

Kako se lotiš: Numerična linearna algebra

Patrik Žnidaršič

Prevedeno 10. 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 $\text{im } A$, 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 $A^+ \in \mathbb{C}^{n \times m}$, 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 $C^+ = B(B^T B)^{-1}(A^T A)^{-1}A^T$.

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 $\tilde{b} \in \text{im } \tilde{A}$ in norma $\|[\tilde{A}, \tilde{b}] - [A, b]\|_F$ čim manjša.

V dobro postavljenem problemu bo $b \notin \text{im } A$ ter $\text{rang}[\tilde{A}, \tilde{b}] = n$, tako da je $[\tilde{A}, \tilde{b}]$ ravno matrika ranga n , ki najboljše 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

$$h_1(\lambda) = \frac{c_1}{d_k - \lambda} + c'_1 \quad h_2(\lambda) = \frac{c_2}{d_{k+1} - \lambda} + c'_2$$

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 preštujemo 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 $P(\lambda) = A_0 + \lambda A_1 + \dots + \lambda^n A_n$.