Numerička analiza
25. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD):
  - Osnovna svojstva.
  - Primjena SVD-a na metodu najmanjih kvadrata.
  - Računanje SVD-a.
    - Bidijagonalni QR algoritam.
    - Jacobijev algoritam.
    - Diferencijalni qd algoritam.

Dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD)

Osnovni teorem

Jedna od najkorisnijih dekompozicija

- i s teoretske strane (za dokazivanje činjenica)
- i s praktične strane,

je dekompozicija singularnih vrijednosti (engl. singular value decomposition) ili, skraćeno, SVD.

Sljedeći teorem pokazuje da za svaku matricu postoji njezina dekompozicija singularnih vrijednosti.

Osnovni teorem

Teorem. Neka je A proizvoljna matrica tipa $m \times n$, uz $m \geq n$. A se može dekomponirati kao

$$A = \widehat{U} \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^* = U \Sigma V^*,$$

gdje je $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$, uz $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_n \geq 0$, $\widehat{U} = [U, U_0]$ je unitarna matrica reda m, a V je unitarna matrica reda n.

Stupce matrice

- U (oznaka u_i) zovemo lijevi singularni vektori,
- V (oznaka v_i) zovemo desni singularni vektori,

a dijagonalne elemente σ_i matrice Σ singularne vrijednosti.

Osnovni teorem — komentari

Nadalje, ako je

- $m < n$, dekompozicija singularnih vrijednosti definira se za matricu A^*;
- A realna, U i V su, također, realne.

Ako o matrici A razmišljamo kao zapisu operatora koji preslikava vektor $x \in \mathbb{R}^n$ u vektor $y = Ax \in \mathbb{R}^m$, onda

- možemo izabrati ortogonalni koordinatni sustav u $\mathbb{R}^n$ (osi su mu jedinični vektori stupci u V),
- i drugi ortogonalni koordinatni sustav u $\mathbb{R}^m$ (osi su mu jedinični vektori stupci u U),

takve da je zapis tog operatora u tom paru baza dijagonalna matrica Σ (s nenegativnom dijagonalom).

Dokaz teorema

Dokaz. Dokaz se provodi indukcijom po m i n.

Iz pretpostavke o postojanju SVD-a za $(m-1) \times (n-1)$ matrice, dokazat ćemo postojanje SVD-a i za $m \times n$ matrice.

Dodatno, pretpostavljamo da je $A \neq 0$. U protivnom je $\Sigma = 0$, a U i V su proizvoljne unitarne matrice, tj. tvrdnja vrijedi.

Baza indukcije je za $n = 1$, jer je $m \geq n$. Napišimo tu jednostupčanu matricu A u obliku

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

gdje je

$$U = \frac{A}{\|A\|_2}, \quad \Sigma = \|A\|_2, \quad V = 1,$$

pa tvrdnja vrijedi za $n = 1$ i bilo koji $m \geq 1$.

Dokaz teorema

Za korak indukcije, izaberemo vektor v, takav da je $\|v\|_2 = 1$ i na njemu se baš dostiže maksimum 2-norme za A, tj. vrijedi

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \|Av\|_2.$$

Definiramo jedinični vektor

$$u = \frac{Av}{\|Av\|_2}.$$

Vektore u i v dopunimo matricama $\widetilde{U}$, odnosno $\widetilde{V}$, tako da

$$U_0 = [u, \widetilde{U}], \quad V_0 = [v, \widetilde{V}]$$

budu unitarne matrice reda m, odnosno n.

Dokaz teorema

Sada možemo pisati

$$U_0^* A V_0 = \begin{bmatrix} u^* \\ \widetilde{U}^* \end{bmatrix} A \, [v, \widetilde{V}] = \begin{bmatrix} u^* A v & u^* A \widetilde{V} \\ \widetilde{U}^* A v & \widetilde{U}^* A \widetilde{V} \end{bmatrix}.$$

Po definiciji vektora u i v, vrijedi

$$u^* A v = \frac{v^* A^*}{\|Av\|_2} A v = \frac{\|Av\|_2^2}{\|Av\|_2} = \|Av\|_2 = \|A\|_2 := \sigma.$$

Zbog ortogonalnosti stupaca unitarne matrice U_0, svi stupci matrice $\widetilde{U}$ su okomiti na vektor u, pa je $\widetilde{U}^* u = 0$. Onda je i

$$\widetilde{U}^* A v = \widetilde{U}^* u \|Av\|_2 = 0.$$

Dokaz teorema

Tvrdimo i da je $u^* A\widetilde{V} = 0$. Ako označimo s $A_1 = U_0^* A V_0$, $w^* = u^* A\widetilde{V}$, $B = \widetilde{U}^* A\widetilde{V}$, onda je

$$A_1 = U_0^* A V_0 = \begin{bmatrix} \sigma & w^* \\ 0 & B \end{bmatrix}.$$

Zbog unitarne invarijantnosti 2-norme je

$$\sigma = \|A\|_2 = \|U_0^* A V_0\|_2 = \|A_1\|_2.$$

S druge strane, za proizvoljni vektor $z \neq 0$ vrijedi

$$\|A_1\|_2 = \max_{x \neq 0} \frac{\|A_1 x\|_2}{\|x\|_2} \geq \frac{\|A_1 z\|_2}{\|z\|_2},$$

Dokaz teorema

odnosno, $\|A_1\|_2 \|z\|_2 \geq \|A_1 z\|_2$. Izaberimo

$$z = \begin{bmatrix} \sigma \\ w \end{bmatrix}.$$

Onda je

$$\|A_1\|_2^2 \|z\|_2^2 = \|A_1\|_2^2 (\sigma^2 + \|w\|_2^2) \geq \|A_1 z\|_2^2 = \left\| A_1 \begin{bmatrix} \sigma \\ w \end{bmatrix} \right\|_2^2$$

$$= \left\| \begin{bmatrix} \sigma & w^* \\ 0 & B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma \\ w \end{bmatrix} \right\|_2^2 = (\sigma^2 + w^* w)^2 + \|Bw\|_2^2$$

$$\geq (\sigma^2 + \|w\|_2^2)^2,$$

Dokaz teorema

pa vidimo da je

$$\|A_1\|_2^2(\sigma^2 + \|w\|_2^2) \geq (\sigma^2 + \|w\|_2^2)^2.$$

Dijeljenjem s $(\sigma^2 + \|w\|_2^2)$ dobivamo

$$\sigma^2 = \|A\|_2^2 = \|A_1\|_2^2 \geq \sigma^2 + \|w\|_2^2,$$

što je moguće samo za $w = 0$.

Drugim riječima, vrijedi

$$U_0^* A V_0 = \begin{bmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix}.$$

Dokaz teorema

Sada možemo iskoristiti pretpostavku indukcije na matricu B, da B ima SVD

$$B = U_1 \Sigma_1 V_1^*,$$

pa dobivamo

$$U_0^* A V_0 = \begin{bmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & U_1 \Sigma_1 V_1^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \Sigma_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & V_1 \end{bmatrix}^*,$$

odakle odmah slijedi tvrdnja, jer unitarne matrice čine multiplikativnu grupu.

Ako želimo biti potpuno precizni, treba još silazno poredati singularne vrijednosti. To se postiže primjenom matrica permutacije, koje su, također, unitarne. ■

Svojstva SVD-a

Dokažimo još i neka svojstva SVD-a.

Neka je $A = U\Sigma V^T$ dekompozicija singularnih vrijednosti (SVD) realne matrice A tipa $m \times n$, uz $m \geq n$.

Tvrdnja 1. Ako je A simetrična matrica reda n sa svojstvenim vrijednostima λ_i i ortonormalnim svojstvenim vektorima u_i, tj. ako je svojstvena dekompozicija za A oblika

$$A = U\Lambda U^T, \quad \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n), \quad U = [u_1, \ldots, u_n],$$

onda SVD matrice A ima oblik

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

gdje je $\sigma_i = |\lambda_i|$ i $v_i = \mathrm{sign}(\lambda_i) u_i$, uz dogovor da je $\mathrm{sign}(0) = 1$.

Svojstva SVD-a

Dokaz. Očito, da bismo dobili singularne vrijednosti matrice A, moramo samo izvući predznake svojstvenih vrijednosti. ■

Tvrdnja 2. Svojstvene vrijednosti simetrične matrice $A^T A$ su σ_i^2. Desni singularni vektori v_i su pripadni svojstveni vektori.

Dokaz. Vrijedi

$$A^T A = V \Sigma^T U^T U \Sigma V^T = V \Sigma^2 V^T,$$

i to je svojstvena dekompozicija od $A^T A$. ■

Svojstva SVD-a

Tvrdnja 3. Svojstvene vrijednosti matrice AA^T su:

- σ_i^2
- i još $m - n$ njih, koje su jednake nula.

Svojstveni vektori matrice AA^T su:

- lijevi singularni vektori u_i, za svojstvene vrijednosti σ_i^2;
- za preostalih $m - n$ svojstvenih vrijednosti jednakih nula, kao svojstvene vektore možemo uzeti bilo kojih $m - n$ vektora koji s prethodnima čine ortogonalnu matricu (dopuna do ortonormirane baze).

Svojstva SVD-a

Dokaz. Uzmemo puni SVD od A, s kvadratnom matricom $\widehat{U}$:

$$AA^T = \widehat{U} \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^T V \, [\Sigma^T, 0] \, \widehat{U}^T = \widehat{U} \begin{bmatrix} \Sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \widehat{U}^T$$

$$= [U, U_0] \begin{bmatrix} \Sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} [U, U_0]^T,$$

što je svojstvena dekompozicija od AA^T. ■

Svojstva SVD-a

Tvrdnja 4. Neka je A kvadratna matrica reda n, i neka je $A = U\Sigma V^T$ dekompozicija singularnih vrijednosti od A, uz

$$\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_n), \quad U = [u_1, \ldots, u_n], \quad V = [v_1, \ldots, v_n].$$

Neka je

$$H = \begin{bmatrix} 0 & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix}.$$

Svojstvene vrijednosti od H su $\pm\sigma_i$, a pripadni svojstveni vektori su

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} v_i \\ \pm u_i \end{bmatrix}.$$

Svojstva SVD-a

Dokaz. Uvrstimo SVD od A u formulu za H. Onda je

$$H = \begin{bmatrix} 0 & A^T \\ A & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & V\Sigma U^T \\ U\Sigma V^T & 0 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & V \\ U & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \Sigma \\ \Sigma & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & U^T \\ V^T & 0 \end{bmatrix}.$$

Lako se provjerava da je matrica

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} I & I \\ -I & I \end{bmatrix}$$

ortogonalna ...

Svojstva SVD-a

… i da vrijedi

$$Q \begin{bmatrix} 0 & \Sigma \\ \Sigma & 0 \end{bmatrix} Q^T = \begin{bmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & -\Sigma \end{bmatrix}.$$

Konačno, zaključujemo da je

$$H = \begin{bmatrix} 0 & V \\ U & 0 \end{bmatrix} Q^T Q \begin{bmatrix} 0 & \Sigma \\ \Sigma & 0 \end{bmatrix} Q^T Q \begin{bmatrix} 0 & U^T \\ V^T & 0 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} V & V \\ U & -U \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & -\Sigma \end{bmatrix} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} V & V \\ U & -U \end{bmatrix} \right)^T,$$

što je svojstvena dekompozicija od H. ■

SVD — rješenje problema najmanjih kvadrata

Tvrdnja 5. Ako A ima puni rang, onda je rješenje problema najmanjih kvadrata

$$\min_x \|Ax - b\|_2$$

jednako $x = V\Sigma^{-1}U^T b$, tj. dobiva se

- primjenom "invertiranog" skraćenog SVD-a od A na b.

Dokaz. Vrijedi

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|U\Sigma V^T x - b\|_2^2.$$

Budući da je A punog ranga, to je i Σ.

SVD — rješenje problema najmanjih kvadrata

Zbog unitarne invarijantnosti 2-norme, vrijedi

$$\|U\Sigma V^T x - b\|_2^2 = \|\widehat{U}^T(U\Sigma V^T x - b)\|_2^2$$

$$= \left\| \begin{bmatrix} U^T \\ U_0^T \end{bmatrix} (U\Sigma V^T x - b) \right\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} \Sigma V^T x - U^T b \\ -U_0^T b \end{bmatrix} \right\|_2^2$$

$$= \|\Sigma V^T x - U^T b\|_2^2 + \|U_0^T b\|_2^2.$$

Taj izraz je minimalan ako je prvi član jednak 0, tj. ako je

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

Pripadna vrijednost minimuma je $\min\limits_x \|Ax - b\|_2 = \|U_0^T b\|_2$. ■

SVD — norme i broj uvjetovanosti matrice

Tvrdnja 6. Neka je A kvadratna matrica reda n i pretpostavimo da je A nesingularna. Ako je σ_1 najveća, a σ_n najmanja singularna vrijednost od A, onda je

$$\|A\|_2 = \sigma_1, \quad \|A^{-1}\|_2^{-1} = \sigma_n, \quad \kappa_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}.$$

Dokaz. Zbog unitarne invarijantnosti 2-norme, vrijedi

$$\|A\|_2 = \|U^T A V\|_2 = \|\Sigma\|_2 = \sigma_1,$$

$$\|A^{-1}\|_2 = \|U^T A^{-1} V\|_2 = \|\Sigma^{-1}\|_2 = \sigma_n^{-1},$$

odakle odmah slijedi i formula za $\kappa_2(A)$. ∎

SVD — nul-potprostor i slika matrice

Tvrdnja 7. Pretpostavimo da za singularne vrijednosti matrice A vrijedi

$$\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_n = 0.$$

Tada (i samo tada) je $\operatorname{rang}(A) = r$.

- Nul-potprostor od A, tj. potprostor svih vektora v za koje je $Av = 0$, je potprostor razapet sa stupcima $v_{r+1}, \ldots, v_n$ matrice V.
- Slika operatora A, tj. potprostor svih vektora oblika Aw, za sve w, razapet je stupcima $u_1, \ldots, u_r$ od U.

Dokaz. Napišimo SVD od A korištenjem kvadratnih matrica $\widehat{U}$ i V. Budući da su obje ortogonalne, one su nesingularne, pa je $\operatorname{rang}(A) = \operatorname{rang}(\Sigma) = r$.

SVD — nul-potprostor i slika matrice

Vektor v je u nul-potprostoru od A, ako i samo ako je $V^T v$ u nul-potprostoru od

$$\widehat{U}^T A V = \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} := \widetilde{\Sigma},$$

jer je $Av = 0$, ako i samo ako je $\widehat{U}^T A V (V^T v) = 0$.

- Nul-potprostor matrice $\widetilde{\Sigma}$ je razapet stupcima $(r+1)$ do n jedinične matrice I_n,
- pa je nul-potprostor od A razapet sa stupcima $(r+1)$ do n matrice V.

Sličan argument vrijedi i za drugi dio dokaza. ∎

SVD — slika jedinične sfere

Tvrdnja 8. Neka je S^{n-1} jedinična sfera u $\mathbb{R}^n$,

$$S^{n-1} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \|x\|_2 = 1\}.$$

Neka je $A \cdot S^{n-1}$ slika od S^{n-1}, kad se jedinična sfera preslika operatorom A,

$$A \cdot S^{n-1} = \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n, \ \|x\|_2 = 1\}.$$

Ta slika $A \cdot S^{n-1}$ je

- elipsoid sa središtem u ishodištu od $\mathbb{R}^m$
- i glavnim osima $\sigma_i u_i$, za $i = 1, \ldots, m$.

SVD — nul-potprostor i slika matrice

Dokaz. Pretpostavimo da je A kvadratna i nesingularna.

- Matrica V^T je ortogonalna, pa ona preslikava jedinične vektore u druge jedinične vektore, tj. $V^T S^{n-1} = S^{n-1}$.
- Budući da je $v \in S^{n-1}$, ako i samo ako je $\|v\|_2 = 1$, onda je $w \in \Sigma S^{n-1}$, ako i samo ako je $\|\Sigma^{-1} w\|_2 = 1$, ili

$$\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{w_i}{\sigma_i} \right)^2 = 1.$$

Time je definiran elipsoid s glavnim osima $\sigma_i e_i$. Množenjem $w = \Sigma v$ matricom U, elipsoid se rotira oko ishodišta, tako da se e_i preslika u u_i. Dobiveni elipsoid ima glavne osi $\sigma_i u_i$.

Argument vrijedi i za $m \geq n$, i kad je $\operatorname{rang}(A) = r \leq n$. ■

SVD — aproksimacija matricom nižeg ranga

Tvrdnja 9. Zapišimo matrice U i V iz SVD-a od A u stupčanom obliku $U = [u_1, \ldots, u_n]$ i $V = [v_1, \ldots, v_n]$. Matricu A možemo zapisati i kao zbroj matrica ranga 1 (tipa $m \times n$)

$$A = U\Sigma V^T = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i u_i v_i^T.$$

Matricu A_k, istog tipa kao i A, ranga $\operatorname{rang}(A_k) \leq k < n$, koja je po 2-normi najbliža matrici A, možemo zapisati kao

$$A_k = U\Sigma_k V^T = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^T,$$

pri čemu je $\Sigma_k = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_k, 0, \ldots, 0)$.

SVD — aproksimacija matricom nižeg ranga

Pritom je

$$\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$$

najmanja udaljenost između A i svih matrica ranga najviše k.

Dokaz. Prema konstrukciji, matrica A_k ima rang najviše k (zbog $\sigma_k \geq 0$) i vrijedi

$$\|A - A_k\|_2 = \left\| \sum_{i=k+1}^{n} \sigma_i u_i v_i^T \right\|_2$$

$$= \|U \operatorname{diag}(0, \ldots, 0, \sigma_{k+1}, \ldots, \sigma_n) V^T\|_2 = \sigma_{k+1}.$$

Ostaje pokazati da je to i najbliža matrica ranga najviše k matrici A.

SVD — aproksimacija matricom nižeg ranga

Neka je B bilo koja matrica istog tipa $m \times n$, za koju vrijedi $\mathrm{rang}(B) \leq k$.

- Njezin nul-potprostor ima dimenziju barem $n - k$.
- Potprostor razapet vektorima $v_1, \ldots, v_{k+1}$ ima dimenziju $k + 1$, pa sigurno postoji netrivijalni vektor koji se nalazi u njegovom presjeku s nul-potprostorom od B.

Neka je h pripadni jedinični vektor koji se nalazi u presjeku ta dva potprostora. Onda je $Bh = 0$ i vrijedi

$$\begin{aligned} \|A - B\|_2 &\geq \|(A - B)h\|_2 = \|Ah\|_2 = \|U\Sigma V^T h\|_2 \\ &= \|\Sigma V^T h\|_2 \geq \sigma_{k+1} \|V^T h\|_2 = \sigma_{k+1}. \end{aligned}$$

Zadnja nejednakost je posljedica pretpostavke da je h linearna kombinacija vektora $v_1, \ldots, v_{k+1}$. ■

Metoda najmanjih kvadrata i generalizirani inverz matrice

Generalizirani inverz

Jedna od primjena SVD-a je u metodi najmanjih kvadrata i kad A nema puni stupčani rang.

- Rješenja su istog oblika kao i prije (samo ih je više),

$$x = V \text{``}\Sigma^{-1}\text{''} U^T b,$$

  jedino treba znati "invertirati" singularnu matricu Σ.

- Takav inverz zove se generalizirani inverz i označava se sa Σ^+, ili $\Sigma^\dagger$.

Generalizirani inverz poopćava pojam inverza

- na pravokutne matrice
- i na matrice koje nisu punog ranga.

Generalizirani inverz — definicije

Postoje tri ekvivalentne definicije generaliziranog inverza, koji se katkad zove i Moore–Penroseov inverz.

Funkcijska definicija. Neka je $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ i neka je linearna transformacija $\widetilde{A}^+ : \mathbb{C}^m \to \mathbb{C}^n$ definirana s

$$\widetilde{A}^+ x = \begin{cases} 0, & \text{ako je } x \in \mathcal{R}(A)^\perp \\ (\widetilde{A}\,|_{\mathcal{R}(A^*)})^{-1} x, & \text{ako je } x \in \mathcal{R}(A). \end{cases}$$

Matrica linearne transformacije $\widetilde{A}^+$, u oznaci A^+, zove se generalizirani inverz matrice A.

Generalizirani inverz — definicije

Mooreova definicija (1935.). Ako je $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, njezin generalizirani inverz je jedinstvena matrica A^+, takva da je

$$AA^+ = P_{\mathcal{R}(A)} \quad \text{i} \quad A^+A = P_{\mathcal{R}(A^+)},$$

pri čemu je s P_X označen projektor na potprostor X.

Penroseova definicija (1955.). Ako je $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, njezin generalizirani inverz je jedinstvena matrica A^+, takva da je

$$\begin{aligned} AA^+A &= A, & A^+AA^+ &= A^+, \\ (AA^+)^* &= AA^+, & (A^+A)^* &= A^+A. \end{aligned}$$

U sva tri slučaja, jedinstvenost se lako dokazuje.

Generalizirani inverz dijagonalne matrice

Nije teško pokazati da je za dijagonalnu matricu Σ,

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

pri čemu je Σ_1 regularna, njezin generalizirani inverz jednak

$$\Sigma^+ = \begin{bmatrix} \Sigma_1^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Problem najmanjih kvadrata

Teorem. Za matricu A ranga $r < n$, rješenje x koje minimizira $\|Ax - b\|_2$ može se karakterizirati na sljedeći način.

Neka je $A = U\Sigma V^T$ dekompozicija singularnih vrijednosti matrice A, i neka je

$$A = U\Sigma V^T = [U_1, U_2] \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} [V_1, V_2]^T = U_1 \Sigma_1 V_1^T,$$

gdje je Σ_1 nesingularna, reda r, a matrice U_1 i V_1 imaju r stupaca. Neka je

$$\sigma := \sigma_{\min}(\Sigma_1),$$

najmanja ne-nula singularna vrijednost od A.

Problem najmanjih kvadrata

Tada se sva rješenja problema najmanjih kvadrata mogu napisati u formi

$$x = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b + V_2 z,$$

gdje je z proizvoljni vektor.

Rješenje x koje ima minimalnu 2-normu je ono za koje je $z = 0$, tj.

$$x = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b.$$

Dodatno, za normu tog rješenja vrijedi ocjena

$$\|x\|_2 \leq \frac{\|b\|_2}{\sigma}.$$

Problem najmanjih kvadrata

Dokaz. Nadopunimo matricu $[U_1, U_2]$ stupcima matrice U_3 do ortogonalne matrice reda m, i označimo tu matricu s $\widehat{U}$. Zbog unitarne invarijantnosti 2-norme, dobivamo

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|\widehat{U}^T(Ax - b)\|_2^2$$

$$= \left\| \begin{bmatrix} U_1^T \\ U_2^T \\ U_3^T \end{bmatrix} (U_1 \Sigma_1 V_1^T x - b) \right\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} \Sigma_1 V_1^T x - U_1^T b \\ -U_2^T b \\ -U_3^T b \end{bmatrix} \right\|_2^2$$

$$= \|\Sigma_1 V_1^T x - U_1^T b\|_2^2 + \|U_2^T b\|_2^2 + \|U_3^T b\|_2^2.$$

Ovaj izraz je minimiziran kad je prva od tri norme u posljednjem redu jednaka 0, tj. ako je $\Sigma_1 V_1^T x = U_1^T b$.

Problem najmanjih kvadrata

Drugačije napisano, mora biti

$$x = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b.$$

Stupci matrica V_1 i V_2 su međusobno ortogonalni, pa je

$$V_1^T V_2 z = 0,$$

za sve vektore z. Zato x ostaje rješenje problema najmanjih kvadrata i kad mu dodamo $V_2 z$, za bilo koji z, tj. ako je

$$x = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b + V_2 z.$$

To su, ujedno, i sva rješenja, jer stupci matrice V_2 razapinju nul-potprostor $\mathcal{N}(A)$.

Problem najmanjih kvadrata

Zbog ortogonalnosti, vrijedi i

$$\|x\|_2^2 = \|V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b\|_2^2 + \|V_2 z\|_2^2,$$

a to je minimalno za $z = 0$. Na kraju, za to minimalno rješenje vrijedi ocjena

$$\|x\|_2 = \|V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^T b\|_2 = \|\Sigma_1^{-1} U_1^T b\|_2 \leq \frac{\|U_1^T b\|_2}{\sigma} = \frac{\|b\|_2}{\sigma}.$$

Primjerom se lako pokazuje da je ova ocjena dostižna. ■

Rješenje problema najmanjih kvadrata korištenjem SVD-a je najstabilnije. Za $m \gg n$, trajanje je približno jednako trajanju rješenja QR faktorizacijom.

Računanje SVD-a

Veza simetričnog svojstvenog problema i SVD-a

Tvrdnje 2, 3 i 4 iz svojstava SVD-a daju vezu svojstvenog problema i SVD-a, koja se koristi za njegovo računanje.

Ideja. Ako je G faktor matrice A, tj.

$$A = GG^T, \quad \text{ili} \quad A = G^T G, \quad \text{ili (rjeđe)} \quad A = \begin{bmatrix} 0 & G^T \\ G & 0 \end{bmatrix},$$

onda, za nalaženje SVD-a od G, implicitno primjenjujemo algoritam za simetrični svojstveni problem za A.

Implicitno znači da sve računamo kao da smo formirali matricu A. Međutim, umjesto na A, transformacije primjenjujemo na G (ili G^T).

Bidijagonalni QR

Standardna priprema za simetrični QR algoritam je tridijagonalizacija.

Za SVD algoritam to je bidijagonalizacija.

Ideja. Matricu G svodimo na gornju bidijagonalnu formu,

- svi elementi izvan glavne i prve gornje dijagonale su 0,

tako da nađemo ortogonalne matrice U_1 i V_1, takve da bude

$$G = U_1 B V_1^T,$$

gdje je B gornja bidijagonalna matrica.

Bidijagonalni QR

Standardni algoritam bidijagonalizacije vrlo nalići na QR faktorizaciju:

- prvi stupac od G svedemo na ce_1;
- prvi redak od transformiranog G svedemo na samo 2 elementa (da ne pokvarimo sređeni prvi stupac);
- $\ldots$

Postoji i moderniji, točniji algoritam bidijagonalizacije.

Nakon bidijagonalizacije,

- provodimo implicitni QR algoritam na matrici B,

tj. na jednoj od trodijagonalnih matrica BB^T ili B^TB.

Jacobijev algoritam

Jacobijev algoritam provodimo na punoj matrici G, koja, recimo, neka ima više redaka, nego stupaca.

Da bismo skratili algoritam, prvo napravimo QR faktorizaciju matrice G,

$$G = QR.$$

Zatim radimo implicitne transformacije,

- ili na $R^T R$, ili na RR^T.

Pohvalna karakteristika algoritma:

- jedne singularne vektore mora akumulirati,
- a drugi se jednostavno pročitaju na kraju algoritma.

Jacobijev algoritam

Recimo da smo izabrali rad na $R^T R$.

- Na početku su desni singularni vektori jednaki I.
- U matrici desnih singularnih vektora skupljamo sve transformacije kojima smo dijagonalizirali $R^T R$.

Na kraju algoritma, kad $R^T R$ postane dijagonalna,

- stupci matrice R su ortogonalni, ali nisu normirani.
- Norme stupaca matrice R su singularne vrijednosti, a sami ortonormirani stupci od R su lijevi singularni vektori za R.
- Lijevi singularni vektori za G su, onda, lijevi singularni vektori od R, slijeva pomnoženi s Q.

Diferencijalni qd algoritam

Niz faktorizacija Choleskog za zadanu simetričnu, pozitivno definitnu matricu $T_1 := T$ definiran je ovako:

$$
\begin{aligned}
T_1 &= & &= G_1^T G_1 \\
T_2 &= G_1 G_1^T & &= G_2^T G_2 \\
&\ \ \vdots & &\ \ \vdots \\
T_{2k} &= G_{2k-1} G_{2k-1}^T & &= G_{2k}^T G_{2k} \\
T_{2k+1} &= G_{2k} G_{2k}^T & &= G_{2k+1}^T G_{2k+1} \\
&\ \ \vdots & &\ \ \vdots
\end{aligned}
$$

Sljedeća matrica dobiva se okretanjem faktora prethodne matrice.

Diferencijalni qd algoritam

Prethodni niz transformacija može se računati i implicitno,

- nizom običnih QR faktorizacija,
- na transponiranom faktoru prethodne matrice,

ako je zadan prvi “faktor” $G_1 := G$:

$$\begin{aligned}
G_1^T &= Q_2 G_2, & Q_2^T Q_2 &= I \\
G_2^T &= Q_3 G_3, & Q_3^T Q_3 &= I \\
&\vdots & &\vdots \\
G_{2k}^T &= Q_{2k+1} G_{2k+1}, & Q_{2k+1}^T Q_{2k+1} &= I \\
G_{2k+1}^T &= Q_{2k+2} G_{2k+2}, & Q_{2k+2}^T Q_{2k+2} &= I \\
&\vdots & &\vdots
\end{aligned}$$

Diferencijalni qd algoritam

Za prethodni algoritam može se pokazati da konvergira prema singularnim vrijednostima matrice G.

- Algoritam je efikasniji ako se provodi na bidijagonalnim matricama $B = G$.
- Pripadne QR faktorizacije treba raditi rotacijama (efikasnije, mijenjaju se samo 2 retka).

Neka su (oznake):

- a_i — dijagonalni elementi od B,
- b_i — vandijagonalni elementi od B.

U QR faktorizaciji javljaju se norme stupaca, tj.

- korijeni sume kvadrata elemenata a_i i b_i.

Diferencijalni qd algoritam

Da bismo se riješili računanja korijena,

- formule za elemente a_i i b_i se jednostavno kvadriraju,
- nazovu novim imenima $q_i = a_i^2$ i $e_i = b_i^2$,
- i dobili smo diferencijalni qd algoritam.

Algoritmu se mogu dodati pomaci.

Zaključak

Navedeni algoritmi:

- bidijagonalni QR bez pomaka,
- Jacobijev algoritam,
- i diferencijalni qd algoritam s pomacima,

imaju jedno bitno svojstvo:

- računaju singularne vrijednosti s visokom relativnom točnošću,
- kad god to matrice dopuštaju!