Metody numeryczne I

Dodatek: Rozkład macierzy na wartości osobliwe

Janusz Szwabiński

`szwabin@ift.uni.wroc.pl`

Rozkład macierzy na wartości osobliwe

Twierdzenie Jeśli $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, to istnieją macierze ortogonalne $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ i $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ takie, że

$$\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{V} = \mathbf{\Sigma} = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_p) \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad p = \min\{n, m\},$$

przy czym

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \sigma_p \geq 0.$$

$m \leq n$

$$\mathbf{\Sigma} = \left(\begin{array}{ccc|c} \sigma_1 & & 0 & \\ & \ddots & & 0 \\ 0 & & \sigma_p & \end{array}\right)$$

$m \geq n$

$$\mathbf{\Sigma} = \left(\begin{array}{ccc} \sigma_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma_p \\ \hline & 0 & \end{array}\right)$$

Jeśli

$$\begin{aligned} \mathbf{U} &= [u_1, \ldots, u_m] \in \mathbb{R}^{m\times m} \\ \mathbf{V} &= [v_1, \ldots, v_n] \in \mathbb{R}^{n\times n} \end{aligned}$$

to

$$\begin{aligned} \mathbf{A}v_i &= \sigma_i u_i \\ \mathbf{A}^{\mathrm{T}}u_i &= \sigma_i v_i, \quad i = 1, \ldots, \min\{m, n\} \end{aligned}$$

czyli

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}v_i &= \sigma_i^2 v_i \\ \mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}u_i &= \sigma_i^2 u_i \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ wartości osobliwe σ_i, $i = 1, \ldots, \min\{m, n\}$ są pierwiastkami kwadratowymi wartości własnych macierzy $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$ (lub $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$)

Zastosowania

- macierze osobliwe
- macierze numerycznie prawie osobliwe
- układy równań, w których równań jest więcej niż zmiennych

Macierz odwrotna

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{-1} &= (\mathbf{U\Sigma V}^{\mathrm{T}})^{-1} \\ &= (\mathbf{V}^{\mathrm{T}})^{-1}\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{U}^{-1} \\ &= \mathbf{V\Sigma}^{-1}\mathbf{U}^{-1} \end{aligned}$$

Przy tym

$$\mathbf{\Sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{\sigma_n} \end{pmatrix}$$

Układy równań liniowych

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}x &= b \\ x &= \mathbf{A}^{-1}b = \mathbf{V\Sigma}^{-1}\mathbf{U}^{\mathrm{T}}b \end{aligned}$$

Przy tym

$$\mathbf{\Sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma'_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma'_n \end{pmatrix}$$

$$\sigma'_i = \begin{cases} \frac{1}{\sigma_i}, & \sigma_i \geq \epsilon \\ 0, & \sigma_i < \epsilon, \quad \epsilon \text{ - „bariera” osobliwości} \end{cases}$$

Jeśli macierz $\mathbf{A}$ jest osobliwa

- układ nie ma rozwiązań, ale ...
- zastępując odpowiednie wartości osobliwe przez zero, otrzymujemy x, które minimalizuje

$$\|\mathbf{A}x - b\|_2$$

Przykład

Szukamy SVD macierzy

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3\times 2}$$

W tym celu obliczamy najpierw wartości własne macierzy $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$

$$\lambda_1 = 3, \quad \lambda_2 = 1$$

Odpowiednie wektory własne mają postać

$$v_1 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$$

Stąd

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Szukamy kolumn macierzy $\mathbf{U}$

$$u_1 = \sigma_1^{-1}\mathbf{A}v_1 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{6}}{3} \\ \frac{\sqrt{6}}{6} \\ \frac{\sqrt{6}}{6} \end{pmatrix}, \quad u_2 = \sigma_2^{-1}\mathbf{A}v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$$

Aby znaleźć trzecią kolumnę, stosujemy metodę ortonormalizacji Grama-Schmidta. W tym celu szukamy najpierw wektora $\hat{u}_3$, prostopadłego do u_1 i u_2:

$$\hat{u}_3 = e_1 - \left(u_1^{\mathrm{T}}e_1\right)u_1 - \left(u_1^{\mathrm{T}}e_2\right)u_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

Normując ten wektor, uzyskamy

$$u_3 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{3} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix}$$

czyli

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{6}}{3} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{\sqrt{6}}{6} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{\sqrt{6}}{6} & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$$