§10. QR- и SVD- разложения: «плохие» СЛАУ

Среди матричных разложений особую роль играют *ортогональные*, обладающие свойством сохранения нормы вектора. Напомним из курса линейной алгебры, что матрица **Q** называется *ортогональной*, если она удовлетворяет условию:

$$\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{Q}=\mathbf{I}, \tag{58}$$

где **I** – единичная матрица. Свойство сохранения нормы произвольного вектора **x** при ортогональных преобразованиях:

$$|\mathbf{Q}\cdot\mathbf{x}|=|\mathbf{x}| \tag{59}$$

дает рецепт поиска псевдорешения вырожденных СЛАУ, а именно, замену исходной задачи минимизации невязки с «плохой» матрицей $|\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}-\mathbf{b}|$ задачей $|\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\cdot(\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}-\mathbf{b})|$, в которой матрица $\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{A}$ уже будет «хорошей» благодаря специальному построению матрицы **Q**. Таким образом, ортогональные разложения используются при решении любых систем (в том числе с прямоугольной матрицей **A**, причем как переопределенных, так и недоопределенных).

Одним из важнейших вариантов ортогональных разложений некоторой матрицы А является *QR-разложение* вида

$$\mathbf{A}=\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}, \tag{60}$$

где **Q** – ортогональная матрица, а **R** – верхняя треугольная матрица.

Для невырожденной СЛАУ $\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{b}$ можно сразу записать:

$$\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}\cdot x=\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{b}, \tag{61}$$

откуда сразу следует (благодаря ортогональности матрицы **Q**) рецепт решения «хорошей» системы:

$$\mathbf{R}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{b}. \tag{62}$$

Т.к. матрица **R** – треугольная, решение данной системы получается по формулам прямого хода.

Для решения СЛАУ с сингулярной квадратной NxN или прямоугольной NxM (с рангом k) матрицей **A** известно, что получающаяся треугольная матрица **R** имеет следующую структуру:

$$R=\begin{pmatrix} R_1 & R_2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} , \tag{63}$$

где $\mathbf{R_1}$ – верхняя треугольная матрица, а $\mathbf{R_2}$ – просто некоторая матрица. Нули в формуле (63) обозначают, в общем случае, нулевые матрицы соответствующих размеров.

Если система вырожденная, то она имеет бесконечное множество псевдорешений (векторов, минимизирующих норму невязки). При помощи QR-разложения можно сразу выписать одно из них (правда, не обладающее минимальной нормой). Согласно (63), одна или несколько последних строк матрицы **R** содержат одни нули, поэтому одна или несколько последних компонент вектора псевдорешения **x** может быть произвольной. В связи с этим, целесообразно разбить вектор **x** на два вектора меньшего размера:

$$x=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} . \tag{64}$$

Если положить $\mathbf{x_2}$=0, то остальные компоненты **x** определятся из треугольной СЛАУ

$$\mathbf{R_1}\cdot\mathbf{x_1}=\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{b}. \tag{65}$$

Для того, чтобы выбрать из всего множества псевдорешений, минимизирующих невязку исходной СЛАУ, нормальное псевдорешение (т. е. обладающее минимальной нормой), необходимо решить соответствующую задачу минимизации. Если построено QR-разложение, сделать это намного легче. Для этого произвольную компоненту решения $\mathbf{x_2}$ следует определить из условия минимума функции f($\mathbf{x_2}$):

$$f(x_2)=\left|\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}\right| \sim \min \;\Leftarrow\; R_1\cdot x_1=b_1-R_2\cdot x_2 \quad . \tag{66}$$

В формуле (66) мы обозначили вертикальными чертами операцию вычисления нормы вектора и символически записали, что вектор $\mathbf{x}_1$, от которого также зависит функция $f(\mathbf{x}_2)$, есть решение выписанной линейной системы с треугольной матрицей $\mathbf{R}_1$. Вспомогательный рис. 35 помогает понять структуру функции $f(\mathbf{x}_2)$, которая подвергается минимизации.

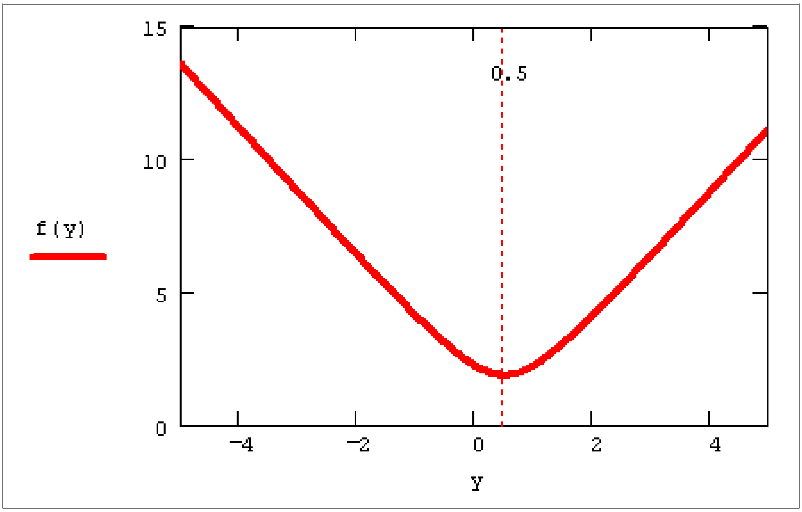

Рис. 35. *Норма псевдорешения $f(\mathbf{x}_2)$ в зависимости от $y=\mathbf{x}_2$*

Остальные составляющие решения $\mathbf{x}$ (т.е. вектор $\mathbf{x}_1$) определятся из треугольной СЛАУ

$$\mathbf{R}_1\cdot\mathbf{x}_1=\mathbf{Q}^T\cdot\mathbf{b}-\mathbf{R}_2\cdot\mathbf{x}_2. \tag{67}$$

Алгоритмы решения СЛАУ на основе QR-разложения практически одинаковы, как для хорошо обусловленных, так и для сингулярных систем.

Приведем конкретный пример решения вырожденной СЛАУ методом QR-разложения. Будем решать систему, задаваемую следующей матрицей **A** и вектором правых частей **b**:

$$A=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 4 & 5 & 6\\ 7 & 8 & 9\end{pmatrix}\ ,\quad b=\begin{pmatrix}6\\ 12\\ 24\end{pmatrix}\ . \tag{68}$$

Искомые матрицы **Q** и **R** будут иметь вид:

$$Q=\begin{pmatrix}\ldots & \ldots & \ldots\\ 0.492 & -0.302 & -0.816\\ 0.862 & 0.302 & 0.408\end{pmatrix}\qquad R=\begin{pmatrix}\ldots & \ldots & \ldots\\ 0 & -0.905 & -1.809\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\ . \tag{69}$$

Соответственно, представление (63) матрицы **R** будет содержать следующие подматрицы:

$$R1=\begin{pmatrix}\ldots & \ldots\\ 0 & -0.905\end{pmatrix}\qquad R2=\begin{pmatrix}\ldots\\ -1.809\end{pmatrix}\qquad b1=\begin{pmatrix}\ldots\\ -1.809\end{pmatrix}\ . \tag{70}$$

Согласно (65), можно выписать одно из псевдорешений:

$$x=\begin{pmatrix}1\\ 2\\ 0\end{pmatrix}\ , \tag{71}$$

норма которого, как легко убедиться, равна $|\mathbf{x}|\approx 2.24$.

Применение алгоритма (66-67) дает другое псевдорешение

$$x=\begin{pmatrix}1.5\\ 1\\ 0.5\end{pmatrix}\ , \tag{72}$$

обладающее минимальной нормой $|\mathbf{x}|\approx 1.87$. Разумеется, и (71), и (72) обеспечивают одинаковую (минимальную, т.к. являются псевдорешениями) невязку $|\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}-\mathbf{b}|\approx 2.45$.

Завершим разговор о решении СЛАУ посредством матричных разложений представлением наиболее эффективных (но и очень ресурсоемких) средств, называемых *полными ортогональными разложениями*, имеющими, по определению, вид

$$\mathbf{A}=\mathbf{U}\cdot\mathbf{K}\cdot\mathbf{V}^{\mathrm{T}}. \tag{73}$$

Здесь матрица **A** имеет размер NxM и ранг k, а **U** и **V** – это ортогональные матрицы размером NxN и MxM соответственно. Еще одна матрица **K** размера NxM имеет следующую структуру:

$$K=\begin{pmatrix} W & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\ , \qquad (74)$$

где **W** – матрица размера kxk.

Венцом современных алгоритмов решения произвольных СЛАУ является *SVD*- (английская аббревиатура singular value decomposition), или *сингулярное*, разложение. Это самое известное из ортогональных разложений имеет вид:

$$\mathbf{A}=\mathbf{U}\cdot\mathbf{S}\cdot\mathbf{V}^{\mathrm{T}}, \qquad (75)$$

где **S** – диагональная матрица, состоящая из нулей и расположенных на диагонали сингулярных чисел матрицы **A**. Согласно формуле (74), из матрицы **S** можно выделить подматрицу **W** с ненулевыми диагональными элементами.

После того, как сингулярное разложение найдено, дальнейшая последовательность действий по построению нормального псевдорешения выглядит так:

- Нахождение единственного решения вспомогательной СЛАУ:

$$\mathbf{W}\cdot\mathbf{y}=\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{b}. \qquad (76)$$

- Дополнение вектора нулевыми элементами до размера искомого вектора **x**.
- Вычисление **x** простым умножением

$$\mathbf{x}=\mathbf{V}\cdot\mathbf{y}. \qquad (77)$$

Завершим параграф решением той же вырожденной СЛАУ (68), теперь при помощи сингулярного разложения. Оно в данном случае имеет вид:

$$U=\begin{pmatrix} -0.521 & -0.25 & -0.816 \\ -0.826 & 0.388 & 0.408 \end{pmatrix} \quad V=\begin{pmatrix} -0.572 & 0.076 & -0.816 \\ -0.665 & -0.625 & 0.408 \end{pmatrix}\ . \tag{78}$$

Соответственно, блочная матрица **S** запишется следующим образом:

$$S=\begin{pmatrix} 0 & 1.068 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\ . \tag{79}$$

Применение алгоритма (76-77) дает искомые векторы:

$$y=\begin{pmatrix} -1.624 \\ 0.928 \\ 0 \end{pmatrix}\ , \quad x=\begin{pmatrix} 1.5 \\ 1 \\ 0.5 \end{pmatrix}\ . \tag{80}$$

Как вы можете убедиться, нормальное псевдорешение **x** совпадает с результатом применения QR-разложения (72).