Formularium NMB

19 mei 2014

Klassieke Gram–Schmidt

for $j = 1, \dots, n$ **do**
- $v_j = a_j$
- **for** $i = 1, \dots, j-1$ **do**
  - $r_{ij} = q_i^* a_j$
  - $v_j = v_j - r_{ij} q_i$
- $r_{jj} = \|v_j\|_2$
- $q_j = v_j / r_{jj}$

Gewijzigde Gram–Schmidt:

for $i = 1, \dots, n$ **do**
- $v_i = a_i$

for $i = 1, \dots, n$ **do**
- $r_{ii} = \|v_i\|$
- $q_i = v_i / r_{ii}$
- **for** $j = i+1, \dots, n$ **do**
  - $r_{ij} = q_i^* v_j$
  - $v_j = v_j - r_{ij} q_i$

Householder:

for $k = 1, \dots, n$ **do**
- $x = A_{k:m,k}$
- $v_k = \text{sign}(x_1)\|x\|e_1 + x$
- $v_k = v_k / \|v_k\|$
- $A_{k:m,k:n} = A_{k:m,k:n} - 2v_k(v_k^* A_{k:m,k:n})$

Terugsubstitutie:

$$\begin{aligned} x_m &= b_m / r_{mm} \\ x_{m-1} &= \left(b_{m-1} - x_m r_{m-1,m}\right) / r_{m-1,m-1} \\ &\vdots \\ x_j &= \left(b_j - \sum_{k=j+1}^{m} x_k r_{jk}\right) / r_{jj} \end{aligned}$$

Gauss eliminatie zonder pivotering:

$U = A, L = I$
for $k = 1, \ldots, m-1$ **do**
  for $j = k+1, \ldots, m$ **do**
    $l_{jk} = u_{jk} / u_{kk}$
    $u_{j,k:m} = u_{j,k:m} - l_{jk} u_{k,k:m}$

Fundamenteel axioma voor floating point berekeningen:

Voor alle $x, y \in \mathbb{F}$ bestaat er een ϵ met $|\epsilon| \leq \epsilon_{\text{machine}}$ zodanig dat $x \circledast y = (x * y)(1 + \epsilon)$.

Sensiviteiten voor perturbaties in kleinstekwadratenprobleem:

Neem $b \in \mathbb{C}^m$ en $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ van volle rang. Het kleinste kwadratenprobleem $Ax = b$ heeft de volgende relatieve conditienummers (in 2-norm) met de volgende sensitiviteiten voor $y = Ax$ en x t.g.v. perturbaties in b en A:

	y	x
b	$\frac{1}{\cos\theta}$	$\frac{\kappa(A)}{\eta \cos\theta}$
A	$\frac{\kappa(A)}{\cos\theta}$	$\kappa(A) + \frac{\kappa(A)^2 \tan\theta}{\eta}$

De resultaten in de eerste rij zijn exact en worden bereikt voor zeker perturbaties δb. De resultaten in de tweede rij zijn bovengrenzen.

Rayleigh Quotiënt Iteratie

$v^{(0)}$ = een vector met $||v^{(0)}|| = 1$
$\lambda^{(0)} = \left(v^{(0)}\right)^{\mathrm{T}} A v^{(0)}$ = overeenkomstig Rayleigh quotiënt
for $k = 1, 2, \ldots$ **do**
  Los $(A - \lambda^{(k-1)} I) w = v^{(k-1)}$ op naar w (pas $\left(A - \lambda^{(k-1)} I\right)^{-1}$ toe)
  $v^{(k)} = w / ||w||$ (normaliseer)
  $\lambda^{(k)} = \left(v^{(k)}\right)^{\mathrm{T}} A v^{(k)}$ (Rayleigh quotiënt)

Pure QR algorithm

$A^{(0)} = A$
for $k = 1, 2, \dots$ **do**
  $Q^{(k)}R^{(k)} = A^{(k-1)}$ (QR factorizatie van $A^{(k-1)}$)
  $A^{(k)} = R^{(k)}Q^{(k)}$ (Hercombineer factoren in omgekeerde volgorde)

Praktisch QR algoritme

$(Q^{(0)})^{\mathrm{T}} A^{(0)} Q^{(0)} = A$ ($A^{(0)}$ is een tridiagonalisatie van A)
for $k = 1, 2, \dots$ **do**
  Kies een shift $\mu^{(k)}$ (bijvoorbeeld, kies $\mu^{(k)} = A_{mm}^{(k-1)}$)
  $Q^{(k)}R^{(k)} = A^{(k-1)} - \mu^{(k)}I$ (QR factorizatie van $A^{(k-1)} - \mu^{(k)}I$)
  $A^{(k)} = R^{(k)}Q^{(k)} + \mu^{(k)}I$ (Hercombineer factoren in omgekeerde volgorde)
  Als een niet-diagonaal element $A_{j,j+1}^{(k)}$ voldoende dicht bij nul ligt:
    Zet $A_{j,j+1} = A_{j+1,j} = 0$ zodat
    $\begin{bmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{bmatrix} = A^{(k)}$
    en voer het QR algoritme uit op A_1 en A_2.

Gelijktijdige iteratie

Kies een $\hat{Q}^{(0)} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ met orthonormale kolommen
for $k = 1, 2, \dots$ **do**
  $Z = A\hat{Q}^{(k-1)}$
  $\hat{Q}^{(k)}\hat{R}^{(k)} = Z$ (Gereduceerde QR factorizatie van Z)

Wilkinson shift

Noem de rechter beneden 2×2 submatrix van A

$$B = \begin{bmatrix} a_{m-1} & b_{m-1} \\ b_{m-1} & a_m \end{bmatrix},$$

dan is de Wilkinson shift $\mu = a_m - \mathrm{sign}(\delta) b_{m-1}^2 / \left(|\delta| + \sqrt{\delta^2 + b_{m-1}^2}\right)$, met $\delta = (a_{m-1} - a_m)/2$. Als $\delta = 0$, dan kan $\mathrm{sign}(\delta)$ vrij gekozen worden.

Recursiebetrekking voor bisectie

$p^{(k)}(x) = (a_k - x)p^{(k-1)}(x) - b_{k-1}^2 p^{(k-2)}(x)$, met $p^{(-1)}(x) = 0$ en $p^{(0)} = 1$ voor $k = 1, 2, \dots, m$.