdekompować na:

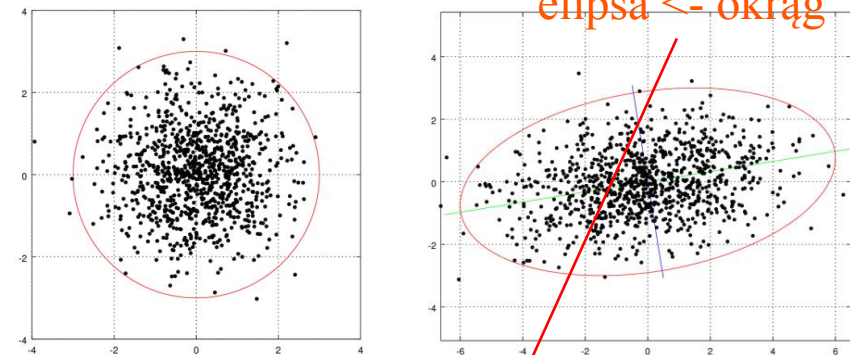
$$\Sigma = \mathbf{P} \mathbf{D} \mathbf{P}^T \quad \text{czyli} \quad \Sigma^{-1} = \mathbf{P} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{P}^T, \quad \text{lub} \quad \mathbf{P}^T \Sigma^{-1} \mathbf{P} = \mathbf{D}^{-1}.$$

to z $\mathbf{x}^T \mathbf{P} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{x} = r$ podstawiając $\mathbf{y} = (\mathbf{r} \mathbf{D})^{-1/2} \mathbf{P}^T \mathbf{x}$ uzyskujemy: $\mathbf{y}^T \mathbf{y} = 1$

czyli okrąg o promieniu 1 w nowym „zdekorelowanym” (*decoupled*) układzie współrzędnych.

Po wyznaczeniu punktów elipsy w tym układzie wracamy do oryginalnego przez: $\mathbf{x} = \mathbf{P} (\mathbf{r} \mathbf{D})^{1/2} \mathbf{y}$

```
>> S=[4 0.5;0.5 1], x=elipsa(S,9,100);
>> [P,D]=eig(S)
P =    0.1602   -0.9871
    -0.9871   -0.1602
D =    0.9189    0
      0    4.0811
>> plot(x(1,:),x(2:,:), 'r', [-1.5:1.5], [-1.5:1.5]*P(1,1)/P(2,1), 'g', ...
>> axis equal, grid on
```



Związek macierzy wektorów własnych \mathbf{P} z macierzą rotacji lewoskrętnej o kąt φ :

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}$$

```
function x = elipsa(S,r,n)
% Zwraca n punktów elipsy: x'*inv(S)*x=r
% dla S (2x2) symetrycznej i +okreslonej
[P,D] = eig(S);
P = P*sqrt(r*D);
t = linspace(0,2*pi,n);
x = P*[cos(t); sin(t)];
```

elipsa <- okrąg

Dekorelacja informacji wektorowej, PCA - Principal Component Analysis

Założmy, że dysponujemy zbiorem rejestracji wektorowych, np. codziennymi pomiarami temperatury z 5 lokalizacji w Polsce albo natężeniem procesów myślowych u 10 studentów w okresie sesji (mierzone co 1 godzinę przez pomiar natężenia pola magnetycznego wokół głowy). Łatwo możemy estymować macierz kowariancyjną Σ tych obserwacji (wymiar odpowiednio 5x5 albo 10x10). Jeśli elementy wektora są skorelowane (duże wartości poza diagonalą macierzy) to znaczy, że w obserwowanych zachowaniach są składowe wspólne. Jak wydzielić te składowe?

\mathbf{x} - wektor pojedynczej obserwacji (kolumnowy)

$\Sigma = E[\mathbf{x}\mathbf{x}^T]$ - macierz kowariancji w zbiorze obserwacji

Poszukujemy ortonormalnej transformacji nie zmieniającej wartości własnych (transformacja przez podobieństwo), która wydzieli składowe nieskorelowane

$$\mathbf{y} = \mathbf{T}^T \mathbf{x}, \quad \Sigma_{\mathbf{y}} = E[\mathbf{y}\mathbf{y}^T] \equiv \mathbf{D}, \text{ gdzie } \mathbf{D} \text{ jest diagonalna}$$

Przekształcając

$$E[\mathbf{y}\mathbf{y}^T] \equiv E[\mathbf{T}^T \mathbf{x}\mathbf{x}^T \mathbf{T}] = \mathbf{T}^T E[\mathbf{x}\mathbf{x}^T] \mathbf{T} = \mathbf{T}^T \Sigma \mathbf{T} = \mathbf{D}$$

i przyrównując do diagonalnej \mathbf{D} dostajemy

$$\Sigma \mathbf{T} = \mathbf{T} \mathbf{D}$$

a więc warunek na macierz wektorów własnych.

!!!!!!

Wniosek: transf. dekorrelująca to rzutowanie na wektory własne macierzy kowariancyjnej (Karhunen-Loeve Transform)

Zrób to sam

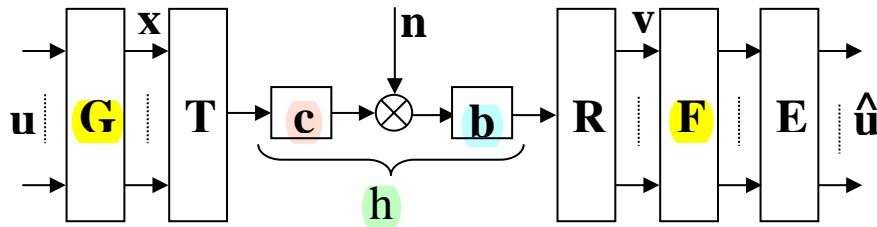
Weź stereofonicznego WAVa, wyznacz macierz kowariancji kanałów ($\text{cov}(\text{ch1}, \text{ch2})$), wydziel składowe zdekorrelowane, posłuchaj.

Separacja źródeł

Jeszcze raz problem demiksowania nagrań z trzech mikrofonów, tym razem bez znajomości macierzy miksującej.

Szerokie omówienie wartości własnych/osobliwych w S. Haykin „Modern Filters”

Przykład Transmisja danych w technologii ADSL/OFDM



u - parallel complex data (codes of QAM constellations)

G - modulator (IFFT \mathbf{W}^H)

T - guard interval addition (cyclic prefix)

c - fading transmission line

b - time domain equalizer (TEQ), FIR structure,

n - line noise

h - time equalized (shortened) line, FIR model.

R - guard interval discarding

F - demodulator (FFT \mathbf{W})

E - frequency domain equalizer (FEQ)

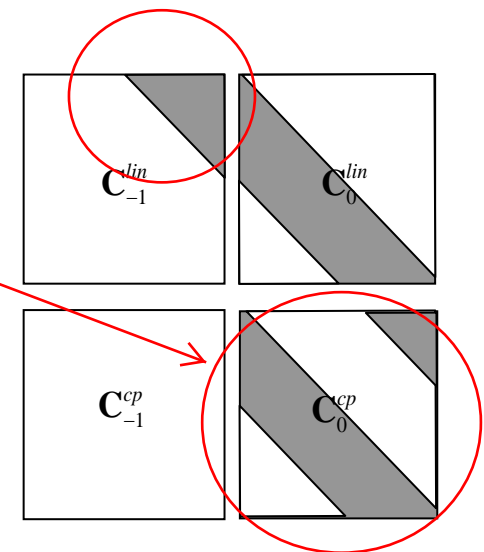
Macierz splotowa linii po korekcji TEQ:

$$\mathbf{C}^{lin} = \begin{bmatrix} h_L & \dots & h_0 & & \\ & \ddots & & \ddots & \\ & & & & \ddots \\ 0 & & & & h_L & \dots & h_0 \end{bmatrix}$$

Wprowadzenie cyklicznego prefiksu (operacje **T**, **R**) powoduje sprowadzenie macierzy splotowej linii transmisyjnej do postaci cyrkulacyjnej, której wektory własne są wektorami FFT a wartości własne są wartościami $H = \text{FFT}(h)$ (korygowane przez FEQ).

$$\frac{1}{N} \mathbf{W} \cdot \mathbf{C}_0^{cp} \cdot \mathbf{W}^H = \mathbf{D} = \text{diag} \left(H(0), H\left(\frac{2\pi}{N}\right), \dots, H\left(\frac{2\pi(N-1)}{N}\right) \right)$$

Alternatywne wyjaśnienie z użyciem splotu kołowego.



Klasyfikacja zagadnień własnych

Wyznaczanie zbioru wartości własnych jest nazywane analizą wartości własnych (*eigenanalysis*) też analizą spektralną macierzy (*matrix spectrum*).

Wybór najdogodniejszej metody rozwiązania zagadnienia własnego zależy od celu rozwiązania i postaci dekomponowanej macierzy.

Wyróżnimy przypadki (od których zależy metoda rozwiązania):

- poszukiwane *wszystkie* wartości własne lub tylko wybrane (najmniejsze, największe),
- poszukiwane *tylko wartości własne* lub *pary {wartość własna, wektor własny}*
- *macierz rzeczywista* lub *zespolona*,
- *macierz pełna* lub *rzadka*,
- *macierz specjalna* – np. *symetryczna*.

Metoda potęgowa (*power method*, odmiany *inverse power*, *shifted inverse power*)

Rozwiązanie zadania własnego metodą potęgową dostarcza **tylko największą wartość własną i skojarzony wektor własny**. Jej działanie jest oparte na zależności potęgowej wydzielającej dominującą wartość własną:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

$$\mathbf{A}\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda^2\mathbf{x}$$

$$\underbrace{\mathbf{A} \dots \mathbf{A}}_i \mathbf{x} = \mathbf{A}^i \mathbf{x} = \lambda^i \mathbf{x}$$

Schemat iteracyjny od wybranej wartości startowej \mathbf{x}_0 (np. wektor jedynek):

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{A}\mathbf{x}_k$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \frac{1}{c_{k+1}} \mathbf{y}_k \quad (\text{normalizacja do wektora o ekstremalnej składowej równej 1})$$

$$c_{k+1} = y_k^{(j)}, \quad j = \arg \max_{j=1, \dots, N} \left[|y_k^{(j)}| \right] \quad (\text{czynniki normalizujący – ekstremalna wartość w wektorze})$$

proceeds to solution:

$$\lambda_{\max} = c_{k+1} \quad \mathbf{p}_{\max} = \mathbf{x}_{k+1}$$

Dowód można znaleźć np. w Mathews J.H. „*Numerical Methods for ...*”
Odmiany metody wyznaczają wybrane pary {wartość własna, wektor własny}.

```
x=[1; 1];
for i=1:10
    y=A*x;
    [ym,i]=max(abs(y));
    x=y/y(i);
    l=y(i);
end
x= [1.0000; 0.1623]
l= 4.0811
```

```
A=[4 0.5;0.5 1];
eig(A)
P =
    0.1602    -0.9871
   -0.9871    -0.1602
D =
    0.9189         0
         0    4.0811
```

Przykład Algorytm *Google PageRank*

Google stosuje algorytmy rankingu wyników wyszukiwania stron internetowych według ich adekwatności do hasła wyszukiwania i według ważności w strukturze połączeń stron. Algorytm *PageRank* opiera się na analizie spektralnej grafu relacji między stronami internetowymi (czyli analizie wektorów własnych odpowiedniej macierzy). Graf opisuje ilość i ważność linków wskazujących do danej strony internetowej. Ważność danego linku jest tym większa im wyższy jest ranking strony wskazującej.

Równaniem do rozwiązania jest w tym przypadku zależność:

$$\mathbf{r} = \left(d\mathbf{M} + \frac{1-d}{N}\mathbf{E} \right) \mathbf{r} \quad \mathbf{1} * \mathbf{x} = \mathbf{A} * \mathbf{x}$$

gdzie:

- \mathbf{M} – macierz prawdopodobieństwa wyboru linków, element $M_{i,j}$ określa prawdopodobieństwo przejścia ze strony i -tej do j -tej, macierz ma sumę elementów w kolumnie równą 1.0
- \mathbf{r} – wektor własny odpowiadający wartości własnej równej 1.0 (skąd wiemy, że taka jest ?)
- d – statystycznie wyznaczony współczynnik kontynuacji podążania za linkami (~ 0.85)
- N – ilość wszystkich powiązanych stron
- \mathbf{E} – macierz jedynekowa

PageRank \mathbf{r} to wektor własny macierzy w nawiasie odpowiadający największej wartości własnej.

Metoda przekształceń przez podobieństwo

Metoda Jacobiego dla macierzy symetrycznych – wyznacza wszystkie wartości i wektory własne. Ideą bazową tej metody jest taka iteracyjna rotacja układu współrzędnych wg kolejnych osi, żeby sprowadzić macierz do postaci diagonalnej.

Transformacje (rotacje macierzy) są operacją nie zmieniającą układu wartości własnych – transformacją przez podobieństwo (*similarity transformation*):

Dla ortogonalnej macierzy transformacji, $\mathbf{R}_1^T \mathbf{A} \mathbf{R}_1 = \mathbf{A}'$ (\mathbf{A}' podobna do \mathbf{A})

Sekwencja transformacji: $\mathbf{R}_n^T \dots \mathbf{R}_2^T \mathbf{R}_1^T \mathbf{A} \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \dots \mathbf{R}_n = \mathbf{D} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$

Zmienia problem $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ na $\mathbf{D}\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}$, gdzie $\mathbf{y} = \mathbf{R}_n^T \dots \mathbf{R}_2^T \mathbf{R}_1^T \mathbf{x} = \mathbf{R}^T \mathbf{x}$

Problemem jest tylko konstrukcja kolejnych macierzy transformacji \mathbf{R}_i

Zerowanie poszczególnych elementów pozadiagonalnych przez operację podobieństwa wykonuje macierz rotacji o pewien kąt φ ($c = \cos \varphi$, $s = \sin \varphi$)

gdzie:

$$c = 1 / \sqrt{1 + t^2}, \quad s = tc$$

$$\zeta = \frac{A_{q,q} - A_{p,p}}{2A_{p,q}}, \quad t = \frac{\text{sign}(\zeta)}{|\zeta| + \sqrt{1 + \zeta^2}}$$

Wektory własne są równe łącznej macierzy transformacji \mathbf{R} .

$$\mathbf{R}_i = \begin{bmatrix} 1 & & (p) & & (q) & & \\ & \ddots & \vdots & & \vdots & & \\ \dots & \dots & c & \dots & s & \dots & (p) \\ & & \vdots & 1 & \vdots & & \\ \dots & \dots & -s & \dots & c & \dots & (q) \\ & & \vdots & & \vdots & \ddots & \\ & & \vdots & & \vdots & & 1 \end{bmatrix}$$

Odmiany metod transformacji przez podobieństwo

Bardziej efektywne odmiany to metoda obrotów Householdera i Givensa o innej postaci macierzy obrotu (szybciej zbieżny proces). Nie omawiamy ich tutaj. Patrz np. „Numerical Recipes ...”

Metoda dekompozycji QR – wyznaczanie wartości własnych

Jeśli wyznaczone mają być tylko wartości własne to bardziej efektywne jest prowadzenie transformacji nie do postaci diagonalnej, ale do trójkątnej. Wtedy wartości własne występują na diagonalu macierzy trójkątnej.

Dekompozycja ma postać:

$\mathbf{A} = \mathbf{QR}$, gdzie \mathbf{Q} jest ortonormalna, a \mathbf{R} trójkątna górna.

Zmodyfikowana macierz ma postać:

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{Q}^T \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{R} \mathbf{Q}$$

pętla iteracyjna



Iteracyjne prowadzenie dekompozycji daje rozwiązanie w postaci trójkątnej (diagonalnej dla \mathbf{A} symetrycznej, bo podobieństwo zachowuje strukturę macierzy) macierzy \mathbf{A}_n , co pokazano w przykładzie.

```
A=[4 0.5;0.5 1];
[Q,R]=qr(A);
for i=1:10
    [Q,R]=qr(R*Q);
end
lambda=diag(R*Q)
lambda =
    4.0811
    0.9189
```

Zauważmy, że \mathbf{R} jest macierzą dekompozycji Choleskiego dla

$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = (\mathbf{QR})^T \mathbf{QR} = \mathbf{R}^T \mathbf{Q}^T \mathbf{QR} = \mathbf{R}^T \mathbf{R}$, więc układ normalny $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{a} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ można efektywnie rozwiązać metodą podstawień dekomponując \mathbf{X} (patrz wykład „Układy równań liniowych”).

Zastosowanie dekompozycji QR do rozwiązywania nadokreślonego układu równań

Dla równania nadokreślonego $\mathbf{X}\mathbf{a} = \mathbf{y}$, gdzie \mathbf{X} ma N wierszy (pomiarów) i n kolumn (parametry),

rozwiązanie ma minimalizować kryterium sumy kwadratów odchylek $\varepsilon = \sum_{i=1}^N |\mathbf{y}(i) - \mathbf{X}(i)\boldsymbol{\theta}|^2$,

wektorowo zapisywane jako $\varepsilon = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta}\|^2$. Macierz rozszerzoną $[\mathbf{X} \ \mathbf{y}]$ możemy przedstawić w postaci QR zdekomponowanej jako $[\mathbf{X} \ \mathbf{y}] = \mathbf{Q}\mathbf{R}$, gdzie \mathbf{Q} jest macierzą ortonormalną $N \times N$, a \mathbf{R} jest macierzą trójkątną górną $N \times n$. Ponieważ transformacja ortonormalna nie zmienia odległości to kryterium możemy zapisać w równoważnej postaci $\varepsilon = \|\mathbf{Q}^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})\|^2$. Podzielmy \mathbf{R} na części związane z \mathbf{X} i \mathbf{y} (\mathbf{R}_1 – trójkątną górną $n \times n$, \mathbf{r}_2 – wektor kolumnowy n , r_3 – skalar, $\mathbf{0}$ – macierz

zerowa $(N-n) \times (N-n)$): $\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_1 & \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{0} & r_3 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}$. Kryterium możemy teraz przepisać w postaci

$$\varepsilon = \|\mathbf{Q}^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\theta})\|^2 = \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{r}_2 \\ r_3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{R}_1\boldsymbol{\theta} \\ 0 \end{bmatrix} \right\|^2 = \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_1\boldsymbol{\theta}\|^2 + |r_3|^2.$$

Pierwszy składnik tworzy równanie liniowe dobrze określone i zeruje się dla $\mathbf{R}_1\boldsymbol{\theta} = \mathbf{r}_2$ (rozwiązanie przez podstawienie wstecz) a drugi składnik (skalar) to suma kwadratów reszt dopasowania. Algorytm jest dobrze uwarunkowany bo nie używamy w rozwiązaniu kwadratu macierzy. Nie jest też istotna macierz \mathbf{Q} .

Zastosowanie w identyfikacji/estymacji - zob. np. L. Ljung, „System Identification”,

Wartości osobliwe i dekompozycja SVD (*singular value decomposition*)

Jednym z zastosowań dekompozycji SVD jest lepsze uwarunkowanie zadania z poprzedniej strony – rozwiązania układu normalnego. Ten temat jest rzadko omawiany w standardowych kursach metod obliczeniowych, ale zyskuje na popularności.

Dla nie kwadratowej macierzy \mathbf{A} (wymiarzy $m \times n$) **rozkład SVD** ma postać:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T \quad \text{skąd: } \mathbf{U}^T \mathbf{A} \mathbf{V} = \mathbf{D}$$

gdzie: \mathbf{U} – unitarna ($\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}$) o wymiarach $m \times m$, \mathbf{V} – unitarna ($\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I}$) o wymiarach $n \times n$

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} \mathbf{D} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{D} = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n), \text{ diagonalna macierz wartości osobliwych}$$

Pseudoodwrotność macierzy \mathbf{A} definiowana jako $\mathbf{A}^I = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$ może być szybko policzona:

$$\mathbf{A}^I = \mathbf{V} \mathbf{\Sigma}^I \mathbf{U}^T, \quad \mathbf{\Sigma}^I = \begin{bmatrix} \mathbf{D}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{D}^{-1} = \text{diag}\left(\frac{1}{\sigma_1}, \dots, \frac{1}{\sigma_n}\right)$$

Zastosowanie do rozwiązywania układów nadokreślonych (estymacja LS, aproksymacja):

równanie normalne $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{a} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ szybko i dokładnie rozwiązywane przez $\mathbf{a} = \mathbf{X}^I \mathbf{y}$

$$\text{Dodatkowo: } \mathbf{V}^T (\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \mathbf{V} = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2) \quad \mathbf{U}^T (\mathbf{A} \mathbf{A}^T) \mathbf{U} = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2, 0, \dots, 0)$$

Czyli wartości własne $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ są kwadratami wartości osobliwych \mathbf{A} .

Więcej w: Bjorck, Dahlquist „Metody numeryczne” i Golub, Loan „Matrix Computations”.

Interpretacja SVD w kategoriach macierzy składowych

(Independent Component Analysis)

Podobnie jak przy rozkładzie na wektory/wartości własne tak i przy rozkładzie na wartości osobliwe macierz możemy przedstawić jako kombinację składowych definiowanych przez wektory macierzy U , V i skalowanych N niezerowymi wartościami osobliwymi σ . Tzn. wyrażenie

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \text{ możemy przejrzyściej zapisać jako } \mathbf{A} = \sum_{i=1}^N \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T$$

Przykład Obrazek prostokątny złożony z pikseli możemy widzieć jako macierz niekwadratową z zawartością określającą jasność (kolor) pikseli. Taką macierz możemy zdekomponować na składowe obrazy osobliwe (*eigenimages*). Właściwości SVD powodują, że rozkład ten będzie najefektywniejszy, tj. resztkowa energia kolejnych składowych z malejącymi wartościami osobliwymi będzie najmniejsza z możliwych spośród wszystkich transformat ortogonalnych. Jaki jest stopień kompresji informacji w tym przykładzie ?

```
X=imread('lena512.bmp');
[U,S,V]=svd(X);
subplot(2,3,1);
imagesc(U*S*V');
colormap(gray); axis image off;
mv=[50, 25, 10, 3, 1];
for i=1:length(mv)
    mask=zeros(size(S));
    mask(1:mv(i),1:mv(i))=1;
    subplot(2,3,i+1);
    imagesc(U*(S.*mask)*V');
    axis image off;
end
```



Podsumowanie, kluczowe elementy tego wykładu:

- Wartości i wektory własne odsłaniają strukturę problemu opisanego równaniem macierzowym
 - rozdzielają składowe dynamiki systemu
 - pokazują dominujące komponenty w macierzy i opisywanym nią zjawisku
 - Są bazą algorytmów Principal Component Analysis (PCA)
- Wartości i wektory własne mogą być wyznaczone metodą potęgową, przekształceniami przez podobieństwo i metodą dekompozycji QR
- Rozkład na wartości osobliwe
 - Pokazuje macierz jako kombinację liniową podmacierzy generowanych przez macierze rozkładu SVD
 - Pozwala na przybliżanie macierzy przez ograniczanie ilości podmacierzy
 - Pozwala na rozwiązywanie równania LS w efektywny sposób
 - Jest podstawą algorytmów Independent Component Analysis (ICA)