

第一章 符号和数值混合计算

(作者: 支丽红)

1.1 引论

多项式广泛出现于科学和工程应用中. 我们可以用符号或数值的工具去处理它们. 符号计算的最主要的特点是准确性. 它的输入, 算式运算和输出都是精确的. 这就使得符号计算的速度很慢, 远远达不到实时工业应用. 另外, 现实世界中的很多问题只是近似模型, 也即数据有不同程度的误差. 比如描述机器人的运动, 它的机臂的长度, 角度以及相对位置都是近似测量值, 只有有限精度. 如何应用符号计算系统 (如 MAPLE, MATHEMATIC) 处理近似问题是大量科学和工程计算中产生的重要研究课题. 相反, 数值计算可以运用浮点运算处理近似问题, 得到近似解. 数值计算速度很快, 然而却经常不能保证结果的精度或者只能得到局部解, 不能得到所有的解.

混合计算即是把符号计算和数值计算相结合, 运用符号计算来处理近似奇异或对扰动敏感的病态问题; 而用数值方法来加速符号计算的某一部分或计算可靠的近似解.

为了对混合计算有一个初步的了解, 我们先看一个很经典的例子.

Euclid 算法

$$\begin{aligned} a(x) &= x^4 + x^3 + (1 + \epsilon)x^2 + \epsilon x + 1, b(x) = x^3 - x^2 + 3 * x - 2 \\ c(x) &= \text{rem}(a, b) = \epsilon x^2 + (\epsilon - 4)x + 5, \\ d(x) &= \text{rem}(b, c) = \left(5 - \frac{17}{\epsilon} + \frac{16}{\epsilon^2}\right)x + \left(-2 + \frac{10}{\epsilon} - \frac{20^2}{\epsilon}\right) \\ e(x) &= \text{rem}(c, d) = \frac{\epsilon^2(14\epsilon^3 - 39\epsilon^2 - 32\epsilon + 137)}{(5\epsilon^2 - 17\epsilon + 16)^2} \end{aligned}$$

如果 ϵ 是一个很小的数值, 当它小于容许误差时, 我们可以忽略 $c(x)$ 中的小项, 得到正确的 GCD 是 1. 然而, 当 ϵ 比容许误差稍微大一些时, $c(x)$ 中的小项被保留下来, 那么接下来的除法将引进很大的误差, 使得 $e(x) = O(\epsilon^2)$, 也即 $d(x)$ 被错认为是 $a(x), b(x)$ 的最大公因子.

由此可以看到并不是简单地修改符号计算的程序就可以使之适用于处理近似问题。

混合计算的三个必要步骤是：1) 利用符号和数值方法获得有效的近似解 2) 算法的稳定性分析 3) 精化近似结果。混合计算的研究范围很广，我们在本课程中将介绍以下几个方面的内容：1) 最近奇异多项式的求解 2) 两个单变元和多变元的近似最大公因子的计算。3) 多元多项式的近似因式分解 4) 多变元方程组的求解。

本课程需要符号计算和线性代数的基础知识。符号计算会在另一门短课程中介绍。在下一节中我们将复习矩阵计算中的正交变换和奇异值分解。

我们将在本课程中引用 Hans, J. Stetter 关于混合计算的定义和记号。

1.2 概念与记号

1.2.1 线形代数初步

\mathbb{R}^m 中的一组向量 $\{a_1, \dots, a_n\}$ 是线性无关如果从 $\sum_{j=1}^n \alpha_j a_j = 0$ 可以推出 $\alpha(1:n) = 0$ 。否则若有 α_i 的非平凡组合为零，则称 $\{a_1, \dots, a_n\}$ 是线性相关的。

任给一组向量 $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}^m$ 的，它的所有线性组合是一个子空间，称之为 $\{a_1, \dots, a_n\}$ 的张成空间：

$$\text{span}\{a_1, \dots, a_n\} = \left\{ \sum_{j=1}^n \beta_j a_j : \beta_j \in \mathbb{R} \right\}.$$

如果 $\{a_1, \dots, a_n\}$ 是线性无关的且 $b \in \text{span}\{a_1, \dots, a_n\}$ ，则 b 是 a_1, \dots, a_n 的唯一的线性组合。

如果 $S \subseteq \mathbb{R}^m$ 是一子空间，则可以找到线性无关的基向量满足 $S = \text{span}\{a_1, \dots, a_k\}$ 。一个子空间的所有基都有同样多的元素，这个数目是 S 的维数，记为 $\dim(S)$ 。

关于 $m \times n$ 矩阵 A 有两个重要的子空间。 A 的值域定义为

$$\text{ran}(A) = \{y \in \mathbb{R}^m : y = Ax, \forall x \in \mathbb{R}^n\}.$$

A 的零空间定义为

$$\text{null}(A) = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0\}.$$

如果 $A = [a_1, \dots, a_n]$ 是一个列分划, 则

$$\text{ran}(A) = \text{span}\{a_1, \dots, a_n\}.$$

矩阵 A 的秩定义为

$$\text{rank}(A) = \dim(\text{ran}(A)).$$

如果 $\text{rank}(A) < \min\{m, n\}$, 我们说 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 是降秩的。设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 则

$$\dim((A)) + \text{rank}(A) = n.$$

1.2.2 正交化和 SVD

正交化在矩阵计算中起非常重要的作用。一组向量 $\{x_1, \dots, x_p\} \in \mathbb{R}^m$ 是正交的当对任意 $i \neq j$ 都有 $x_i^T x_j = 0$. 如果 $x_i^T x_j = \delta_{ij}$ 则称为单位正交。如果 $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 满足 $Q^T Q = I$, I 是单位矩阵, 则称 Q 为正交矩阵。如果 $Q = [q_1, \dots, q_m]$ 是正交的, 则 q_i 形成 \mathbb{R}^m 的单位正交基。

定理 1.2.1 奇异值分解 (SVD) 设 A 是实 $m \times n$ 矩阵, 则必存在正交矩阵

$$U = [u_1, \dots, u_m] \in \mathbb{R}^{m \times m}, V = [v_1, \dots, v_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

使得

$$U^T A V = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p) \in \mathbb{R}^{m \times n}, p = \min m, n,$$

其中 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_p \geq 0$.

例 1.2.1

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} 0.96 & 1.72 \\ 2.28 & 0.96 \end{bmatrix} = U \Sigma V^T \\ &= \begin{bmatrix} 0.6 & -0.8 \\ 0.8 & 0.6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.8 & 0.6 \\ 0.6 & -0.8 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

SVD 深刻揭露了矩阵的结构。设 A 的 SVD 由上述定理给出, σ_i 是 A 的奇异值, 向量 u_i 和 v_i 分别是第 i 个左奇异向量和第 i 个左奇

异向量, $1 \leq i \leq \min\{m, n\}$. 通过比较 $AV = U\Sigma$ 以及 $A^T U = V\Sigma^T$ 的对应列容易验证

$$\begin{aligned} Av_i &= \sigma_i u_i, \\ A^T u_i &= \sigma_i v_i \end{aligned}$$

我们由

$$\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r = \cdots = \sigma_p = 0,$$

定义 r , 则

$$\text{rank}(A) = r, \quad (1.2.1)$$

$$(A) = \text{span}\{v_{r+1}, \cdots, v_n\}, \quad (1.2.2)$$

$$\text{ran}(A) = \text{span}\{u_1, \cdots, u_r\}, \quad (1.2.3)$$

设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 则

$$\|A\|_F^2 = \sigma_1^2 + \cdots + \sigma_p^2, p = \min\{m, n\} \quad (1.2.4)$$

$$\|A\|_2 = \sigma_1, \quad (1.2.5)$$

$$\min_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} = \sigma_n \quad (m \geq n). \quad (1.2.6)$$

SVD 最有价值的方面之一是帮我们很好地处理矩阵秩的概念。舍入误差和模糊数据使得秩的确定很困难。对很小的 ϵ , 我们定义 ϵ 秩为

$$\text{rank}(A, \epsilon) = \min_{\|A-B\|_2 \leq \epsilon} \text{rank}(B).$$

定理 1.2.2 设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的 SVD 由定理 ?? 给出。如果 $k < r = \text{rank}(A)$ 且

$$A_k = \sum_{i=1}^k \sigma_i u_i v_i^T, \quad (1.2.7)$$

则

$$\min_{\text{rank}(B)=k} \|A - B\|_2 = \|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}. \quad (1.2.8)$$

定理 ?? 表明 A 的最小奇异值是从 A 到所有秩亏的矩阵集合之 2 范数距离。如果 $r_\epsilon = \text{rank}(A, \epsilon)$, 则

$$\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_{r_\epsilon} > \epsilon \geq \sigma_{r_\epsilon+1} \geq \cdots \geq \sigma_p, p = \min\{m, n\}.$$

1.2.3 QR 分解

本节将讨论如何计算分解 $A = QR$, 其中 Q 是正交矩阵, R 是三角矩阵。QR 分解可以用来求解满秩的最小二乘问题。Householder 反射和 Givens 旋转是 QR 分解的核心。

设 $v \in \mathbb{R}^n$ 是非零向量。形如

$$P = I - \frac{2}{v^T v} v v^T$$

的 $n \times n$ 矩阵 P 称为 Householder 反射或变换。向量 v 称作 Householder 向量。很容易验证, $PP^T = I, P = P^T$, 也即 Householder 矩阵是对称正交的。如果用 P 去乘向量 x , 就得到向量关于超平面 $\text{span}\{v\}^\perp$ 的反射。为了使得的一个

一个 2×2 正交矩阵 Q 如有形式

$$Q = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

则称之为旋转变换。如果 $y = Q^T x$, 则 y 是通过将 x 逆时针旋转 θ 角度得到的。

例 1.2.2 假定 $x = [1, \sqrt{3}]^T$, 如果令

$$Q = \begin{bmatrix} \cos(-60^\circ) & \sin(-60^\circ) \\ -\sin(-60^\circ) & \cos(-60^\circ) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix}$$

则 $Qx = [2, 0]^T$ 。因此 -60° 的旋转使 x 的第二个分量化为零。

经常用到的符号应该先用 `\newcommand` 定义 (参见文件 `newcom.tex`)。以下列出部分常用的符号。

\prec, \succ	变元序, 多项式和三角列的秩序
A, B, C, T	升列, 基列, 特征列, 三角列
C, R, Q, Z	复数域, 实数域, 有理数域, 整数环
cls	多项式的类
coef	多项式关于某项的系数
cont	多项式关于某一变元的容度
deg	多项式关于某一变元的次数
det	方阵的行列式
gcd	多项式的最大公因子
Ideal	一组多项式生成的理想
ini	多项式的初式
\mathcal{K}	特征为 0 的数域
lc	多项式的导系数
ldeg	多项式的导次数
lv	多项式的导元
P, Q, F, G	多项式
P, F	多项式组
pquo	多项式对某个非零多项式关于某一变元的伪商
prem	多项式对某个非零多项式 (关于某一变元), 或对某个三角列的伪余式
\mathcal{R}	环
$\mathcal{R}[x]$	系数在 \mathcal{R} 中、变元为 x 的多项式环
res	两个多项式关于某一变元的结式
tdeg	多项式的全次数
Zero	多项式组或多项式系统所有零点的集合

其他概念与记号可参阅文献 [?, ?, ?].

1.3 引理和定理

引理 1.3.3 一个数学方程式会吓跑一半读者.

证 显然.

□

定理 1.3.4 数学不能没有方程式.

证 否则, 数学会被误认为是哲学, 读者会更少. □

我们应该使用简明的记号^[?, ?]使方程式变得优美, 使用适当数量的方程式使读者的数量变得适当.

1.4 第三讲

1.5 第四讲

1.6 结束语或附录

最后简要说明所讲内容的其他应用, 课外读物, 相关学科的研究与发展状况, 有待解决的科研问题等. 也可作为附录给出不能讲述但必不可少的参考材料.

下面的英文 Bibliography 将来会自动换成 参考文献.

Bibliography

- [1] 王东明: 消去法及其应用. 科学出版社, 北京 (2002).
- [2] 吴文俊: 几何定理机器证明的基本原理 (初等几何部分). 科学出版社, 北京 (1984). 英译本 (1994): Mechanical theorem proving in geometries: Basic principles. Springer, Wien New York [金小凡、王东明译].
- [3] 杨路、张景中、侯晓荣: 非线性代数方程组与定理机器证明. 上海科技教育出版社, 上海 (1996).