

Inversio-ongelmien laskennallinen peruskurssi

Luento 3

Kevät 2012

1 Singulaariarvohajotelma (Singular Value Decomposition, SVD)

Olkoon $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matriisi¹. Tällöin A voidaan esittää muodossa

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

missä $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ on ortogonaalinen (kompleksitapauksessa unitaarinen), eli $UU^T = U^T U = I$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$ on ortogonaalinen ja $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ on diagonaalinen siten, että sen diagonaalelementit ovat ei-negatiivisia. Toisin sanoen

$$\Sigma = \begin{cases} \sigma_{ii} & \geq 0, \quad i = 1, 2, \dots, \min(m, n) \\ 0 & \text{muulloin.} \end{cases}$$

Tätä hajotelmaa kutsutaan matriisin A singulaariarvohajotelmaksi ja matriisin Σ diagonaalialkioita σ_{ii} matriisin A singulaariarvoiksi.

Lineaarisen yhtälöryhmän

$$m = Ax,$$

$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \in \mathbb{R}^m$, $x \in \mathbb{R}^n$ ratkaisu voidaan esittää SVD:n avulla muodossa

$$x = x_0 + \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \frac{1}{\sigma_i} \langle m, u_i \rangle v_i,$$

¹Singulaarihajotelma on voimassa myös kompleksisille matriiseille. Tällöin transpoosi korvataan konjugaattitranspoosilla $A^* = \overline{A}^T$

missä $x_0 \in \ker(A)$ on mielivaltainen matriisin A ytimen alkio, σ_i ovat A :n singulaariarvot ja vektorit u_i sekä v_i ovat matriisien U ja V i:nnet sarakevektorit. Jos matriisi A on kääntyvä, niin tämä voidaan kirjoittaa matriisimuodossa

$$x = V\Sigma^{-1}U^T.$$

Myös matriisin A pseudoinverssi voidaan lausua SVD:n avulla:

$$M^+ = V\Sigma^+U^T,$$

missä Σ^+ on matriisin Σ pseudoinverssi, joka muodostetaan korvaamalla jokainen Σ :n nollasta eroava alkio käänteisluvullaan ja transponoimalla. Esimerkiksi, jos

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

niin

$$\Sigma^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix}.$$

MATLAB-ohjelmistossa singulaariarvohajotelma voidaan laskea funktiolla `svd`:

$$[U,S,V] = \text{svd}(A).$$

Huomautus 1.1. Numeerisissa sovelluksissa lähellä nollaa olevat singulaariarvot yleensä asetetaan nolliksi pyöristysvirheiden välttämiseksi. Esimerkiksi MATLAB käyttää pseudoinverssin lakevassa funktiossa `pinv` oletustoleranssina arvoa

$$\text{TOL} = \text{MAX}(\text{SIZE}(A)) * \text{NORM}(A) * \text{EPS}(\text{CLASS}(A)).$$

Voihtoehtoisesti voi käyttää muotoa `pinv(A,TOL)`, missä `TOL` on haluttu toleranssi.

Huomautus 1.2. Jos matriisin Σ diagonaalilla on nolla-alkioita ($\text{rank}(A) < \min(m, n)$), voidaan singulaariarvohajotelma esittää muodossa

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} U_1 & U_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1^T \\ V_2^T \end{bmatrix} \\ &= U_1 \Sigma_1 V_1^T, \end{aligned}$$

missä $\Sigma_1 \in \mathbb{R}^{k \times k}$, $k = \text{rank}(A)$, $U_1 \in \mathbb{R}^{m \times k}$, $U_2 \in \mathbb{R}^{m \times (m-k)}$, $V_1^T \in \mathbb{R}^{k \times n}$ ja $V_2^T \in \mathbb{R}^{(n-k) \times n}$. Tällöin

$$A^+ = V_1 \Sigma_1^+ U_1^T.$$

2 Pseudoinverssi käyttäen QR-hajotelmaa

Määritelmä 2.1. Olkoon $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$. Tällöin se voidaan esittää muodossa

$$A = Q \begin{bmatrix} R \\ 0_R \end{bmatrix},$$

missä $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ on ortogonaalinen (unitaarinen), $R \in \mathbb{R}^{k \times n}$, $k = \text{rank}(A)$, on yläkolmiomatriisi, jonka diagonaalelementit ovat ei-negatiivisia, ja $0_R \in \mathbb{R}^{(m-k) \times n}$ on nollamatriisi. Tätä hajotelmaa kutsutaan matriisin A QR-hajotelmaksi. MATLABilla matriisin QR-hajotelma voidaan laskea käskyllä

$$[Q, R] = \text{qr}(A).$$

Jos matriisi $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ on kääntyvä, niin sen QR-hajotelma on muotoa

$$A = QR.$$

Tällöin ongelma

$$m = Ax$$

voidaan ratkaista numeerisesti helposti käyttämällä takaisinsijoitusta yhtälölle

$$Rx = Q^T m,$$

jolloin matriisin R käänteismatriisia ei tarvitse eksplisiittisesti laskea.

Matriisin A pseudoinverssi voidaan lausua QR-hajotelman avulla seuraavasti: jos

$$A = Q \begin{bmatrix} R \\ 0_R \end{bmatrix},$$

niin

$$A^+ = \begin{bmatrix} R^+ & 0_R^T \end{bmatrix} Q^T,$$

missä $R^+ \in \mathbb{R}^{n \times k}$ on matriisin R pseudoinverssi ja $0_R^T \in \mathbb{R}^{n \times (m-k)}$ on nollamatriisi. Huomaa, että nyt matriisi RR^T on kääntyvä, joten eräs tapa laskea R^+ on käyttää kaavaa

$$R^+ = R^T (RR^T)^{-1}.$$

Huomautus 2.2. Kaavassa

$$A^+ = \begin{bmatrix} R^+ & 0_R^T \end{bmatrix} Q^T$$

voidaan matriisi Q^T jakaa osiin

$$Q^T = \begin{bmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \end{bmatrix},$$

missä $Q_1^T \in \mathbb{R}^{k \times m}$ ja $Q_2^T \in \mathbb{R}^{(m-k) \times m}$. Tällöin

$$A^+ = \begin{bmatrix} R^+ & 0_R^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \end{bmatrix} = R^+ Q_1^T.$$