Pokročilé numerické metody I
Maticové rozklady

Jiří Zelinka

Základní maticové rozklady

LU rozklad

$A = LU$, L je dolní trojúhelíková, U je horní trojúhelíková.
LU rozklad existuje, pokud hlavní minory matice A jsou nenulové.
Není určen jednoznačně, jednoznačost dosáhneme fixováním diagonály v L nebo U (nejčastěji jedničky na diagonále v L).

Metody výpočtu

- pomocí Gaussovy eliminace
- pomocí Croutovy metody (porovnání prvků v maticích)

Použití

- řešení systému lineárních rovnic (hlavně pro různé pravé strany) $Ax = b \Rightarrow LUx = b \Rightarrow Ux = y,\ Ly = b$,
- výpočet inverzní matice
- výpočet determinantu

Zbecněná verze: $PA = LU$, P je vhodná permutační matice.

Choleského rozklad (pro reálnou symetrickou matici)

$$A = T^T \cdot T$$

$T = (t_{ij})$ je horní trojúhelíková matice, její prvky se určí přímým výpočtem:

$$t_{11} = \sqrt{a_{11}}, \qquad t_{1j} = \frac{a_{1j}}{t_{11}}, \quad j = 2, \ldots, n,$$

$$t_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki}^2}, \quad i = 2, \ldots, n$$

$$t_{ij} = \frac{1}{t_{ii}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki} t_{kj}\right), \qquad j > i \qquad t_{ij} = 0, \qquad j < i$$

Choleského rozklad existuje, pokud hlavní minory matice A jsou nenulové, ale pro záporné hodnoty dostáváme komplexní čísla, proto softwarové balíky zpravidla počítají Choleského rozklad jen pro pozitivně definitní matice.

Spektrální rozklad (diagonalizace) čtvercové matice

$$A = VDV^{-1}$$

D – diagonální s vlastními čísly, V – regulární, rozklad nemusí existovat.
Vždy existuje rozklad na Jordanův kanonický tvar $A = VJV^{-1}$.

Pro hermitovskou matici existuje vždy a to dokonce tak, že V je unitární, tedy

$$A = VDV^*$$

Pokud je A navíc pozitivně semidefinitní, pak prvky D (vlastní čísla A) jsou nezáporné.

Rozklad není určen jednoznačně.

Singulární rozklad

Věta 1

Buď A libovolná matice, $r(A) = r$, $\sigma_1^2, \ldots, \sigma_r^2$ jsou kladná vlastní čísla matice A^*A. Pak existují unitární matice U, V a matice Σ, že platí

$$A = U\Sigma V^*,$$

přičemž matice Σ má tvar

$$\Sigma = \begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

kde S je diagonální matice s prvky $\sigma_1, \ldots, \sigma_r$ na diagonále.

Poznámka

Čísla $\sigma_1, \ldots, \sigma_r$ se nazývají singulární čísla matice A, software zpravidla dává $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \ldots$.

Důsledek

Nenulová vlastní čísla matic A^*A a AA^* jsou stejná.

Důkaz

$A^*A = VDV^*$, $D = diag(\lambda_1, \dots, \lambda_r, 0, \dots, 0)$, $\lambda_1, \dots, \lambda_r > 0$.
Nechť $v_1, \dots, v_n$ jsou sloupce V, $\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1}, \dots, \sigma_r = \sqrt{\lambda_r}$, tj.
$D = \begin{pmatrix} S^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = V^*A^*AV$. Pro $V = [V_1, V_2]$ platí
$V_1^*A^*AV_1 = S^2$, $V_1^*A^*AV_2 = 0$, $V_2^*A^*AV_1 = 0$, $V_2^*A^*AV_2 = 0$.
Položme

$$u_1 = \frac{1}{\sigma_1}Av_1, \dots, u_r = \frac{1}{\sigma_r}Av_r, \text{ tj. } [u_1, \dots, u_r] = AV_1S^{-1} = U_1,$$

a nechť sloupce matice U_2 tvoří ortonormální bázi $\mathcal{N}(A^*)$, tj.
$A^*U_2 = 0$, $U = [U_1, U_2]$.

Přímým výpočtem se ověří, že U je unitární a platí $U^*AV = \Sigma$.

Použití

- Výpočet pseudoinverzní matice:

$$A = U\Sigma V^* \Rightarrow A^+ = V\Sigma^+ U^*,$$

$$\Sigma^+ = \begin{pmatrix} S^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

- výpočet hodnosti matice (v Matlabu)
- výpočet spktrálního rozkladu pro pozitivně semidefinitní matice
- analýza hlavních komponent ve statistice
- ztrátová komprese obrazu (dříve)

Redukovaný singulární rozklad

$$A = U\Sigma V^*,\ \ r(A) = r,\ \ U = [U_1, U_2],\ \ V = [V_1, V_2].$$
$$A = [U_1, U_2]\begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{bmatrix} V_1^* \\ V_2^* \end{bmatrix} = U_1 S V_1^*.$$

Využití - ztrátová komprimace dat:

Použijeme $k < r$ singulárních hodnot, ostatní zanedbáme, U_k, V_k – prvních k sloupců, U_z, V_z – zbylé sloupce.

$$U = [U_k, U_z],\ \ V = [V_k, V_z].$$

$$A \approx [U_k, U_z]\begin{pmatrix} S_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{bmatrix} V_k^* \\ V_z^* \end{bmatrix} = U_k S_k V_k^*.$$

Norma matice

Věta 2
Nechť $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots$ jsou singulární čísla matice A. Pak $\|A\|_2 = \sigma_1$.
Důkaz:
Ze singulárního rozkladu máme $AV = U\Sigma$, takže po sloupcích dostáváme $Av_i = \sigma_i u_i$ a platí to i pro nulová singulární čísla. Maticová spektrální norma $\|A\|_2$ je přidružená k eukleidovské vektorové normě $\|\cdot\|_2 = \|\cdot\|$ a je definována vztahem

$$\|A\|_2 = \max_{x \neq o} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}.$$

Protože u_1 i v_1 mají normu rovnu jedné, platí s využitím předešlé rovnosti

$$\frac{\|Av_1\|}{\|v_1\|} = \frac{\|\sigma_1 u_1\|}{\|v_1\|} = \frac{\sigma_1 \|u_1\|}{\|v_1\|} = \sigma_1,$$

takže $\|A\|_2 \geq \sigma_1$.

Norma matice

Dále buď x libovolný nenulový vektor. Sloupce v_i matice V tvoří ortonormální bázi, takže $x = \sum_{i=1}^{n} c_i v_i$, $\|x\|^2 = \sum_{i=1}^{n} |c_i|^2$ a

$Ax = A \sum_{i=1}^{n} c_i v_i = \sum_{i=1}^{n} c_i A v_i = \sum_{i=1}^{n} c_i \sigma_i u_i$,

tedy $\|Ax\|^2 = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2 |c_i|^2 \leq \sum_{i=1}^{n} \sigma_1^2 |c_i|^2 = \sigma_1^2 \|x\|^2$,

tj. $\|Ax\| \leq \sigma_1 \|x\|$. Odtud

$$\frac{\|Ax\|}{\|x\|} \leq \sigma_1, \text{ celkem } \|A\|_2 = \sigma_1.$$

QR rozklad

A – regulární, $A = QR$, Q – unitární, R – horní trojúhelníková

Použití QR rozkladu:

- řešení systému lin. rovnic – větší stabilita
- převod na Hessenbergův tvar
- QR algoritmus – výpočet vlastních čísel
- metoda nejmenších čtverců
- Nejedná se o podobnost! ($A = QRQ^*$)

Gramova-Schmidtova ortogonalizace

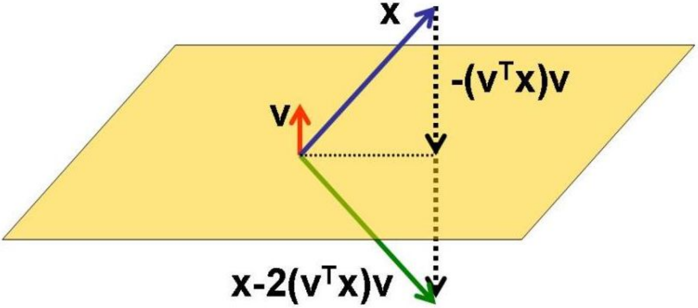
Nechť A je regulární, $a_1, \dots, a_n$ jsou její sloupce.
Vektory $a_1, \dots, a_n$ lze transformovat na ortonormální bázi $q_1, \dots, q_n$, přičemž $\mathcal{L}(a_1, \dots, a_k) = \mathcal{L}(q_1, \dots, q_k)$.

$$q_1 = \frac{1}{\|a_1\|} a_1, \quad \text{pro } k: \; z = a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (a_k, q_i) q_i, \quad q_k = \frac{1}{\|z\|} z$$

$$\begin{aligned}
a_1 &= r_{1,1} q_1 \\
a_2 &= r_{1,2} q_1 + r_{2,2} q_2 \\
a_3 &= r_{1,3} q_1 + r_{2,3} q_2 + r_{3,3} q_3 \\
&\vdots \\
\text{t.j.} \qquad & A = QR
\end{aligned}$$

Householderova transformace

Zrcadlový obraz vektoru x podle nadrovniny určené normovaným vektorem v



Householderova matice (reflexe)

$$H = H_v = I - \frac{2}{\|v\|^2} vv^* = I - \frac{2}{v^* v} vv^*$$

Householderova transformace: $x \mapsto Hx$

Vlastnosti Householderovy matice:

- H je hermitovská
- H je unitární
- Důsledek: H je sama sobě inverzí (involutory)
- $Hv = -v$, $\forall x \perp v : \ Hx = x$
- vlastní čísla jsou 1 (násobnosti $n - 1$) a -1
- $det(H) = -1$

Věta 3
Pro každý nenulový vektor x existuje vektor v, že $H_v x = ce_1$, kde $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T$.

Lemma Pro $y = Hx$ platí $(x, y) \in \mathbb{R}$.

Důkaz věty:

$|c| = \|x\|$.
Podle předchozího lemmatu $(x, ce_1) = \bar{c}x_1 \in \mathbb{R}$, tedy
$c = \pm\frac{x_1}{|x_1|}\|x\|$ pro $x_1 \neq 0$, jinak $c = \pm\|x\|$.
$v = x + ce_1$.
Maximalizace $|v_1| \Rightarrow c = \frac{x_1}{|x_1|}\|x\|$, v reálném případě
$v = x + sign(x_1)\|x\|e_1$.

Algoritmus QR rozkladu

Aplikace předchozí věty na jednotlivé sloupce matice A, Householderovu matici vkládáme do jednotkové matice.

1. krok: $A_1 = H_1 A$, H_1 transformuje první sloupec A na násobek e_1.

2. krok: $A_2 = H_2 A_1$, $H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{H}_2 \end{bmatrix}$, kde $\tilde{H}_2$ transformuje druhý sloupec A_1 od hlavní diagonály na násobek e_1 (o 1 menší rozměr než v předchozím kroku).

i-tý krok: $A_i = H_i A_{i-1}$, $H_i = \begin{bmatrix} I_{i-1} & 0 \\ 0 & \tilde{H}_i \end{bmatrix}$, kde $\tilde{H}_i$ transformuje i-tý sloupec A_{i-1} od hlavní diagonály na násobek e_1.

Postupně vynulujeme prvky pod hlavní diagonálou, počet kroků závisí na rozměrech matice. Celkem

$$R = H_k H_{k-1} \ldots H_1 A = Q^* A \Rightarrow Q = H_1^* \ldots H_k^* = H_1 \ldots H_k.$$

Převod na Hessenbergův tvar

Definice

Řekneme, že matice $T = (t_{i,j})$ je v (horním) Hessenbergově tvaru (formě), jestliže $t_{i,j} = 0$ pro $i > j + 1$. (T je „skoro“ horní trojúhelníková.)

Věta 4

Pro každou čtvercovou matici A existuje unitární matice Q a matice T v Hessenbergově tvaru, že

$$A = QTQ^*.$$

Důkaz – pomocí Householderovy transformace. Postupujeme podobně jako v algoritmu QR rozkladu, ale začínáme jeho druhým krokem a Householderovou maticí násobíme z obou stran.

Důsledek:

Pro hermitovskou matici A je T třídiagonální.

Definice

Matice A se nazývá reducibilní (rozložitelná), pokud existuje permutační matice P, že

$$PAP^T = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{pmatrix}$$

V opačném případě se nazývá ireducibilní (nerozložitelná).

Věta 5

Buď T ireducibilní matice v horním Hessenbergově tvaru. Pak všechna její vlastní čísla mají geometrickou násobnost 1.

Důkaz

Pokud je matice T řádu n v Hessenbergově tvaru a je ireducibilní, pak $\forall I$ platí $t_{i+1,i} \neq 0$. Pak pro vlastní číslo λ má matice $T - \lambda I$ prvních $n-1$ sloupců LNZ, takže má hodnost $n-1$, tudíž $\dim \mathcal{N}(T - \lambda I) = 1$

Důsledek: Třídiagonální hermitovská ireducibilní matice má všechna vlastní čísla násobnosti 1.

QR rozklad pomocí Givensova rotace

Rotace vektoru

Otočení vektoru v rovině o daný úhel ϕ (v kladném směru).

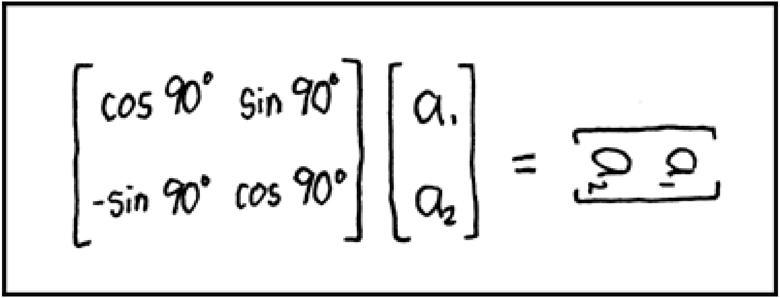
$$G_\phi = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix},$$

G_ϕ je unitární.

Příklad:

Rotace vektoru o 90° v záporném směru.

$$\begin{bmatrix} \cos\frac{\pi}{2} & \sin\frac{\pi}{2} \\ -\sin\frac{\pi}{2} & \cos\frac{\pi}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$


cos 90° sin 90°
-sin 90° cos 90°
a1
a2
=

Givensova rotace

$$\begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{a^2 + b^2} \\ c &= \frac{a}{r} \\ s &= -\frac{b}{r} \end{aligned}$$

Matici vkládáme do jednotkové matice, dostaneme $G(i, j, \phi)$:
Násobení $G(i, j, \phi)A$ vynuluje prvek v A na pozici (i, j), ale dochází k transformaci celých řádků!

$$G(i,j,\theta) = \begin{array}{cc} \begin{array}{c} \\ \\ \mathbf{j} \\ \\ \mathbf{i} \\ \\ \\ \end{array} & \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & c & \cdots & -s & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \\ & \begin{array}{ccccccc} & & \mathbf{j} & & \mathbf{i} & & \end{array} \end{array},$$

QR rozklad: postupné nulování prvků pod hlavní diagonálou

$$G \cdot A = R \Rightarrow A = G^T \cdot R \Rightarrow Q = G^T$$

Nulujeme od 1. sloupce, zpravidla od 2. řádku, ale není to nutné.

Givensova rotace pro komplexní čísla:

$$G_\phi \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c & -s \\ \bar{s} & \bar{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{|a|^2 + |b|^2} \\ c &= \frac{\bar{a}}{r} \\ s &= -\frac{\bar{b}}{r} \end{aligned}$$

QR rozklad pro singulární a obdélníkové matice

Pro singulární matici se v R objeví nuly na hlavní diagonále.
Pro $m > n$ je potřeba nulovat i poslední sloupec, matice R je ve tvaru $\begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}$, v tomto případě je $A = Q_1 R_1$, kde Q_1 je tvořena prvními n sloupci matice Q.
Pro $m < n$ je matice R ve tvaru $[R_1,\ X]$ pro horní trojúhelníkovou matici R_1.

Další vlastnosti QR rozkladu

Věta 6 (ortonormální báze $\mathcal{R}(A)$)
Nechť A je matice typu $m \times n$ s nezávislými sloupci, $A = QR$, $A = [a_1, \ldots, a_n],\ Q = [q_1, \ldots, q_m]$. Pak $\mathcal{L}(a_1, \ldots, a_k) = \mathcal{L}(q_1, \ldots, q_k)$ pro $k = 1, \ldots, n$.

Speciálně pokud Q_1 je tvořena prvními n sloupci a Q_2 zbylými sloupci, pak platí $\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(Q_1),\ \mathcal{R}^{\perp}(A) = \mathcal{R}(Q_2)$.

Matice R_1 (viz první část předchozího odstavce) je regulární.

Věta 7 (jednoznačnost QR rozkladu)
Nechť A je matice typu $m \times n$ s nezávislými sloupci. Pak matice R a prvních n sloupců matice Q rozkladu jsou určeny jednoznačně až na násobení komplexními jednotkami řádků R, resp. jejích inverzemi odpovídajících sloupců Q.

Důkaz: Nechť

$$A = Q_1 R_1 = [Q_{11}, Q_{12}] \begin{bmatrix} R_{11} \\ 0 \end{bmatrix} = Q_2 R_2 = [Q_{21}, Q_{22}] \begin{bmatrix} R_{21} \\ 0 \end{bmatrix},$$

tedy $A = Q_{11} R_{11} = Q_{21} R_{21}$, přičemž R_{11} i R_{21} jsou regulární.
Odtud $Q_{11}^* Q_{21} = R_{11} R_{21}^{-1}$ a $Q_{21}^* Q_{11} = R_{21} R_{11}^{-1}$, ale tyto matice jsou horní trojúhelníkové a vzájemně hermitovsky sdružené, jejich součin je jednotková matice, takže jsou to unitární diagonální vzájemně inverzní matice.
Celkem $R_{11} = D R_{21}$ pro diagonální D s komplexními jednotkami na diagonále a
$A = Q_{21} R_{21} = Q_{21} D^* D R_{21} = Q_{21} D^* R_{11} \Rightarrow Q_{11} = Q_{21} D^*$.

QR rozklad a MNČ

Unitární transformace nemění normu, takže minimalizace $\|Ax - b\|^2$ je ekvivalentní minimalizaci $\|UAx - Ub\|^2$ pro libovolnou unitární matici U.

Buď A matice s nezávislými sloupci, $A = QR = Q \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}$.

Pro $U = Q^*$ máme $Q^*A = \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}$, přičemž R_1 je regulární.

Položme $Q^*b = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}$. Pak

$$\|Ax - b\|^2 = \|Q^*Ax - Q^*b\|^2 = \|R_1x - c\|^2 + \|d\|^2.$$

Odtud je zřejmé, že vektor x, který minimalizuje tento výraz, je řešením soustavy $R_1x = c$ s regulární maticí R_1.

QR rozklad s výběrem vedoucích sloupců

Pokud A nemá nezávislé sloupce, nemusí platit, že prvních n sloupců Q tvoří ortonormální bázi $\mathcal{R}(A)$. Např. pro

$A = [a_1, a_2, a_3] = QR = [q_1, q_2, q_3] \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ dostaneme

$a_1 = a_2 = q_1$, $a_3 = q_1 + q_2 + q_3$, takže žádné dva sloupce Q netvoří bázi $\mathcal{R}(A)$.

Řešení: změna pořadí sloupců A – násobení permutační maticí. Pro $r(A) = r$ najdeme permutační matici P, aby prvních r sloupců AP bylo LNZ. Pak

$$AP = QR = Q \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

pro R_{11} typu $r \times r$, čtvercovou a regulární. Snadno se ukáže, že prvních r sloupců Q tvoří bázi $\mathcal{R}(A)$.

Algoritmus

1. krok:

Najdeme v A sloupec s maximální normou a vyměníme jej s prvním sloupcem. Tím získáme matici AP_1, u které provedeme 1. krok QR rozkladu pomocí Householderovy matice H_1. Dostaneme

$R^{(1)} = H_1 A P_1 = \begin{bmatrix} R_{11}^{(1)} & R_{12}^{(1)} \\ 0 & R_{22}^{(1)} \end{bmatrix}$, kde $R_{11}^{(1)}$ je řádu 1. Pokud $R_{22}^{(1)} = 0$ $(r(A) = 1)$, algoritmus končí, jinak následuje další krok.

i-tý krok:

Máme $R^{(i-1)} = H_{i-1} \dots H_1 A P_1 \dots P_{i-1} = \begin{bmatrix} R_{11}^{(i-1)} & R_{12}^{(i-1)} \\ 0 & R_{22}^{(i-1)} \end{bmatrix}$.

V $R_{22}^{(i-1)}$ najdeme sloupec s maximální normou a vyměníme tento sloupec s i-tým sloupcem v $R^{(i-1)}$. Na výslednou matici $R^{(i-1)} P_i$ aplikujeme i-tý krok QR rozkladu pomocí Householderovy matice, čímž dostaneme $H_i R^{(i-1)} P_i = R^{(i)} = \begin{bmatrix} R_{11}^{(i)} & R_{12}^{(i)} \\ 0 & R_{22}^{(i)} \end{bmatrix}$. Pokud $R_{22}^{(i)} = 0$ $(r(A) = i)$, algoritmus končí, jinak pokračujeme dál.

Celkem vyjde

$$H_k \dots H_1 A P_1 \dots P_k = Q^* A P = R = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Navíc prvky na hlavní diagonále v R jsou seřazeny podle velikosti (od největšího v absolutní hodnotě).