Numerické metody a programování

# Lekce 4

# Linarní algebra

soustava lineárních algebraických rovnic

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1,N}x_N &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2,N}x_N &= b_2 \\ &\cdots \\ a_{M,1}x_1 + a_{M,2}x_2 + \cdots + a_{M,N}x_N &= b_M \end{aligned}$$

zkráceně

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Leftrightarrow \quad b_i = \sum_j a_{ij} x_j$$

základní úlohy lineární algebry

- $N=M$
  - řešení $\boldsymbol{x}$
  - inverzní matice $\boldsymbol{A}^{-1}$
  - determinant
- $M<N$ nebo degenerace
  - SVD (singular value decomposition)
- $M>N$
  - přeurčený problém, přibližné řešení

## *Gaussova-Jordanova eliminace*

řešení problému

$$\boldsymbol{A}\,[\boldsymbol{x} \;\; \boldsymbol{Y}] = [\boldsymbol{b} \;\; \boldsymbol{1}]$$

řeší zároveň soustavy

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \text{a} \quad \boldsymbol{A}\,\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{1}$$

- nahrazení řádku lineární kombinací řádku a jiných řádků nemá vliv řešení problému
- přehození řádků nemá vliv na řešení
- Gaussova-Jordanova eliminace využívá prvního pravidla k redukci matice $\boldsymbol{A}$ na jednotkovou matici.
- pro zlepšení stability se využívá druhého pravidla (pivotace)

příklad:

$$\begin{aligned} 2x_1 + 1x_2 &= 5 \\ x_1 - x_2 &= -2 \end{aligned}$$

vytvoříme

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 5 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & -2 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

vydělím první řádek diagonálním prvkem $a_{11}$ (pivot) a přičtu k ostatním tak, aby $a_{i\neq 1,1} = 0$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 5/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & -3/2 & -9/2 & -1/2 & 1 \end{bmatrix}$$

vydělím druhý řádek diagonálním prvkem $a_{22}$ (pivot) a přičtu k ostatním tak, aby $a_{i\neq 2,2} = 0$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 1/3 & 1/3 \\ 0 & 1 & 3 & 1/3 & -2/3 \end{bmatrix}$$

toto se podle potřeby opakuje

- matice $\boldsymbol{A}$ je převedena na jednotkovou matici
- z jednotkové matice vznikne inverze $\boldsymbol{A}^{-1}$
- z vektoru pravé strany $\boldsymbol{b}$ vzniklo řešení $x_1 = 1, x_2 = 3$
- stabilitu zvýší přehazování řádků/(řádků a sloupců tak, aby nedocházelo k dělení malými čísly (částečná/úplná pivotace)

## *LU dekompozice*

nevýhoda Gaussovy-Jordanovy eliminace:

- všechny pravé strany musí být známy dopředu
- není optimální z hlediska počtu elementárních operací

LU rozklad: rozklad matice $\boldsymbol{A}$ na součin dolní a horní trojúhelníkové matice

$$\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{U} = \boldsymbol{A}$$

pak platí

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{L}\,(\boldsymbol{U}\,\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b}$$

takže

$$\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \quad \text{a} \quad \boldsymbol{U}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$$

soustavy s trojúhelníkovými maticemi řešíme zpětnou(dopřednou) substitucí

např.

$$x_N = \frac{y_N}{u_{NN}},$$

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}}\left[ y_i - \sum_{j=i+1}^{N} u_{ij} x_j \right], \quad i = N-1, N-2, \ldots, 0$$

inverzi $\boldsymbol{A}^{-1}$ vypočítáme řešením soustavy pro pravé strany

$$\boldsymbol{b}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \ldots, \quad \boldsymbol{b}_N = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

vlastní LU dekompozice matice $\boldsymbol{A}$

$N^2$ rovnic pro $N^2+N$ neznámých

$$i \le j: \ l_{i1}u_{1j} + l_{i2}u_{2j} + \cdots + l_{ii}u_{ij} = a_{ij} \quad (1)$$
$$i > j: \ l_{i1}u_{1j} + l_{i2}u_{2j} + \cdots + l_{ij}u_{jj} = a_{ij} \quad (2)$$

*Croutův algoritmus*:

- položíme $l_{ii} = 1, \ i = 1,\ldots,N$
- postupně pro $j = 1,2,\ldots,N$ provedeme
  - nejprve pro $i = 1,2,\ldots,j$ vypočteme $u_{ij}$ z (1)
  - pro $i = j+1, j+2,\ldots,N$ použijeme (2) k získání $l_{ij}$
- pivotace je opět využita ke zlepšení stability

## *Choleského rozklad*

$$\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{L}^{\boldsymbol{T}} = \boldsymbol{A}$$

pro pozitivní matici $\boldsymbol{A} > \boldsymbol{0}$ , $\boldsymbol{L}$ je dolní trojúhelníková matice

- podobně jako LU rozklad řeší systém lineárních rovic
- asi 2x rychlejší než LU rozklad
- stabilní algoritmus (pivotace není nutná)

## *Výpočet determinantu*

determinant čtvercové matice $\boldsymbol{A}$

$$\det(A) = \sum_{\sigma} \operatorname{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^{N} a_{i,\sigma_i} \ ,$$

kde $\sigma$ jsou permutace množiny $\{1,2,\ldots,N\}$

determinant matice po LU dekompozici se získá triviálně

$$\det(\boldsymbol{A}) = \det(\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{U}) = \det(\boldsymbol{L})\det(\boldsymbol{U}) = \prod_{j=1}^{N} u_{jj}$$

*Cramérovo pravidlo*

řešení soustavy $\boldsymbol{A}\ \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ dostaneme pomocí determinantu takto:

$$x_i = \frac{\det(\boldsymbol{A_i})}{\det(\boldsymbol{A})}, \quad i = 1,2,\ldots,N \quad ,$$

kde $\boldsymbol{A_i}$ vznikne z $\boldsymbol{A}$ nahrazením *i*-tého sloupce pravou stranou $\boldsymbol{b}$

plyne z

$$\det(\boldsymbol{A_i}) = \det([\boldsymbol{a}_1,\ldots,\boldsymbol{b},\ldots\boldsymbol{a}_N]) = \sum_j x_j \det([\boldsymbol{a}_1,\ldots,\boldsymbol{a}_{i-1},\boldsymbol{a}_j,\boldsymbol{a}_{i+1},\ldots\boldsymbol{a}_N]) = x_i \det(\boldsymbol{A})$$

výpočetní čas je srovnatelný s LU rozkladem

## *iterativní vylepšení řešení lineárních rovnic*

- v důsledku zaokrouhlovacích chyb je řešení nepřesné
- max. přesnost $\epsilon_m$ obnovíme iterativním postupem

řešme $\boldsymbol{A}\ \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ s nepřesným známým výsledkem $\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}$ : $\boldsymbol{A}\ (\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} + \delta\boldsymbol{b}$

do $\boldsymbol{A}\ \delta\boldsymbol{x} = \delta\boldsymbol{b}$ dosadíme za $\delta\boldsymbol{b}$

výsledná rovnice pro $\delta\boldsymbol{x}$ : $\boldsymbol{A}\ \delta\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}\ (\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{b}$

## *SVD (Singular Value Decomposition)*

$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\ \boldsymbol{S}\ \boldsymbol{V}^{\mathbf{T}}$ ,

$\boldsymbol{A}$ : $M \times N$ reálná (komplexní)

$\boldsymbol{U}$ : $M \times M$ ortogonální (unitární), $\mathbf{U}\ \mathbf{U}^{\mathbf{T}} = \mathbf{1}$ $\quad (\mathbf{U}\ \mathbf{U}^{+} = \mathbf{1})$

$\boldsymbol{S}$ : $M \times N$ diagonální matice $\boldsymbol{S} \geq \mathbf{0}$ (singulární čísla $s_i$ )

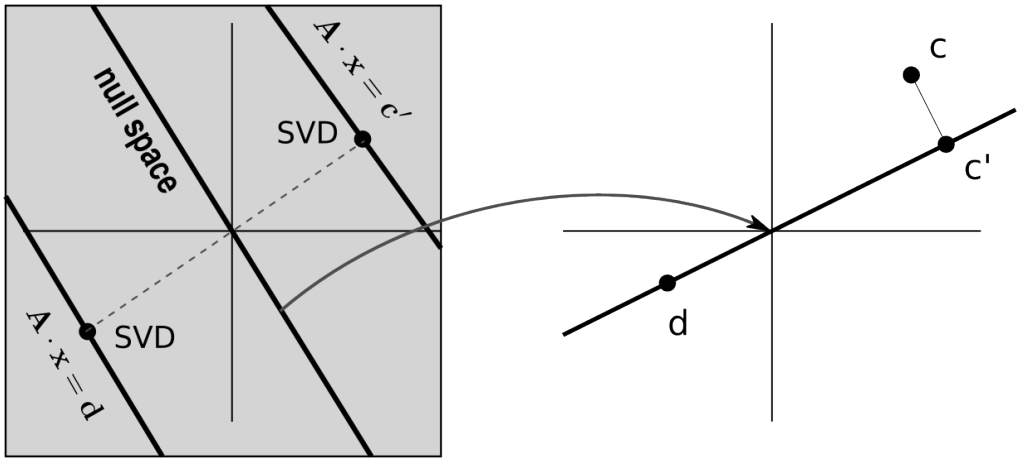
$\boldsymbol{V}$ : $N \times N$ ortogonální (unitární)

čtvercová matice $M = N$

regulární, $\min s_i > 0$ : $\boldsymbol{A^{-1}} = \boldsymbol{V}\ \mathrm{diag}(1/s_i)\ \boldsymbol{U^T}$

singulární, $\min s_i = 0$

- nulový prostor (jádro, *nullspace*) $\boldsymbol{x}$ : $\boldsymbol{A}\ \boldsymbol{x} = \mathbf{0}$
- obor hodnot *(range)* $\boldsymbol{b}$ : $\boldsymbol{A}\ \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ pro nějaké $\boldsymbol{x}$ (obal sloupců $\boldsymbol{a}_i$ , hodnost)
- ortonormální báze *(nullspace)*: sloupce $\boldsymbol{v}_i$ odpovídající $s_i = 0$
- ortonormální báze *(range)*: sloupce $\boldsymbol{u}_i$ odpovídající $s_i \neq 0$




řešení $\boldsymbol{A}\ \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ se singulární $\boldsymbol{A}$

- homogenní $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$ : každý vektor nullspace
- nehomogenní $\boldsymbol{b} \neq \boldsymbol{0}$
  - $\boldsymbol{b}$ v *range*: řešení s min. normou $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{V}\ \mathrm{diag}\left(1/s_i\right) \boldsymbol{U}^{\boldsymbol{T}}\ \boldsymbol{b}$ , kde $1/s_i$ nahrazeno nulou pokud $s_i = 0$ (pseudoinverze); lze přičíst vektor z *nullspace*
  - $\boldsymbol{b}$ mimo *range*: nemá řešení; přibližné řešení ve smyslu $\min \left|\boldsymbol{A}\ \boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\right|$ (metoda nejmenších čtverců) dostaneme opět jako pseudoinverzi

méně rovnic než neznámých $M < N$

- obvykle nekonečně mnoho řešení
- všechna řešení: partikulární řešení plus *nullspace*

více rovnic než neznámých $M > N$

- obvykle nemá řešení
- metoda nejmenších čtverců

další aplikace SVD

- aproximace matice maticí s hodností $K$ : $s_i = 0,\ i > K$ (podle velkosti]
- separabilní modely (filtry): $\boldsymbol{A} = \sum_i s_i \boldsymbol{u}_i \otimes \boldsymbol{v}_i$
- nejbližší ortogonální matice: $\boldsymbol{U}\ \boldsymbol{V}^{\boldsymbol{T}}$
- ortonormální báze prostoru $N$ vektorů $\boldsymbol{a}_i,\ i = 1,\ldots N$ dimenze $M$ , $N < M$ : sloupce matice $\boldsymbol{U}$ po SVD $M \times N$ matice sloupců $\boldsymbol{a}_i$ odpovídající $s_i \neq 0$
- Hilbert-Schmidtova norma (Frobeniusova norma): $\|\boldsymbol{A}\| = \left(\mathrm{Tr}\left(\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}}\ \boldsymbol{A}\right)\right)^{1/2} = \left(\sum_i s_i^2\right)^{1/2}$

## *Řídké (sparse) matice*

- malé množství $a_{ij} \neq 0$
- speciální algoritmy využívají tuto vlastnost
- menší nároky na ukládání a výpočetní čas

## *Vlastní čísla/vektory*

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}$$

- pouze čtvercová matice
- složitý problém, doporučeno používat knihovny (např. LAPACK)
- diagonální prvky trojúhelníhové matice jsou vlastní čísla
- Gaussova-Jordanova eliminace nezachovává vlastní čísla

*Von Misesův algoritmus (power iteration)*:

- iterační postup pro nalezení dominantního vlastního čísla a odpovídajícího vlastního vektoru

$$\boldsymbol{A} = \lambda_1 \boldsymbol{x}_1 \boldsymbol{x}_1^T + \lambda_2 \boldsymbol{x}_2 \boldsymbol{x}_2^T + \ldots + \lambda_N \boldsymbol{x}_N \boldsymbol{x}_N^T, \quad |\lambda_1| > |\lambda_2| > \ldots > |\lambda_N|$$

- počáteční volba $\boldsymbol{v}_0$ , $\boldsymbol{v_0}^T \cdot \boldsymbol{x}_1 \neq 0$

$$\boldsymbol{v}_{k+1} = \frac{\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{v}_k}{\|\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{v}_k\|}$$

- iterace konverguje k dominantnímu vlastnímu vektoru

$$\lim_{k \to \infty} \boldsymbol{v}_k = \boldsymbol{x}_1$$

- pro výpočet dalších vlastních čísel pokračujeme s maticí:

$$\boldsymbol{A} \rightarrow \boldsymbol{A} - \lambda_1 \boldsymbol{x}_1 \boldsymbol{x}_1^T$$

  - algoritmus je výhodný pokud potřebujeme jen několik vlastních čísel velké matice – odpadá nutnost faktorizovat celou matici
  - využívá např. Google, Twitter pro hledání relevantních webových stránek (PageRank)

*QR algoritmus:*

- QR rozklad na ortogonální matici $\boldsymbol{Q}$ a horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{R}$

$$\boldsymbol{A}_0 = \boldsymbol{A} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{Q}_k \boldsymbol{R}_k \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{R}_k \boldsymbol{Q}_k$$

- iterace zachovává vlastní čísla:

$$\boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{R}_k \boldsymbol{Q}_k = \boldsymbol{Q}_k^{-1} \boldsymbol{Q}_k \boldsymbol{R}_k \boldsymbol{Q}_k = \boldsymbol{Q}_k^{-1} \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{Q}_k$$

- konverguje k trojúhelníkové matici, tj. vlastní čísla na diagonále

Souvislost SVD rozkladu s vlastními čísly/vektory

$$\boldsymbol{A^T A = V\ S^2\ V^T}$$

$$\boldsymbol{A\ A^T = U\ S^2\ U^T}$$

t.j. sloupce $\boldsymbol{V}$ a $\boldsymbol{U}$ jsou vlastní vektory matic $\boldsymbol{A^T A}$ resp. $\boldsymbol{A\ A^T}$

Symetrické (Hermitovské) matice

$$\boldsymbol{A^T = A}$$

SVD:

$$\boldsymbol{A^2 = A^T A = V\ S^2\ V^T}$$

$$\lambda_i^2 = s_i^2$$

tj. sloupce $\boldsymbol{V}$ a $\boldsymbol{U}$ jsou vlastní vektory $\boldsymbol{A}$ a singulární čísla jsou absolutní hodnoty vl. čísel