ΚΕΦΑΛΑΙΟ III

ΟΙ ΠΑΡΑΓΟΝΤΟΠΟΙΗΣΕΙΣ LU, QR και SVD

Εισαγωγή

Το παρόν κεφάλαιο χωρίζεται σε 2 μέρη.

Στο (**Α**), μεταξύ άλλων, εξηγούμε **γιατί** μας ενδιαφέρει η λεγόμενη **ανάλυση σε παράγοντες ειδικούς πίνακες** (decomposition) ή και απλά **παραγοντοποίηση** (factorization) ενός τυχαίου, όχι απαραίτητα τετραγωνικού πίνακα.

> **ΣΧΟΛΙΟ ΣΥΓΓΡΑΦΕΑ**: τους όρους αποδόμηση ή/και αποσύνθεση, που επισημάναμε σε αυθεντικά ή από μετάφραση- ελληνικά συγγράμματα και σημειώσεις ΓΑ, τους θεωρούμε επιεικώς ανεπιτυχείς!.

Στο μέρος (**Β**) δίνουμε μόνο τους ορισμούς των τριών βασικών μορφών ανάλυσης, **LU, QR** και **SVD** μαζί με απλά παραδείγματα. Το Κεφάλαιο III στην πράξη λειτουργεί ως προθέρμανση για το Κεφάλαιο IV όπου αναπτύσσονται λεπτομερώς οι συναφείς τεχνικές αυτών των αναλύσεων με ή άνευ την βοήθεια των Η/Υ και όπου αναγκαστικά και τα παραδείγματα γίνονται πιο πολύπλοκα.

(Α) Οι Στόχοι της Ανάλυσης Τυχαίου Πίνακα

(Α1) Γενικές επισημάνσεις

Σε πολλούς διαφορετικούς μαθηματικούς κλάδους (αλλά και στην κλασσική φυσική όταν π.χ. πρέπει να μελετηθεί μία σύνθετη κίνηση υλικού σημείου) εμφανίζεται σε σημαντική έως μεγάλη έκταση μέσα στην ανάπτυξης μιας έννοιας της θεωρία, όπως ο αριθμός, το πολυώνυμο, οι αλγεβρικές παραστάσεις κ.λπ., η επίτευξη μιας κάποιας «κατάλληλης» παραγοντοποίησης. Έτσι, παραδείγματος χάριν, για έναν **σύνθετο** φυσικό αριθμό n οι αριθμοθεωρητικοί (αλλά και όσοι εκ της Πληροφορικής εφαρμόζουν τον FFT σε δείγμα μήκους μεγάλου n) θέλουν –γρήγορα και με τον μικρότερο δυνατό κόπο αν γίνεται– να τον γράψουν στην μορφή $n = p_1^{\kappa_1}\ p_2^{\kappa_2} .. p_m^{\kappa_m}$, όπου οι $p_1, p_2, \ldots, p_m$ **πρώτοι** αριθμοί διαφορετικοί μεταξύ τους και $\kappa_1, \kappa_2, \ldots \kappa_m$ φυσικοί αριθμοί (ή μηδέν). Βέβαια ο στόχος δεν είναι όπως βλέπετε μια οποιαδήποτε παραγοντοποίηση! Κάτι ανάλογο συμβαίνει και με την άλγεβρα των πινάκων και ιδιαίτερα στις εφαρμογές τους: δεν θέλουμε μία οποιαδήποτε παραγοντοποίηση A=BC ή BCD ενός πίνακα A, αλλά όπως πριν με την ανάλυση του n σε γινόμενο πρώτων έτσι και εμείς θέλουμε να βρούμε τις ειδικές κατηγορίες των πινάκων αυτών, B,C και D που θα διευκόλυναν τις εφαρμογές των πινάκων.

Μαζί με αυτές τις ειδικές κατηγορίες θα περιγράψουμε επιγραμματικά μερικές από τις περιοχές όπου η κάθε μία ανάλυση συμβάλλει στην επίλυση προβλημάτων μέσα και έξω από την ΓΑ γενικότερα.

Θυμίζουμε ότι στα πλαίσια της ΓΑ Ι έχει παρουσιασθεί, αλλά μόνο για nxn πίνακες A και υπό επιπρόσθετες προϋποθέσεις, που αφορούσαν τις ιδιοτιμές του, μία τέτοια ανάλυση και μία πιθανή εφαρμογή της. Ήταν η **διαγωνιοποίηση** του A και ο υπολογισμός μεγάλων δυνάμεών του.

(Α2) Μερικά χρήσιμα είδη παραγοντοποιήσεων

Θα αρχίσουμε με δύο αυτονόητες παρατηρήσεις:

(1) Αν αν εξαρχής ο A είναι ειδικής μορφής π.χ. διαγώνιος ή πολύ αραιός δεν υπάρχει –πλην ελαχίστων εξαιρέσεων– ανάγκη για ανάλυση σε γινόμενο άλλων πινάκων.

(2) Θα επιθυμούσαμε-αλλά σπάνια αυτό είναι εφικτό στην ανάλυση 2 παραγόντων ο ένας τουλάχιστον, αν όχι και οι δύο, να ήσαν πολύ αραιοί ενώ για τους 3 παράγοντες τουλάχιστον οι δύο.

Η αμέσως επόμενη –και σχετικά πιο πιθανή να επιτύχει– στόχευση αφορά τους άνω και κάτω **τριγωνικούς,** παράγοντες που κλασσικά συμβολίζονται U (εκ του upper) και L (εκ του lower) αντίστοιχα. Αν έχουμε μόνο τον ένα (συνήθως άνω και με σύμβολο R ως δεξιός)) τριγωνικό στοχεύουμε ο άλλος παράγοντας να είναι κάποιας κλάσης από αυτές που έχουν εύχρηστα ιδιοδιανύσματα όπως ο **ορθογώνιος** με σύμβολο το Q (όταν αφορά πραγματικά στοιχεία) ή **ορθοκανονικός** (όταν αφορά μιγαδικά στοιχεία).Τέλος όταν έχουμε τριπλό γινόμενο στην ανάλυσή μας η κεντρική στόχευσή μας είναι ο μεσαίος παράγοντας να είναι διαγώνιος ή έστω **ορθογώνια διαγώνιος** (ο ορισμός δίνεται στο μέρος (Β)) ενώ οι άλλοι δύο να είναι ορθογώνιοι ή ορθοκανονικοί (Singular Value Decomposition, συνοπτικά SVD).

Κλείνουμε το μέρος (Α) αναφέροντας επιγραμματικά μερικές μόνο περιοχές εφαρμογής της ανάλυσης πινάκων του (Α2) και κυρίως όσων παρουσιάσουμε στο μέρος (Β):

1. Επίλυση Γραμμικών Συστημάτων
2. Υπολογισμός της τάξης πίνακα
3. Δυνάμεις και αντιστρεψιμότητα πινάκων
4. Πρόβλημα ελαχίστων Τετραγώνων
5. Στατιστικά μοντέλα
6. Υπολογισμός ψευδοαντιστρόφου

Ας σημειωθεί ότι μερικές από τις εφαρμογές αυτές αλλά και άλλες θα εμφανισθούν διάσπαρτες ως ασκήσεις του Κεφαλαίου 3 αλλά κυρίως του Κεφαλαίου 4, όπου αναπτύσσεται πλήρως η «τεχνική» πίσω από κάθε μία από τις εκεί αναφερόμενες αναλύσεις .□

(Β) Συνοπτική παρουσίαση των αναλύσεων LU, QR και της Ανάλυσης σε Ιδιάζουσες Τιμές

(Β1) Η ανάλυση LU

Αν A είναι ένας nxn πίνακας και υπάρχουν πίνακες L και U,αντίστοιχα κάτω και άνω τριγωνικοί έτσι ώστε A=LU έχουμε την λεγόμενη LU παραγοντοποίηση. Σημειώστε ότι αυτή **δεν** είναι πάντα εφικτή και μάλιστα κατά ένα προφανή τρόπο μπορεί να κατασκευαστεί πλήθος **αντιπαραδειγμάτων:**

Έστω $|A|=0$ και $(l_{ιι}),(u_{ιι})$, $1\leq ι \leq n$ τα διαγώνια στοιχεία των L και U αντίστοιχα. Αν A=LU, επειδή $|A|=|LU|=|L|\,|U|=\prod_{ι=ι}^{n} l_{ii}u_{ιι}$ αρκεί ένα εκ των $l_{ιι}$ ή $u_{ιι}$ να είναι μηδέν ώστε να προκύψει άτοπο.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1

$$A=\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 6 & 5 \end{pmatrix}=LU=\begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & \frac{4}{3} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.\square$$

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 2

Μία προφανής χρήση της ανάλυσης του Παραδ. 1, που την αναφέρουμε μόνο ως προετοιμασία των πιο σύνθετων παραδειγμάτων του Κεφαλαίου 4 (αφού **δεν** χρειάζεται να καταφύγουμε σε ανάλυση του A για ένα 2x2 σύστημα) είναι η επίλυση του **συστήματος** $AX=B=\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ με $X=\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ ως εξής: έχουμε ισοδύναμα να λύσουμε το LY=B με $Y=UX=\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ όπου τα δύο πλέον νέα συστήματα είναι «απλούστερα» του πρώτου. Τις επί μέρους πράξεις σας τις αφήνουμε ως άσκηση εμπέδωσης! □

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 3

Άλλη μία προφανής χρήση της ίδιας ανάλυσης, που την αναφέρουμε πάλι μόνο ως προετοιμασία πιο σύνθετων παραδειγμάτων (μιας και **δεν** χρειάζεται να καταφύγουμε σε ανάλυση του A για να τον αντιστρέψουμε αφού είναι ένας 2x2 πίνακας!) είναι η εξής:

$$A^{-1}=U^{-1}L^{-1}=\begin{pmatrix} 2 & \frac{4}{3} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}^{-1}==\begin{pmatrix} 1 & -\frac{4}{3} \\ 0 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -3 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 5 & -2 \\ -6 & 3 \end{pmatrix}.\ \square$$

(Β2) Η ανάλυση QR

Πρέπει εξ αρχής να διευκρινίσουμε ότι, όταν ο A είναι τετραγωνικός, ο Q εκφράζει, υπό μορφή πίνακα, τον **αλγόριθμο των G-S** για την ορθοκανονικοποίηση των στηλών του A. Σε περίπτωση που οι στήλες έχουν γραμμική εξάρτηση καταφεύγουμε σε έναν **τροποποιημένου** αλγόριθμο.

Υπό αυτήν την έννοια η ανάλυση QR ενός τετραγωνικού A (αλλά και ενός μη τετραγωνικού όπως θα δούμε στη συνέχεια!) είναι **πάντα εφικτή**, αλλά τις λεπτομέρειες της τελευταίας αυτής περίπτωσης τις εξετάζουμε στις ασκήσεις (με εκτενή υπόδειξη!) του Κεφαλαίου III. Εκεί επίσης παρουσιάζουμε και τον **μετασχηματισμό Householder** καθώς και τον **μετασχηματισμό Given** ως εναλλακτικούς τρόπους κατασκευής των Q και R (και για mxn πίνακες). Πάντως πρέπει να επισημάνουμε ότι, εν γένει, ακόμα και όταν m=n ο αλγόριθμου των G-S, πέρα από το θέμα της ευστάθειας που έχουμε ήδη θίξει, δεν είναι υπολογιστικά ο πιο εύχρηστος αν το μέγεθος του A δεν είναι μικρό. □

Η περίπτωση του τετραγωνικού A

Αν ο A είναι ένας **πραγματικός** nxn πίνακας τότε A=QR, όπου οι nxn πίνακες Q και R είναι, αντίστοιχα, **ορθογώνιος** και **άνω τριγωνικός**. Ο πίνακας R καλείται και **δεξιά τριγωνικός** (right triangular) για προφανείς λόγους .□

Γενική περίπτωση

Αν ο A είναι ένας **μιγαδικός** mxn πίνακας, με m≥ n (προφανώς χωρίς βλάβη της γενικότητας), τότε A=QR, όπου ο Q είναι ένας mxm ορθοκανονικός πίνακας και ο R ένας «mxn άνω τριγωνικός» πίνακας υπό την έννοια ότι το άνω nxn τμήμα του είναι ο συνήθης άνω τριγωνικός ενώ οι τελευταίες m-n γραμμές του είναι μηδενικές.□

Η κατασκευή QR

Αν στην ειδική ή τ γενική περίπτωση έχουμε τάξη του A, r(A)= n, (που εκφράζεται στην βιβλιογραφία με την ορολογία ο A είναι full rank πίνακας) τότε ο συνήθης αλγόριθμος των G-S στον R^n ή στον C^n, αντίστοιχα, με το πραγματικό ή μιγαδικό ευκλείδειο εσωτερικό γινόμενο, θα δώσει τις στήλες του ορθογώνιου ή ορθοκανονικού, αντίστοιχα, nxn Q ή του mxm Q συγκολλημένου, αν χρειαστεί με τις m-n υπόλοιπες στήλες αποτελούμενες από mx1 διανύσματα μοναδιαία και ορθογώνια προς τα άλλα n.

Συγκεκριμένα, αν A=($c_1|c_2|\ldots|c_n$), ένας mxn ή nxn, full rank πίνακας και μέσω της διαδικασίας των G-S επί των στηλών c_j $1\leq j \leq n$, παίρνουμε το ορθοκανονικό σύνολο $\{e_1, e_2, \ldots, e_n\}$ τότε για nxn Q= Q_1 και για mxm Q= ($Q_1 \mid Q_2$) με $Q_1 = (e_1|e_2|\ldots|e_n)$ και Q_2 ο mx(m-n) με στήλες που περιγράψαμε ο δε nxn ή mxn, αντίστοιχα, R είναι άνω τριγωνικός ή έχει ως άνω τριγωνικό block τον πίνακα ($r_1|r_2|\ldots|r_n$) με $r_1 = (c_1 \cdot e_1,\ c_2 \cdot e_1, \ldots, c_n \cdot e_1)$, $r_2 = (0, c_2 \cdot e_2, \ldots, c_n \cdot e_2)$,.. .., $r_n = (0, 0, \ldots, c_n \cdot e_n)$.□

Παρουσιάζουμε τώρα από ένα παράδειγμα σε κάθε μία από αυτές τις δύο περιπτώσεις (m=.n και m>n) με μικρά m και n, πάντα για full rank πίνακες, που υπαγορεύονται από την πιο πάνω περιγραφή κατασκευής της ανάλυσης QR.Οι λεπτομέρειες αφήνονται στον αναγνώστη ως βατές ασκήσεις:

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 1

Έστω $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$. Τότε $Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}$ και $R = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{6}}{2} \end{pmatrix}$ (γιατί;).□

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 2

Έστω $A = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 2\sqrt{3} \\ 0 & \sqrt{3} \\ \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$. Τότε $Q_1 =$, $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$, $Q_2 = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}$ (γιατί;)

και $R = \begin{pmatrix} 2 & \sqrt{6} \\ 0 & 3 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.□

ΣΧΟΛΙΟ ΣΥΓΓΡΑΦΕΑ:

1. Προφανώς Α δεν είχε ανάγκη μιας τόσο «επιβαρυντικής» ανάλυσης. Το Παράδειγμα 2 στόχευε στην ανάδειξη της λεγομένης full QR decomposition με τους Q_1, Q_2.και την γενίκευση του άνω τριγωνικού.
2. Κλείνουμε το (Β2) με μία απλή εφαρμογή της ανάλυσης QR σε ένα 3x2 γραμμικό σύστημα πάλι για καθαρά εκπαιδευτικούς λόγους. Το ίδιο πρόβλημα θα λύνονταν πιο εύκολα χωρίς ανάλυση πινάκων!

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ 3

Για τον Α του Παραδ.2, με $X=\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ και $B=\begin{pmatrix} 2 \\ \lambda\text{-}1 \\ \lambda+1 \end{pmatrix}$, λύστε και διερευνήστε το σύστημα ΑΧ=Β, για τις διάφορες τιμές της πραγματικής **παραμέτρου** λ.

ΑΠΑΝΤΗΣΗ:

$$\text{Αφού } Q^{-1}=Q^t \Rightarrow RX=\begin{pmatrix} 2x+\sqrt{6}y \\ 3y \\ 0 \end{pmatrix}=Q^tB=\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 \\ \lambda\text{-}1 \\ \lambda+1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \frac{\lambda+3}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{3\lambda-3}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}$$

άρα το σύστημα είναι **αδύνατον** για όλα τα $\lambda \neq 1$,ενώ για λ=1 $\Rightarrow$ $y=0$ και $x=\sqrt{2}$.□

(Β3) Η SVD (Ανάλυση σε Ιδιάζουσες Τιμές)

Στις ασκήσεις θα δούμε ότι η SVD στα πλαίσια των εφαρμογών της ΑΓΑ στην Πληροφορική μπορεί να θεωρηθεί ένα αξιόλογο μαθηματικό «τέχνασμα» για ελάττωση του όγκου, αλλά και των διαστάσεων, της data. Οφείλουμε επίσης να προειδοποιήσουμε τον ερχόμενο για πρώτη φορά σε επαφή με την SVD, ότι –αν και σε ειδικές περιπτώσεις οι δύο έννοιες ταυτίζονται– οι **ιδιάζουσες τιμές** (singular values) ενός πίνακα Α δεν είναι οι ιδιοτιμές του ακόμα και αν είναι τετραγωνικός!

Η SVD εκφράζει την παραγοντοποίηση ενός (όχι κατ' ανάγκη πραγματικού) mxn πίνακα A στη μορφή UDV^t, όπου οι U και V είναι **ορθοκανονικοί** πίνακες mxm και nxn, αντίστοιχα και ο D ένας mxn «**ορθογώνια διαγώνιος**» (rectangular diagonal) πίνακας.

Ορισμος

Ένας πίνακας mxn με $m\neq n$ θα καλείται **ορθογώνιος διαγώνιος** αν, για r=min{m,n}, το rxr άνω αριστερό block του είναι διαγώνιος πίνακας και όλα τα υπόλοιπα εκτός του block στοιχεί είναι 0.□

Η αναλυτική διαδικασία εύρεσης των U,V και της διαγωνίου του rxr block του D δίνεται στην ενότητα 3 του Κεφαλαίου IV. Μάλιστα υπάρχουν –και ακόμα και την τελευταία δεκαετία συνεχίζουν να επινοούνται!– **αρκετοί αλγόριθμοι** που την επιτυγχάνουν. Περιοριζόμαστε μόνο στο να πούμε από τώρα ότι κεντρικό ρόλο θα παίξει ένα γνωστό θεώρημα της ΓΑ που αφορά το φάσμα του πίνακα AA*, όπου A* ο **συζυγοανάστροφος** (ή απλά ο A^t για πραγματικά στοιχεία) ενός mxn πίνακα A.

Κλείνουμε το μικρό αυτό κεφάλαιο-«γέφυρα» για τα Κεφάλαια IV!- με ένα παράδειγμα της SVD.

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ (*MIT, Linear Algebra Open Courses, Spring 2010*)

(**α**) Για τον 4x2 πίνακα $A=\begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 1 & 3 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ έχουμε τους εξής 4x4 και 2x2, αντίστοιχα, **ορθογώνιους** πίνακες (αφού είμαστε στην περίπτωση των **πραγματικών** στοιχείων - για την μιγαδική περίπτωση περιμένετε μέχρι το κεφάλαιο IV!)

$$U=\begin{pmatrix} 0.82 & -0.58 & 0 & 0 \\ 0.58 & 0.82 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ V=\begin{pmatrix} 0.40 & -0.91 \\ 0.91 & 0.40 \end{pmatrix}.$$

Για το 2x2 block θα βρείτε τον διαγώνιο $\begin{pmatrix} 5.47 & 0 \\ 0 & 5.47 \end{pmatrix}$.□