QR - GS - H

Juan Pablo Pinasco (jpinasco@dm.uba.ar//gmail.com)

Departamento de Matemática e IMAS,
FCEyN, UBA - CONICET

2020

Menú del día:

- GS
- QR
- H

Próxima:

- Iterativos: 40-59
- Jacobi
- Gauss Seidel
- SOR no.-

Parte I

GS-QR-H

1.- Gram-Schmidt

Sean $\{a_1, \dots, a_n\}$ vectores l.i. en $\mathbb{R}^m$ con $m \geq n$.

Queremos $\{q_1, \dots, q_n\}$ todos ortonormales (ortogonales entre sí, $\|q_j\|_2 = 1$).

Solución:

$v_1 = a_1$
$r_{11} = \langle v_1, v_1 \rangle^{1/2}$
$q_1 = v_1 / r_{11}$
for $j = 2 : n$
    $v_j = a_j$
    for $i = 1 : j - 1$
        $r_{ij} = \langle q_i, a_j \rangle$
        $v_j = v_j - r_{ij} q_i$
    end
    $r_{jj} = \langle v_j, v_j \rangle^{1/2}$
    $q_j = v_j / r_{jj}$
end

Dada $A = (a_1|a_2|\cdots|a_n) \in \mathbb{R}^{m\times n}$, con $m \geq n$.

Sean $\hat{Q} = (q_1|q_2|\cdots|q_n)$ y $\hat{R} = (r_{ij})$ de la página anterior.

Entonces,

$$A = \hat{Q}\hat{R}$$

donde $\hat{R}$ es triangular superior, y $\hat{Q}$ es ortogonal, es decir, $\hat{Q}^t = \hat{Q}^{-1}$.

Householder es un método mejor para calcular $A = QR$, porque Gram-Schmidt es inestable y causa muchos errores.

Sea $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ con $m \geq n$.

for $k = 1 : n$

  $x = A_{k:m,k}$ # columna k, desde el lugar k

  $v_k = sign(x_1)\|x\|_2 e_1 + x$ # busco dirección para reflejar

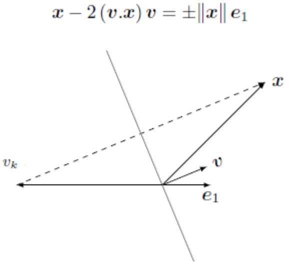
  $v_k = v_k / \|v_k\|_2$ # normalizo

  $A_{k:m,k:n} = A_{k:m,k:n} - 2v_k(v_k^t A_{k:m,k:n})$ # magia

end

Básicamente, se multiplica A a izquierda por ciertas matrices para conseguir una triangular superior,

$$Q_n \cdot \ldots \cdot Q_1 A = R$$



En el paso k, se usa

$$Q_k = \begin{pmatrix} Id_{k-1} & 0 \\ 0 & F_k \end{pmatrix}$$

$$F_k = Id_k - 2\frac{v_k \cdot v_k^t}{v_k^t \cdot v_k} \in \mathbb{R}^{m-k+1 \times -k+1}$$

- Como las Q_k son ortogonales, se multiplica por las transpuestas y se tiene
$$A = Q_1^t \cdot \ldots \cdot Q_n^t R = QR$$
- Sacamos los $\hat{Q}$, $\hat{R}$ porque esta es la descomposición posta para $m \times n$.
- El costo es $2n^3/3$, más caro que Gauss, pero mejor en muchos aspectos.
- La ventaja de QR es que existe siempre, aunque no haya LU. Incluso cuando A no es cuadrada.
- Al no permutar, la descomposición sirve para cualquier b si queremos resolver $Ax = b$.
- Al resolver $QRx = b$ resolvemos un solo sistema: $R = Q^t b$.
- Podemos terminar acá la clase de hoy.

Más comentarios:

- GR por Gram Schmidt: ortogonalización con matrices triangulares.
- GR por Householder: triangulación con matrices ortogonales.

Gram-Schmidt es útil en distintos contextos. Pero tenemos un algoritmo malo.

¿Se podrá mejorar?

Sean $\{a_1, \ldots, a_n\}$ vectores l.i. en $\mathbb{R}^m$ con $m \geq n$.

Queremos $\{q_1, \ldots, q_n\}$ todos ortonormales (ortogonales entre sí, $\|q_j\|_2 = 1$).

Solución (mala):

$v_1 = a_1$
$r_{11} = \langle v_1, v_1 \rangle^{1/2}$
$q_1 = v_1 / r_{11}$
for $j = 2 : n$
    $v_j = a_j$
    for $i = 1 : j-1$
        $r_{ij} = \langle q_i, a_j \rangle$
        $v_j = v_j - r_{ij} q_i$
    end
    $r_{jj} = \langle v_j, v_j \rangle^{1/2}$
    $q_j = v_j / r_{jj}$
end

Solución (mejor):

for $j = 1 : n$
    $v_j = a_j$
end
for $j = 1 : n$
    $r_{jj} = \langle v_j, v_j \rangle^{1/2}$
    $q_j = v_j / r_{jj}$
    for $i = j+1 : n$
        $r_{ji} = \langle q_j, v_i \rangle$
        $v_i = v_i - r_{ji} q_j$
    end
end

Solución (mucho mejor):

for $j = 1 : n$
    $v_j = a_j$
end
for $j = 1 : n$
    $r_{jj} = \langle v_j, v_j \rangle^{1/2}$
    $q_j = v_j / r_{jj}$
$\quad + \textit{truco}$
    for $i = j+1 : n$
        $r_{ji} = \langle q_j, v_i \rangle$
        $v_i = v_i - r_{ji} q_j$
    end
end

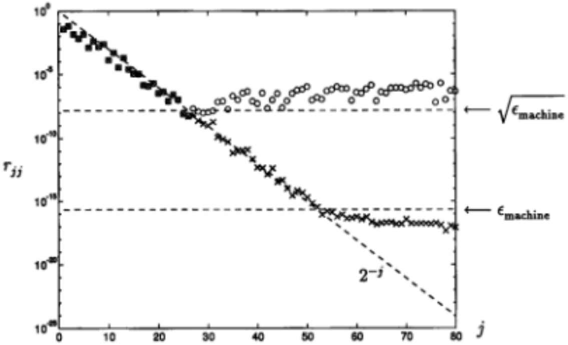


Figure 9.1. *Computed r_{jj} versus j for the QR factorization of a matrix with exponentially graded singular values. On this computer with about 16 digits of relative accuracy, the classical Gram–Schmidt algorithm produces the numbers represented by circles and the modified Gram–Schmidt algorithm produces the numbers represented by crosses.*

Trefethen-Bau, Numerical linear algebra

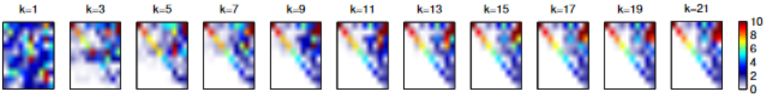
$$
\begin{aligned}
A_1 &= A = Q_1 R_1 \\
A_2 &= R_1 Q_1 = Q_2 R_2 \\
A_3 &= R_2 Q_2 = Q_3 R_3 \\
&\dots
\end{aligned}
$$

$$
A_k = Q_k R_k
$$

$$
\begin{aligned}
A_{k+1} &= R_k Q_k \\
&= Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k \\
&= Q_k^{-1} A_k Q_k
\end{aligned}
$$

Teorema

Las matrices A_k convergen a una triangular superior.



de Elias Jarlebring,
`https://www.math.kth.se/na/SF2524/matber15/qrmethod.pdf`