NLA Oefenzitting 1: QR-factorisatie en Kleinste Kwadraten

Nico Vervliet
Nico.Vervliet@esat.kuleuven.be

6 maart 2018

Overzicht

Definities

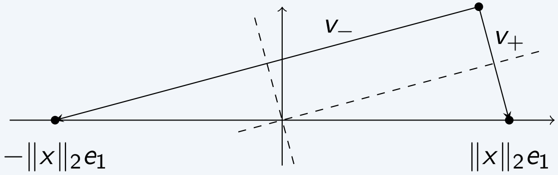
- Projectie $P^2 = P$
  - Px is de projectie van x in de kolomruimte van P
- Complementaire projectie $I - P$
  - $(I - P)x$ is de projectie van x in de nulruimte van P
- Orthogonale projectie $P = P^T$
- Orthogonale matrix $Q^T Q = I$
- Projectie op range$(\hat{Q})$: $P = \hat{Q}\hat{Q}^T$
- Rang 1 orthogonale projectie $P = qq^T$

QR-factorisatie

- Definitie $A = QR$, Q orthogonaal, R bovendriehoeks
- Bestaat en is 'enig' (op teken na)
- Triangulaire orthogonalisatie
  - Klassieke Gram-Schmidt
  - Gewijzigde Gram-Schmidt ($2mn^2$)
- Orthogonale triangularisatie
  - Householder QR ($2mn^2 - 2/3n^3$)
  - Givens QR ($3mn^2 - n^3$)

Idee

- Doel: nullen introduceren in kolom via orthogonale transformatie



- Householder reflectoren

$$F = I - 2\frac{vv^T}{v^T v} \qquad v = x \pm \|x\|_2 e_1 \qquad Fx = \mp \|x\|_2 e_1$$

Voorbeeld

- Voorbeeld:

$$\begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{F} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \mathbf{0} & \times \\ 0 & \mathbf{0} & \times \\ 0 & \mathbf{0} & \times \end{bmatrix}$$

- Toepassen: nooit matrix F vormen

$$FA = A - vw^T, \qquad w = \beta A^T v, \qquad \beta = 2/(v^T v)$$

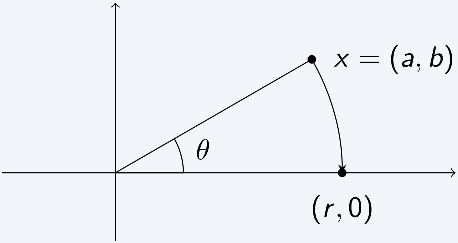
- Rekenkost: $2mn^2 - \frac{2}{3}n^3$

Eigenschappen reflectoren

- Eigenschappen:
  - $Fv = v - 2v\frac{v^Tv}{v^Tv} = v - 2v = -v$
  - $Fy = y - 2v\frac{v^Ty}{v^Tv} = y \qquad \forall y : v^Ty = 0$
  - $F = F^T$, $F^{-1} = F^T$
  - $\lambda_1 = -1$, $\lambda_i = 1, \quad i \neq 1$
  - $\det F = \prod \lambda_i = -1$
  - $\sigma_i = 1$

Idee

- Doel: selectief nul introduceren via rotatie



- Wiskundig:

$$\begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Let op: θ is positief in tegenwijzerzin
- Rekenkost : $3mn^2 - n^3$
- Selectiever, maar duurder dan Householder (factor 3/2)

Idee

- Voorstelling : $c = \cos(\theta)$, $s = \sin(\theta)$

$$G(i,k,\theta) = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & c & \cdots & s & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & -s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

- Toepassen: $G_l^{\mathsf{T}} \cdots G_1^{\mathsf{T}} A = R$

Voorbeeld

- Voorbeeld

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & c & & s & \\ & & 1 & & \\ & -s & & c & \\ & & & & 1 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \mathbf{0} & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \times \\ 0 & 0 & \times \end{bmatrix}$$

- Rekenkost : $3mn^2 - n^3$
- Selectiever, maar duurder dan Householder (factor 3/2)

Idee

- Variant op Givenstransformatie:

$$A = (MD^{-1/2})(D^{-1/2}T)$$

- met volgende eigenschappen
  - $Q = MD^{-1/2}$
  - $M^TM = D = diag(d_i),\ d_i > 0$
  - $Q^TQ = (MD^{-1/2})^TMD^{-1/2} = I$
  - $R = D^{-1/2}T$
  - T is bovendriehoeks
- Herhalen: stel $M = N_1N_2\cdots N_k$
  - kies N_1 zodat $N_1^TN_1 = D_1$ diagonaal
  - kies N_2 zodat $N_2^TD_1N_2 = D_2$ diagonaal
  - kies N_k zodat $N_k^TD_{k-1}N_k = D_k$ diagonaal
  - dan $M^TM = D_k$
  - bovendien nullen introduceren met N_i

Snelle Givenstransformatie: Type 1

$$\text{Type 1}: \qquad M_1 = \begin{bmatrix} \beta_1 & 1 \\ 1 & \alpha_1 \end{bmatrix}$$

- gegeven $x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}^T$, $D = diag(d_1, d_2)$
- als $x_2 \neq 0$ neem $\alpha_1 = -x_1/x_2$ en $\beta_1 = -\alpha_1 d_2/d_1$

$$M_1^T x = \begin{bmatrix} x_2(1+\gamma_1) \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$M_1^T D M_1 = \begin{bmatrix} d_2(1+\gamma_1) & 0 \\ 0 & d_1(1+\gamma_1) \end{bmatrix} =: D_1$$

- met $\gamma_1 = -\alpha_1\beta_1 = (d_2/d_1)(x_1/x_2)^2$

Snelle Givenstransformatie: Type 2

$$\text{Type 2}: \qquad M_2 = \begin{bmatrix} 1 & \alpha_2 \\ \beta_2 & 1 \end{bmatrix}$$

- gegeven $x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}^T$, $D = diag(d_1, d_2)$
- als $x_1 \neq 0$ neem $\alpha_2 = -x_2/x_1$ en $\beta_2 = -\alpha_2 d_1/d_2$

$$M_2^T x = \begin{bmatrix} x_1(1+\gamma_2) \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$M_2^T D M_2 = \begin{bmatrix} d_1(1+\gamma_2) & 0 \\ 0 & d_2(1+\gamma_2) \end{bmatrix} =: D_2$$

- met $\gamma_2 = -\alpha_2\beta_2 = (d_1/d_2)(x_2/x_1)^2$

Voorbeeld

- Voorbeeld: $M(i,j)^\mathsf{T} T_k = T_{k+1}$

$$
\begin{bmatrix}
1 & & & & \\
 & \beta_1 & & 1 & \\
 & & 1 & & \\
 & 1 & & \alpha_1 & \\
 & & & & 1
\end{bmatrix}^\mathsf{T}
\begin{bmatrix}
\times & \times & \times \\
0 & \times & \times \\
0 & \times & \times \\
0 & \times & \times \\
0 & 0 & \times
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
\times & \times & \times \\
\mathbf{0} & \times & \times \\
0 & \times & \times \\
\mathbf{0} & \mathbf{0} & \times \\
0 & 0 & \times
\end{bmatrix}
$$

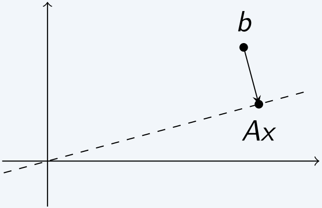
- Rekenkost : $2mn^2 - \frac{2}{3}n^3$
- Selectief en even duur als Householder
- Interessant voor ijle matrices

Groeifactoren

- Groeifactoren $1 + \gamma_i$
- $\gamma_1\gamma_2 = 1$
- Kies type zodat $1 + \gamma_i \leq 2$
- Groeifactor beperken tot 2
- Rekening houden met overflow

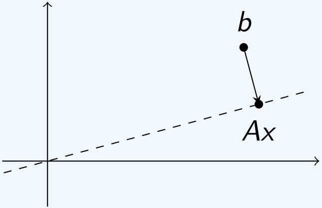
Kleinste kwadratenproblemen

- Definitie: x zodat $\|b - Ax\|_2$ minimaal $(m > n)$



Kleinste kwadratenproblemen

- Definitie: x zodat $\|b - Ax\|_2$ minimaal ($m > n$)

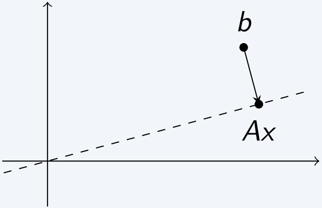


- Normaalvergelijkingen : $n \times n$ stelsel oplossen met Cholesky

$$A^T Ax = A^T b$$

Kleinste kwadratenproblemen

- Definitie: x zodat $\|b - Ax\|_2$ minimaal ($m > n$)



- Normaalvergelijkingen : $n \times n$ stelsel oplossen met Cholesky
$$A^T A x = A^T b$$
- QR : $A = \hat{Q}\hat{R}$, driehoekig stelsel oplossen
$$\hat{R}x = \hat{Q}^T b$$
- SWO : $A = \hat{U}\hat{\Sigma}V^T$, diagonaal stelsel oplossen
$$\hat{\Sigma}w = \hat{U}^T b, \qquad x = Vw$$

Snelle Givens kleinste kwadraten

- Grote delen worden nul:

$$M^T A = \begin{bmatrix} T_1 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad M^T b = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} \} \; n \\ \} \; m-n \end{matrix}$$

- Invullen in KKB:

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2 &= \|Q^T(Ax - b)\|_2 \\ &= \|D^{-1/2} M^T (Ax - b)\|_2 \\ &= \left\| D^{-1/2} \left(\begin{bmatrix} T_1 \\ 0 \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \right) \right\|_2 \end{aligned}$$

- Wat overblijft:

$$T_1 x = c_1 \quad \rightarrow \quad x_{KK}$$