NMB - Oefenzitting 1: QR-factorisatie en kleinste kwadratenproblemen

Hendrik Speleers

Overzicht

Definities

- Projectie $P^2 = P$
- Complementaire projectie $I - P$
- 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 $P = qq^T$

Householdertransformatie

- Doel : nullen introduceren in kolom via orthogonale transformatie
- Voorstelling :

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

$$v = x \pm \|x\|_2 e_1$$

$$Fx = \mp \|x\|_2 e_1$$

- Grafisch
- Keuze teken
- Toepassen : nooit matrix F vormen

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

Householdertransformatie

- Rekenkost :

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

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

Givenstransformatie

- Doel : nul introduceren via orthogonale transformatie
- Voorstelling : $c = \cos(\theta)$, $s = \sin(\theta)$

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

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

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 ($3mn^2 - n^3$)

Kleinste kwadratenproblemen

- Definitie : x zodat $\|b - Ax\|_2$ minimaal $(m > n)$
- Grafisch
- Normaalvergelijkingen : $n \times n$ stelsel oplossen met Cholesky

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

- 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 Givenstransformatie

- Variant op Givenstransformatie
- Slimme voorstelling van Q :
  - $Q = MD^{-1/2}$
  - $M^T M = D = \text{diag}(d_i),\ d_i > 0$
  - $Q^T Q = (MD^{-1/2})^T MD^{-1/2} = I$
- Herhalen : stel $M = N_1 N_2 \cdots N_k$
  - kies N_1 zodat $N_1^T N_1 = D_1$ diagonaal
  - kies N_2 zodat $N_2^T D_1 N_2 = D_2$ diagonaal
  - kies N_k zodat $N_k^T D_{k-1} N_k = D_k$ diagonaal
  - dan $M^T M = D_k$
  - 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 $x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}^T$, $D = \text{diag}(d_1, d_2)$
- 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 $x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}^T$, $D = \operatorname{diag}(d_1, d_2)$
- 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 $\gamma_2 = -\alpha_2\beta_2 = (d_1/d_2)(x_2/x_1)^2$

Snelle Givenstransformatie

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

Snelle Givens QR

- Gegeven A
- Bereken (M, D) met M niet-singulier, D diagonaal zodat $M^T A = T$ bovendriehoeks en $M^T M = D$
- $Q = MD^{-1/2}$ orthogonaal en $Q^T A = D^{-1/2} T \equiv R$ bovendriehoeks
- Analoog aan Givens QR (selectie van nullen)
- Rekenkost : $2n^2(m - n/3)$ flops
- Rekening houden met overflow
- Erg interessant voor ijle matrices

Snelle Givens kleinste kwadraten

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

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

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