บทที่ 3

ซูโดอินเวอร์ส

ซูโดอินเวอร์สที่นำมาใช้กับการคำนวณปรับแก้ด้วยหลักการของลีสท์สแควร์ มีความเป็นมาและทฤษฎีที่สำคัญเกี่ยวข้องพอสรุปได้จาก "Graybill (1969)" ดังนี้

3.1 กล่าวนำ

การหาส่วนกลับปกติของเมตริกซ์นั้น เมตริกซ์ที่จะหาส่วนกลับได้ต้องเป็น เมตริกซ์จัตุรัส และมีดีเทอร์มินันต์ที่ไม่เป็นศูนย์ หรือที่เรียกว่าเมตริกซ์นอนซิงกูลาร์หรือเมตริกซ์ที่มิใช่เอกฐาน (nonsingular matrix) การหาส่วนกลับปกติได้ถูกนำมาใช้กับการแก้ปัญหาของระบบสมการเชิงเส้น ดังเช่น สมการเชิงเส้น $AX = g$

โดยที่ A เป็นเมตริกซ์นอนซิงกูลาร์ขนาด $n \times n$, X เป็นเวกเตอร์ของพารามิเตอร์ขนาด $n \times 1$ และ g เป็นเวกเตอร์ของตัวที่ทราบค่าขนาด $n \times 1$ ในการแก้ปัญหาต้องการคำนวณหาค่าของพารามิเตอร์ X ซึ่งสามารถคำนวณได้จาก $X = A^{-1}g$ เมื่อ A^{-1} เป็นส่วนกลับของเมตริกซ์ A

อย่างไรก็ตามมีหลายกรณีที่ A เป็นเมตริกซ์จัตุรัส แต่มีดีเทอร์มินันต์เป็นศูนย์หรือที่เรียกว่า เมตริกซ์ซิงกูลาร์หรือเมตริกซ์เอกฐาน (singular matrix) และถึง A จะไม่เป็นเมตริกซ์จัตุรัสก็สามารถหาส่วนกลับได้ ซึ่งในทางทฤษฎีเรียกส่วนกลับนี้ว่า ซูโดอินเวอร์ส (pseudo inverse)

3.2 คำจำกัดความของซูโดอินเวอร์ส

ให้ A เป็นเมตริกซ์ขนาด $m \times n$ มีลำดับชั้น r ถ้าเมตริกซ์ A^+ มีอยู่จริงโดยเป็นไปตามเงื่อนไข 4 ประการ ข้างล่างนี้ เมตริกซ์ A^+ นี้เรียกว่า ซูโดอินเวอร์สของเมตริกซ์ A

เงื่อนไขมีดังนี้คือ

1. AA^+ เป็นเมตริกซ์สมมาตร (symmetry)
2. A^+A เป็นเมตริกซ์สมมาตร (symmetry) .... (3-1)

3. $AA^{+}A = A$

4. $A^{+}AA^{+} = A^{+}$

ถ้า A เป็นเมตริกซ์นอนซิงกูลาร์แน่นอนว่าส่วนกลับปกติ A^{-1} จะต้องเป็นไปตามเงื่อนไขของซูโดอินเวอร์ส อย่างไรก็ตาม ถ้า A เป็นเมตริกซ์ซิงกูลาร์หรือถ้า A ไม่เป็นเมตริกซ์จัตุรัสปัญหาที่ตามมาก็คือ เมตริกซ์ A^{+} จะเป็นไปตามเงื่อนไขในสมการ (3-1) หรือไม่ ซึ่งในทางทฤษฎีแล้ว เมตริกซ์ A^{+} นั้นมีอยู่จริงและเป็นเอกภาพด้วย คุณสมบัติของซูโดอินเวอร์สจะพิจารณาจากทฤษฎีที่จะกล่าวถึงต่อไป ตัวเลขในวงเล็บต่อท้ายทฤษฎีแสดงถึงทฤษฎีที่อ้างอิง

3.3 <u>ทฤษฎีของซูโดอินเวอร์ส</u>

3.3.1 ทฤษฎีเบื้องต้น

เป็นทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับสมการ (3-1) สำหรับตรวจสอบคุณสมบัติของซูโดอินเวอร์ส ซึ่งมีทฤษฎีที่สำคัญดังต่อไปนี้

1. ทฤษฎีที่ 1 (6.2.1)

เมตริกซ์ A ขนาด $m \times n$ ซูโดอินเวอร์สของเมตริกซ์ A จะมีขนาด $n \times m$

2. ทฤษฎีที่ 2 (6.2.2)

A เป็นเมตริกซ์ศูนย์ (null matrix) ดังนั้น A^{+} จะเป็นเมตริกซ์ศูนย์ ขนาด $n \times m$

3. ทฤษฎีที่ 3 (6.2.3)

สำหรับเมตริกซ์ A ใด ๆ จะมี A^{+} เป็นเมตริกซ์ที่เป็นไปตามเงื่อนไขของสมการ (3-1) นั่นคือ เมตริกซ์ใด ๆ จะต้องมีซูโดอินเวอร์ส

4. ทฤษฎีที่ 4 (6.2.4)

สำหรับเมตริกซ์ A ใด ๆ จะมี A^{+} เป็นเมตริกซ์เดียวเท่านั้น ที่เป็นไปตามเงื่อนไขของสมการ (3-1) นั่นคือ เมตริกซ์ A ใด ๆ จะมีซูโดอินเวอร์สเพียงอันเดียว

5. ทฤษฎีที่ 5 (6.2.5)

ซูโดอินเวอร์สของเมตริกซ์ A ทรานสโพส จะเท่ากับทรานสโพสของซูโดอินเวอร์สของเมตริกซ์ A นั่นคือ $(A')^{+} = (A^{+})'$

6. ทฤษฎีที่ 6 (6.2.6)

ซูโดอินเวอร์สของ A^{+} จะเท่ากับ A

7. ทฤษฎีที่ 7 (6.2.7)

ลำดับชั้นของซูโดอินเวอร์สของ A จะเท่ากับลำดับชั้นของ A

7.1 บทแทรก (6.2.7.1)

ถ้าลำดับชั้นของเมตริกซ์ A เท่ากับ r แล้ว ลำดับชั้นของเมตริกซ์ต่อไปนี้จะเท่ากับ r ด้วยคือ A^+, AA^+, A^+A, AA^+A, A^+AA^+

8. ทฤษฎีที่ 8 (6.2.8)

สำหรับเมตริกซ์ A ใด ๆ จะได้ $(A'A)^+ = A^+(A')^+$

9. ทฤษฎีที่ 9 (6.2.9)

สำหรับเมตริกซ์ A ใด ๆ จะได้ $(AA^+)^+ = AA^+$ และ $(A^+A)^+ = A^+A$

10. ทฤษฎีที่ 10 (6.2.10)

ให้ P เป็นเมตริกซ์ออร์โธโกนัล (orthogonal matrix) ขนาด $m \times m$, Q เป็นเมตริกซ์ออร์โธโกนัล ขนาด $n \times n$ และ A เป็นเมตริกซ์ใด ๆ ขนาด $n \times m$ ดังนั้นจะได้ $(PAQ)^+ = Q'A^+P'$

11. ทฤษฎีที่ 11 (6.2.11)

ถ้า A เป็นเมตริกซ์สมมาตรซูโดอินเวอร์สของ A จะสมมาตรด้วยนั่นคือ ถ้า $A = A'$ จะได้ $A^+ = (A^+)'$

12. ทฤษฎีที่ 12 (6.2.12)

ถ้า $A = A'$ จะได้ $AA^+ = A^+A$

13. ทฤษฎีที่ 13 (6.2.13)

ถ้า A เป็นเมตริกซ์นอนซิงกูลาร์ จะได้ $A^{-1} = A^+$

14. ทฤษฎีที่ 14 (6.2.14)

ถ้า A เป็นเมตริกซ์ซิมเมตริกซ์ไอเดมโพเทนต์ (symmetric idempotent matrix) จะได้ $A^+ = A$

15. ทฤษฎีที่ 15 (6.2.15)

ให้ D เป็นเมตริกซ์ทแยงมุม (diagonal matrix) มีสมาชิก (element) เป็น d_{ii}; $i = 1, 2, \ldots\ldots, n$ ซูโดอินเวอร์ส D^+ ของ D เป็นเมตริกซ์ทแยงมุม จะมีสมาชิกเป็น d_{ii}^{-1} ถ้า $d_{ii} \neq 0$ และเท่ากับศูนย์ ถ้า $d_{ii} = 0$

16. ทฤษฎีที่ 16 (6.2.16)

ถ้า A เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m \times n$ มีลำดับชั้น m จะได้ $A^{+} = A'(AA')^{-1}$ และ $AA^{+} = I$ ถ้าลำดับชั้นของ A เท่ากับ n จะได้ $A^{+} = (A'A)^{-1}A'$ และ $A^{+}A = I$

17. ทฤษฎีที่ 17 (6.2.17)

เมตริกซ์ต่อไปนี้ทั้งหมดเป็นเมตริกซ์ซิมเมตริกซ์ไอเดมโพเทนต์คือ AA^{+}, $A^{+}A$, $I - AA^{+}$ และ $I - A^{+}A$

18. ทฤษฎีที่ 18 (6.2.18)

ถ้า B เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m \times r$ มีลำดับชั้น r $(r > 0)$ และให้ C เป็นเมตริกซ์ ขนาด $r \times m$ มีลำดับชั้น r จะได้ $(BC)^{+} = C^{+}B^{+}$

3.3.2 ทฤษฎีเกี่ยวกับระบบสมการเชิงเส้น

พิจารณาสมการเชิงเส้น $AX = g$ .... (3-2)

เมื่อ A เป็นเมตริกซ์ที่ทราบค่า ขนาด $m \times n$, g เป็นเวกเตอร์ที่ทราบค่า ขนาด $m \times 1$ และ X เป็นเวกเตอร์ที่ไม่ทราบค่า ขนาด $n \times 1$ ซึ่งต้องการทราบทราบคำตอบในการพิจารณา ถ้าเวกเตอร์ X ให้คำตอบที่สอดคล้องกับระบบสมการเพียงชุดเดียว ระบบสมการนี้จะถูกเรียกว่าเป็น consistent ถ้านอกเหนือจากนี้คือ เวกเตอร์ X ให้คำตอบมากกว่า 1 ชุด ระบบสมการนี้จะถูกเรียกว่าเป็น inconsistent ทฤษฎีที่สำคัญมีดังนี้

1. ทฤษฎีที่ 1 (6.3.1)

ระบบสมการในสมการ (3-2) จะเป็น consistent ก็ต่อเมื่อ $AA^{+}g = g$ เท่านั้น

2. ทฤษฎีที่ 2 (6.3.2)

ถ้าระบบสมการเชิงเส้น $AX = g$ ในสมการ (3-2) มีคำตอบ ดังนั้นสำหรับแต่ละเวกเตอร์ h และทุกเวกเตอร์ h ขนาด $n \times 1$ เวกเตอร์ X คือ คำตอบ

โดยที่ $X = A^{+}g + (I - A^{+}A)h$ .... (3-3)

ในทุกคำตอบของระบบสมการสำหรับเวกเตอร์ h ขนาด $n \times 1$ สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของสมการ (3-3) ได้

3. ทฤษฎีที่ 3 (6.3.3)

ถ้า A เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m_1 \times m_2$, X เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m_2 \times m_3$, B เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m_3 \times m_4$ และ C เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m_1 \times m_4$ ดังนั้นเงื่อนไขที่จำเป็นและเหมาะสำหรับเมตริกซ์ X ซึ่งสอดคล้องกับสมการเมตริกซ์ $AXB = C$ ก็คือ $AA^+CB^+B = C$; คำตอบของสมการในรูปทั่วไปคือ

$$X = A^+CB + H - A^+AHBB^+$$

โดยที่ H เป็นเมตริกซ์ใด ๆ ขนาด $m_2 \times m_3$

3.3.3 ทฤษฎีเกี่ยวกับเมตริกซ์พิเศษ

ทฤษฎีที่สำคัญมีดังนี้

1. ทฤษฎีที่ 1 (6.4.1)

ถ้า c เป็นปริมาณสกาลาร์ที่ไม่เป็นศูนย์ (nonzero scalar) จะได้ $(cA)^+ = (1/c)\ A^+$

2. ทฤษฎีที่ 2 (6.4.3)

ให้ A เป็นเมตริกซ์ใด ๆ ขนาด $n \times m$, ให้ K เป็นเมตริกซ์นอนซิงกูลาร์ขนาด $m \times m$ และ $B = AK$ จะได้ $BB^+ = AA^+$

3. ทฤษฎีที่ 3 (6.4.4)

ถ้า $A'A = AA'$ จะได้ $A^+A = AA^+$ และ $(A^n)^+ = (A^+)^n$ สำหรับค่า n ที่เป็นเลขจำนวนเต็มบวก

4. ทฤษฎีที่ 4 (6.4.5)

ถ้า $A = \begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix}$ และ $BC' = 0$ ดังนั้น $A^+ = \begin{bmatrix} B^+ & C^+ \end{bmatrix}$

$A^+A = B^+B + C^+C$ และ $AA^+ = \begin{bmatrix} BB^+ & 0 \\ 0 & CC^+ \end{bmatrix}$

5. ทฤษฎีที่ 5 (6.4.7)

ถ้า $A = \begin{bmatrix} B & 0 \\ 0 & C \end{bmatrix}$ ดังนั้นจะได้ $A^+ = \begin{bmatrix} B^+ & 0 \\ 0 & C^+ \end{bmatrix}$

$$A^+A = \begin{bmatrix} B^+B & 0 \\ 0 & C^+C \end{bmatrix} \quad \text{และ} \quad AA^+ = \begin{bmatrix} BB^+ & 0 \\ 0 & CC^+ \end{bmatrix}$$

6. ทฤษฎีที่ 6 (6.4.8)

ถ้า a เป็นเวกเตอร์ที่ไม่เป็นศูนย์ (nonzero vector) จะได้

$a^+ = (a'a)^{-1}a'$

7. ทฤษฎีที่ 7 (6.4.9)

ถ้า A เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m \times n$ สมาชิก (element) ทุกตัวมีค่าเป็น 1 จะได้ $A^+ = \frac{1}{nm} A'$

8. ทฤษฎีที่ 8 (6.4.10)

$A^+ = A'$ ก็ต่อเมื่อ $A'A$ เป็นไอเดมโพเทนต์ (idempotent) เท่านั้น

3.3.4 ทฤษฎีสำหรับคำนวณซูโดอินเวอร์ส

ทฤษฎีที่สำคัญมีดังนี้

1. ทฤษฎีที่ 1 (6.5.1)

ให้ A เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m \times t$ ให้ A_{t-1} เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m \times (t - 1)$ ซึ่งประกอบด้วย $t - 1$ คอลัมน์แรกของ A, และให้ a_t เป็นคอลัมน์ที่ t ของ A ดังนั้น A สามารถเขียนได้เป็น

$$A = \left[A_{t-1}, a_t \right]$$

ซูโดอินเวอร์สของ A เท่ากับ B ซึ่ง

$$B = \begin{bmatrix} A^+_{t-1} - A^+_{t-1} a_t b^+_t \\ b^+_t \end{bmatrix}$$

โดยที่เวกเตอร์ b^+_t ขนาด $1 \times m$ คือ ซูโดอินเวอร์สของ b^t ซึ่งแสดงได้โดย

$$b_t = \begin{cases} (I-A_{t-1}A^+_{t-1})a_t & : \ a_t \neq A_{t-1}A^+_{t-1}a_t \\ \dfrac{1+a'_t(A_{t-1}A'_{t-1})^+a_t \ \ (A_{t-1}A'_{t-1})^+a_t}{a'_t \ (A_{t-1}A'_{t-1})^+ \ \ (A_{t-1}A'_{t-1})^+a_t} & : \ a_t = A_{t-1}A^+_{t-1}a_t \end{cases}$$

2. ทฤษฎีที่ 2 (2.5.2)

ให้ A เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m \times n$ โดย $n < m$ และให้ B เป็นเมตริกซ์ขนาด $n \times n$ ซึ่งทำให้ $(A'A)^2B = A'A$ ซูโดอินเวอร์สของ A จะหาได้จาก

$$A^+ = B'A'$$

2.1 บทแทรก (6.5.2.1)

ให้ A เป็นเมตริกสมมาตรใด ๆ ขนาด $n \times n$ ซูโดอินเวอร์สของ A จะถูกกำหนดได้โดย $B'AB$ โดยที่ B เป็นคำตอบของสมการ $A^2B = A$

3. ทฤษฎีที่ 3 (6.5.3)

ถ้า B เป็นเมตริกซ์สมมาตรซูโดอินเวอร์สของ B จะถูกกำหนดได้โดย $B^+ = (BK)^2B$ โดยที่ K เป็นคำตอบใด ๆ ของสมการ

$$B^2KB^2 = B^2$$

4. ทฤษฎีที่ 4 (6.5.4)

ให้ B เป็นเมตริกซ์สมมาตร ขนาด $m \times m$ ลำดับชั้น r และให้ P เป็นเมตริกซ์นอนซิงกูลาร์ ขนาด $m \times m$ ที่ทำให้

$$P'B^2P = \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = R_r$$

แล้วเมตริกซ์ K ซึ่งสอดคล้องในสมการ $B^2KB^2 = B^2$ จะถูกกำหนดได้โดย

$$K = PR_rP'$$

ข้อสังเกต ถ้า B เป็นเมตริกซ์นอนซิงกูลาร์จะได้

$$K = (B^{-1})^2 \quad \text{และ} \quad B^+ = B^{-1} = KB$$

5. ทฤษฎีที่ 5 (6.5.5)

ให้ A เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m \times m$ ซูโดอินเวอร์สของ A หาได้จาก

$$A^+ = (A'AK)^2 A'AA'$$

โดยที่ K เป็นคำตอบใด ๆ ของสมการ $(A'A)^2K(A'A)^2 = (A'A)^2$

6. ทฤษฎีที่ 6 (6.5.6)

ให้ A เป็นเมตริกซ์ ขนาด $n \times m$ ลำดับชั้น r โดยที่ $r > 0$ และให้ A ถูก-แบ่งเป็นส่วนดังนี้

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$$

โดยที่ A_{11} เป็นเมตริกซ์ ขนาด $r \times r$ และขนาดของเมตริกซ์ย่อยที่เหลือสามารถหาได้ เมตริกซ์ A สามารถเขียนได้ใหม่เป็น

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} \end{bmatrix}$$

7. ทฤษฎีที่ 7 (6.5.7)

ให้ A เป็นเมตริกซ์ ขนาด $n \times m$ ลำดับชั้น r โดยที่ $0 < r$, $r < m$ และ $r < n$ ถ้า A ถูกแบ่งเป็นส่วนดังนี้

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}$$

โดยที่ A_{11} เป็นเมตริกซ์ ขนาด $r \times r$ ลำดับชั้น r และสามารถหาขนาดของเมตริกซ์ย่อยที่เหลือได้ ซึ่งซูโดอินเวอร์สของ A ถูกกำหนดได้โดย

$$\begin{bmatrix} A'_{11}BA'_{11} & A'_{11}BA'_{21} \\ A'_{12}BA'_{11} & A'_{12}BA'_{21} \end{bmatrix}$$

โดยที่ $B = (A_{11}A_{11} + A_{12}A'_{12})^{-1}A_{11}(A'_{11}A_{11} + A'_{21}A_{21})^{-1}$

8. ทฤษฎีที่ 8 (6.5.8)

ให้ A เป็นเมตริกซ์ ขนาด $m \times n$ ลำดับชั้น r ดังนั้นซูโดอินเวอร์สของ A สามารถคำนวณได้จากขั้นตอนต่อไปนี้

1. คำนวณ $B = A'A$
2. ให้ $C_1 = I$
3. คำนวณ $C_{i+1} = I(1/i)tr(C_iB) - C_iB$ สำหรับ $i = 1, 2, \ldots\ldots, r - 1$

4. คำนวณ $rC_rA'/tr(C_rB)$ และที่คำนวณได้นี้คือ A^+

ทั้งนี้ $C_{r+1}B = 0$ และ $tr(C_rB) \neq 0$ ด้วย

สำหรับการหาซูโดอินเวอร์สของการวิจัยนี้ ได้เลือกเอาวิธีการคำนวณตามทฤษฎีที่ 7 ของหัวข้อที่ 3.3.4 มาใช้ เนื่องจากสามารถคำนวณตามกระบวนการของพีชคณิตเมตริกซ์ได้โดยตรง

3.4 ประโยชน์ทางการประยุกต์ของซูโดอินเวอร์ส

1. การนำเทคนิคของซูโดอินเวอร์สมาใช้แก้ปัญหาระบบสมการเชิงเส้น สามารถให้คำตอบที่เป็นเอกภาพ (unique) ได้

2. คำตอบจากการแก้ปัญหาระบบสมการเชิงเส้น $AX = g$ คือ ค่าของ X ซึ่งทำให้ $X'X$ มีค่าน้อยที่สุด ($X'X \rightarrow$ minimum)

3. ในการประยุกต์เข้ากับวิธีการคำนวณปรับแก้ สามารถศึกษาเรขาคณิตภายใน (inner geometry) ได้ โดยที่ยังไม่มีอิทธิพลจากภายนอกมาเกี่ยวข้อง