Ειδικά Θέματα Αριθμητικής Ανάλυσης και Εφαρμοσμένων Μαθηματικών

Αικατερίνη Αρετάκη

ΔΠΜΣ 'Πληροφορική και Υπολογιστική Βιοϊατρική'
Κατεύθυνση Υπολογιστικής Ιατρικής και Βιολογίας
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Λαμία, Μάρτιος 2019

Βασικοί Ορισμοί

- Ένας $n \times n$ πίνακας $A = [a_{ij}]$ ονομάζεται *κάτω τριγωνικός* αν $a_{ij} = 0$ για $j > i$, δηλαδή

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 0 \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} & 0 \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

- Ένας $n \times n$ πίνακας A ονομάζεται *άνω τριγωνικός* αν $a_{ij} = 0$ για $j < i$, δηλαδή ο ανάστροφος του A^T είναι κάτω τριγωνικός.
- Ένας $m \times n$ πίνακας A ονομάζεται *πλήρους βαθμού* (*full rank*) αν $rank A = \min\{m, n\}$.

Απλή QR Παραγοντοποίηση

Θεώρημα

Για κάθε πίνακα $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ πλήρους βαθμού υπάρχει $m \times n$ πίνακας Q με $Q^*Q = I_n$ και $n \times n$ άνω τριγωνικός πίνακας R ώστε

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}}_{A} = \underbrace{\begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{bmatrix}}_{Q} \underbrace{\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \ddots & r_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{nn} \end{bmatrix}}_{R}.$$

- $q_1, q_2, \ldots, q_n$ είναι ορθοκανονικά διανύσματα του $\mathbb{C}^m$, δηλαδή $\|q_i\| = 1$ και $q_i^* q_j = 0$ αν $i \neq j$
- αν τα διαγώνια στοιχεία $r_{ii} > 0$, τότε οι πίνακες Q και R είναι μοναδικοί
- αν $r_{ii} < 0$, τότε εναλλάσουμε τα πρόσημα των $r_{ii}, \ldots, r_{in}$ με αυτό του q_i
- R είναι αντιστρέψιμος πίνακας $(r_{ii} \neq 0)$.

Εφαρμογές της QR Παραγοντοποίησης

Η QR παραγοντοποίηση μπορεί να εφαρμοστεί στα ακόλουθα:

- Επίλυση γραμμικού συστήματος $Ax = b$:

$$Ax = b \;\Leftrightarrow\; Qy = b \text{ και } y = Rx,$$

  όπου το σύστημα $y = Rx$ επιλύεται με προς τα πίσω αντικατάσταση και το σύστημα $Qy = b$ επιλύεται άμεσα θεωρώντας $y = Q^*b$.
- Υπολογισμός ορίζουσας και αντιστρόφου του πίνακα $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$:

$$\text{αν } \det A = \det Q \cdot \det R = \prod_{j=1}^{n} r_{jj} \neq 0, \text{ τότε } A^{-1} = R^{-1}Q^*.$$

- Παραγοντοποίηση Cholesky θετικά ορισμένου πίνακα $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$:

$$A = LL^*,$$

  όπου L είναι κάτω τριγωνικός $n \times n$ πίνακας με θετικά διαγώνια στοιχεία, δηλαδή $L = R^*$.

Ορθοκανονικοποίηση Gram Schmidt

Έστω $\{v_1, \ldots, v_n\}$ βάση του χώρου $\mathbb{C}^m$. Η μέθοδος Gram-Schmidt κατασκευάζει μια ορθοκανονική βάση με γραμμικούς συνδυασμούς των προβολών της αρχικής βάσης. Η κατασκευή γίνεται σε 2 στάδια:

1. Ορθογώνια βάση $\{e_1, \ldots, e_n\}$ (διανύσματα ανά δύο κάθετα):

$$
\begin{aligned}
e_1 &= v_1 \\
e_2 &= v_2 - \frac{v_2 \cdot e_1}{e_1 \cdot e_1} e_1 \\
e_3 &= v_3 - \frac{v_3 \cdot e_1}{e_1 \cdot e_1} e_1 - \frac{v_3 \cdot e_2}{e_2 \cdot e_2} e_2 \\
\vdots &= \vdots \\
e_n &= v_n - \sum_{j=1}^{n-1} \frac{v_n \cdot e_j}{e_j \cdot e_j} e_j .
\end{aligned}
$$

2. Κανονικοποιημένη βάση $\{q_1, \ldots, q_n\}$ (μοναδιαία διανύσματα):

$$q_1 = \frac{e_1}{\|e_1\|}, \ldots, q_n = \frac{e_n}{\|e_n\|}.$$

Παράδειγμα

Έστω $v_1 = (1,1,1)$, $v_2 = (0,1,1)$, $v_3 = (0,0,1)$ μια βάση του $\mathbb{R}^3$. Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Gram-Schmidt θα κατασκευάσουμε μια ορθοκανονική βάση.

- Ορθογωνοποίηση βάσης

$$
\begin{aligned}
e_1 &= (1,1,1) \\
e_2 &= (0,1,1) - \frac{(0,1,1)\cdot(1,1,1)}{(1,1,1)\cdot(1,1,1)}(1,1,1) = (0,1,1) - \frac{2}{3}(1,1,1) \\
&= \left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right) \\
e_3 &= (0,0,1) - \frac{(0,0,1)\cdot(1,1,1)}{(1,1,1)\cdot(1,1,1)}(1,1,1) \\
&\quad - \frac{(0,0,1)\cdot\left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)}{\left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)\cdot\left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)}\left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right) \\
&= (0,0,1) - \frac{1}{3}(1,1,1) - \frac{1}{2}\left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right) = \left(0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right).
\end{aligned}
$$

- Κανονικοποίηση βάσης

$$q_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right), q_2 = \left(-\frac{\sqrt{6}}{3}, \frac{\sqrt{6}}{6}, \frac{\sqrt{6}}{6}\right), q_3 = \left(0, -\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right).$$

$$A = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & v_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 + \frac{2}{3}e_1 & e_3 + \frac{1}{2}e_2 + \frac{1}{3}e_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = ET$$

Αν $D = \begin{bmatrix} \|e_1\| & 0 & 0 \\ 0 & \|e_2\| & 0 \\ 0 & 0 & \|e_3\| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{6}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$, τότε $A = \underbrace{ED^{-1}}_{Q}\underbrace{DT}_{R}$, όπου

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & -2/3 & 0 \\ 1 & 1/3 & -1/2 \\ 1 & 1/3 & 1/2 \end{bmatrix} \text{ και } R = \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{6}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}.$$

Σημειώνουμε οτι $Q^*Q = I_3$ και R αντιστρέψιμος.

Άσκηση 1

Να βρεθεί η QR παραγοντοποίηση του πίνακα $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$.

Έστω v_1, v_2, v_3 οι στήλες του A, εφόσον $rank(A) = 3$. Τότε με τη μέθοδο Gram-Schmidt βρίσκουμε τα ορθογώνια διανύσματα

$$\begin{aligned} e_1 &= v_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T \\ e_2 &= v_2 - \frac{3}{4} e_1 = \begin{bmatrix} -\frac{3}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{bmatrix}^T \\ e_3 &= v_3 - \frac{1}{2} e_1 - \frac{2}{3} e_2 = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{bmatrix}^T. \end{aligned}$$

$$A = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{3}{4} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \underbrace{ED^{-1}}_{Q} \underbrace{DT}_{R} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & \frac{3}{2} & 1 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} \end{bmatrix},$$

όπου $D = diag(2, \frac{\sqrt{3}}{2}, \sqrt{\frac{2}{3}})$.

Άσκηση 2

Να βρεθεί η QR παραγοντοποίηση του πίνακα $A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$.

Έστω v_1, v_2, v_3 οι γραμμές του A, εφόσον $rank(A) = 3$. Τότε

$$\begin{aligned} e_1 &= v_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T \\ e_2 &= v_2 - \frac{1}{2}e_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 & 0 \end{bmatrix}^T \\ e_3 &= v_3 - \frac{1}{2}e_1 - e_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}^T. \end{aligned}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{bmatrix} = \underbrace{TD}_{R}\,\underbrace{D^{-1}E}_{Q} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

όπου $D = diag(\sqrt{2}, \sqrt{\frac{3}{2}}, 1)$.

Μετασχηματισμός Householder

- Ο πιο ευρέως χρησιμοποιούμενος αλγόριθμος για την QR παραγοντοποίηση (εντολή qr του MATLAB).
- Λιγότερο ευαίσθητος σε σφάλματα στρογγυλοποίησης συγκριτικά με τη μέθοδο Gram-Schmidt.
- Κατασκευάζει την πλήρη QR παραγοντοποίηση

$$A = \begin{bmatrix} Q & \tilde{Q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}, \text{ όπου } \begin{bmatrix} Q & \tilde{Q} \end{bmatrix} \text{ ορθομοναδιαίος πίνακας}$$

- Ο ορθομοναδιαίος πίνακας κατασκευάζεται από το γινόμενο

$$\begin{bmatrix} Q & \tilde{Q} \end{bmatrix} = H_1 H_2 \cdots H_n,$$

όπου $H_i \in \mathbb{C}^{m \times m}$ καλείται πίνακας (αντανάκλασης) Householder.

Πίνακας Ανταvάκλασης Householder

$$H = I - 2uu^T \ \text{με} \ u \in \mathbb{C}^n, \ \|u\| = 1$$

- H ερμιτιανός πίνακας
- H ορθομοναδιαίος πίνακας
- Αν $0 \neq x \in \mathbb{C}^n$, τότε Hx είναι μια ανταvάκλαση του x ως προς το υπερεπίπεδο $span\{u\}^\perp = \{z : u^T z = 0\}$
- το διάνυσμα Hx υπολογίζεται από την ποσότητα

$$Hx = x - 2(u^T x)u$$

Διάνυσμα αντανάκλασης πολλαπλάσιο του μοναδιαίου

Έστω δεδομένο διάνυσμα $y = (y_1, y_2, \ldots, y_n) \neq 0$, τότε ορίζουμε το διάνυσμα Householder

$$u = \frac{w}{\|w\|}, \text{ όπου } w = y + sign(y_1)\,\|y\|\,e_1 = \begin{bmatrix} y_1 + sign(y_1)\|y\| \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix},$$

όπου $e_1 = (1, 0, \ldots, 0)$ είναι το διάνυσμα της κανονικής βάσης.

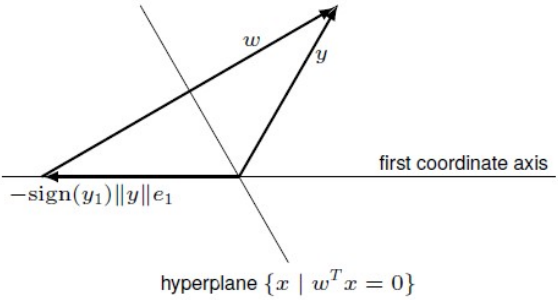
- Ορίζουμε $sign(0) = 1$.
- Το διάνυσμα w ικανοποιεί τη σχέση

$$\|w\|^2 = 2(w^T y) = 2\,\|y\|\,(\|y\| + |y_1|).$$

- Ο αντίστοιχος πίνακας Householder $H = I - 2uu^T$ απεικονίζει το y στο $span\{e_1\}$, δηλαδή

$$Hy = y - 2\frac{(w^T y)}{\|w\|^2} w = y - w = -sign(y_1)\,\|y\|\,e_1.$$

Γεωμετρική αναπαράσταση



Αντανάκλαση ως προς το υπερεπίπεδο $\left\{x : w^T x = 0\right\}$ με κάθετο διάνυσμα

$$w = y + sign(y_1)\,\|y\|\,e_1,$$

το οποίο απεικονίζει το y στο διάνυσμα $sign(y_1)\,\|y\|\,e_1$.

Παράδειγμα

Αν $y = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix}$ με $\|y\| = 6$, τότε για το διάνυσμα Householder

$w = y + \|y\| \, e_1 = \begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix}$, ο αντίστοιχος πίνακας Householder είναι

$$H = I - 2uu^T = \frac{1}{54} \begin{bmatrix} -27 & -9 & -45 & -9 \\ -9 & 53 & -5 & -1 \\ -45 & -5 & 29 & -5 \\ -9 & -1 & -5 & 53 \end{bmatrix},$$

ο οποίος ικανοποιεί τη σχέση $Hy = \begin{bmatrix} -6 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \in span\,\{e_1\}$.

Πλήρης QR παραγοντοποίηση

Έστω $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ με $rank(A) = n$.

1. Θεωρούμε την πρώτη στήλη $a_1 \in \mathbb{C}^m$ του A και υπολογίζουμε το διάνυσμα Householder

$$u_1 = \frac{w}{\|w\|}, \quad w = a_1 \pm \|a_1\| e_1$$

και τον πίνακα Householder

$$H_1 = I_m - 2u_1u_1^T,$$

2. Υπολογίζουμε το γινόμενο των πινάκων

$$H_1A = \begin{bmatrix} -\|a_1\| & \star \\ 0 & A_1 \end{bmatrix}, \; A_1 \in \mathbb{C}^{(m-1)\times(n-1)}$$

3. Θεωρούμε την πρώτη στήλη $\tilde{a}_1 \in \mathbb{C}^{m-1}$ του A_1 και υπολογίζουμε το διάνυσμα Householder

$$u_2 = \frac{w}{\|w\|}, \quad w = \tilde{a}_1 \pm \|\tilde{a}_1\| \, \tilde{e}_1$$

και τον πίνακα Householder

$$H_2 = I_{m-1} - 2u_2 u_2^T,$$

4. Υπολογίζουμε το γινόμενο των πινάκων

$$H_2 A_1 = \begin{bmatrix} -\|\tilde{a}_1\| & \star \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}, \; A_2 \in \mathbb{C}^{(m-2)\times(n-2)}$$

5. Αν $Q_1 = H_1$ και $Q_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix}$, τότε

$$Q_2 Q_1 A = \begin{bmatrix} -\|a_1\| & \star & \star \\ 0 & -\|\tilde{a}_1\| & \star \\ 0 & 0 & A_2 \end{bmatrix}$$

6. Συνεχίζουμε τη διαδικασία με τον πίνακα $A_2 \in \mathbb{C}^{(m-2)\times(n-2)}$ και έχουμε

$$H_3 A_2 = \begin{bmatrix} -\|\tilde{a}_1\| & \star \\ 0 & A_3 \end{bmatrix}, \quad A_3 \in \mathbb{C}^{(m-3)\times(n-3)}$$

και

$$Q_3 Q_2 Q_1 A = \begin{bmatrix} -\|a_1\| & \star & \star & \star \\ 0 & -\|\tilde{a}_1\| & \star & \star \\ 0 & 0 & \ddots & \star \\ 0 & 0 & 0 & A_3 \end{bmatrix}, \quad \text{με } Q_3 = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & H_3 \end{bmatrix}$$

7. Τελικά θα έχουμε

$$Q_{m-1} \cdots Q_2 Q_1 A = \begin{bmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{bmatrix},$$

όπου ο πίνακας $Q_{m-1} \cdots Q_2 Q_1$ είναι ερμιτιανός ως γινόμενο ερμιτιανών πινάκων.

8. Συνεπώς, έχουμε

$$A = \underbrace{Q_1 Q_2 \cdots Q_{m-1}}_{Q \in \mathbb{C}^{m \times m}} \underbrace{\begin{bmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{bmatrix}}_{R \in \mathbb{C}^{m \times n}}$$

Άσκηση 3

Να βρεθεί η πλήρης QR του πίνακα $A = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & 5 \\ 1 & 3 & 7 \end{bmatrix}$.

Θα κατασκευάσουμε πίνακες Householder H_1, H_2, H_3 ώστε

$$A = H_1 H_2 H_3 \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{23} \\ 0 & 0 & r_{33} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

1. Θεωρώντας την πρώτη στήλη του A, υπολογίζουμε:

$$a_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \; w = a_1 - \|a_1\| e_1 = \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \; u_1 = \frac{w}{\|w\|} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

2. Για $H_1 = I_4 - 2u_1u_1^T$ έχουμε

$$H_1A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 4/3 & 8/3 \\ 0 & 2/3 & 16/3 \\ 0 & 4/3 & 20/3 \end{bmatrix}$$

3. Ομοίως, υπολογίζουμε:

$$a_1 = \begin{bmatrix} 4/3 \\ 2/3 \\ 4/3 \end{bmatrix}, \quad w = a_1 - \|a_1\|\, e_1 = \begin{bmatrix} 10/3 \\ 2/3 \\ 4/3 \end{bmatrix}, \quad u_2 = \frac{w}{\|w\|} = \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{bmatrix} 5 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

4. Για $H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & I_3 - 2u_2u_2^T \end{bmatrix}$ έχουμε

$$H_2H_1A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & -8 \\ 0 & 0 & 16/5 \\ 0 & 0 & 12/5 \end{bmatrix}$$

5. Ομοίως

$$a_1 = \begin{bmatrix} 16/5 \\ 12/5 \end{bmatrix}, \; w = a_1 - \|a_1\| \, e_1 = \begin{bmatrix} 36/5 \\ 12/5 \end{bmatrix}, \; u_2 = \frac{w}{\|w\|} = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

6. Για $H_3 = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 - 2u_3u_3^T \end{bmatrix}$ έχουμε

$$H_3H_2H_1A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & -8 \\ 0 & 0 & -4 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Τελικά,

$$A = H_1H_2H_3 \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Άσκηση 4

Να κατασκευαστεί η απλή QR παραγοντοποίηση του πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{5\times 3}.$$

1. Ο βαθμός του πίνακα είναι $rank(A) = 3$ (full rank).
2. Έστω $A = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix}$. Εφαρμόζουμε τη μέθοδο Gram-Schmidt για να κατασκευάσουμε ορθογώνια διανύσματα

$$\begin{aligned} u_1 &= a_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 1 & 2 \end{bmatrix}^T \\ u_2 &= a_2 - \frac{0}{11}u_1 = \begin{bmatrix} -1 & 2 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T \\ u_3 &= a_3 - \frac{3}{11}u_1 - \frac{0}{7}u_2 = \begin{bmatrix} \frac{8}{11} & \frac{8}{11} & \frac{16}{11} & \frac{8}{11} & -\frac{28}{11} \end{bmatrix}^T. \end{aligned}$$

3. Λύνουμε τις σχέσεις του βήματος 2 ως προς τις στήλες του πίνακα A

$$\begin{aligned} a_1 &= u_1 \\ a_2 &= 0u_1 + u_2 \\ a_3 &= \frac{3}{11}u_1 + 0u_2 + u_3. \end{aligned}$$

Συνεπώς,

$$A = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{3}{11} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \underbrace{ED^{-1}}_{Q}\underbrace{DT}_{R} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{11}} & \frac{-1}{\sqrt{7}} & \frac{2}{\sqrt{77}} \\ \frac{1}{\sqrt{11}} & \frac{2}{\sqrt{7}} & \frac{2}{\sqrt{77}} \\ \frac{2}{\sqrt{11}} & \frac{-1}{\sqrt{7}} & \frac{4}{\sqrt{77}} \\ \frac{1}{\sqrt{11}} & \frac{1}{\sqrt{7}} & \frac{2}{\sqrt{77}} \\ \frac{2}{\sqrt{11}} & 0 & \frac{7}{\sqrt{77}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{11} & 0 & \frac{3\sqrt{11}}{11} \\ 0 & \sqrt{7} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{12\sqrt{77}}{121} \end{bmatrix},$$

όπου $D = diag(\|u_1\|, \|u_2\|, \|u_3\|) = diag(\sqrt{11}, \sqrt{7}, \frac{4\sqrt{77}}{11})$.

QR Παραγοντοποίηση στο MatLab

Η εντολή

$$[Q, R] = qr(A, 0); \quad \% \text{ compute economy QR factorization}$$

κατασκευάζει την απλή QR παραγοντοποίηση του full rank πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ με ορθογώνιο πίνακα $Q \in \mathbb{R}^{m\times n}$ και άνω τριγωνικό πίνακα $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

Ειδικότερα, στην άσκηση μας έχουμε:

$$Q = \begin{bmatrix} -0.3015 & 0.3780 & -0.2279 \\ -0.3015 & -0.7559 & -0.2279 \\ -0.6030 & 0.3780 & -0.4558 \\ -0.3015 & -0.3780 & -0.2279 \\ -0.6030 & 0 & 0.7977 \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} -3.3166 & -0.0000 & -0.9045 \\ 0 & -2.6458 & 0 \\ 0 & 0 & -3.1909 \end{bmatrix}.$$

Άσκηση 5

Να κατασκευαστεί η πλήρης QR παραγοντοποίηση του πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{5\times 3}.$$

1. Ο βαθμός του πίνακα είναι $rank(A) = 3$ (full rank).
2. Έστω $a_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 1 & 2 \end{bmatrix}^T$. Υπολογίζουμε το διάνυσμα Householder

   $$u_1 = \frac{w}{\|w\|} = \begin{bmatrix} 0.8067 & 0.1869 & 0.3738 & 0.1869 & 0.3738 \end{bmatrix}^T, \text{ όπου } w = a_1 + \|a_1\| e_1$$

   και τον πίνακα Householder

   $$H_1 = I_5 - 2u_1u_1^T = \begin{bmatrix} -0.3015 & -0.3015 & -0.6030 & -0.3015 & -0.6030 \\ -0.3015 & 0.9302 & -0.1397 & -0.0698 & -0.1397 \\ -0.6030 & -0.1397 & 0.7206 & -0.1397 & -0.2794 \\ -0.3015 & -0.0698 & -0.1397 & 0.9302 & -0.1397 \\ -0.6030 & -0.1397 & -0.2794 & -0.1397 & 0.7206 \end{bmatrix}.$$

3. Υπολογίζουμε το γινόμενο των πινάκων

$$H_1 A = \begin{bmatrix} -3.3166 & 0 & -0.9045 \\ 0 & 2.2317 & 0.5588 \\ 0 & -0.5367 & 1.1176 \\ 0 & 1.2317 & 0.5588 \\ 0 & 0.4633 & -2.8824 \end{bmatrix},$$

και θετουμε $A_1 = \begin{bmatrix} 2.2317 & 0.5588 \\ -0.5367 & 1.1176 \\ 1.2317 & 0.5588 \\ 0.4633 & -2.8824 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{4\times 2}.$

4. Θεωρούμε την πρώτη στήλη $\tilde{a}_1 = \begin{bmatrix} 2.2317 & -0.5367 & 1.2317 & 0.4633 \end{bmatrix}^T$ του A_1. Υπολογίζουμε το διάνυσμα Householder

$$u_2 = \frac{w}{\|w\|} = \begin{bmatrix} 0.9601 & -0.1056 & 0.2424 & 0.0912 \end{bmatrix}^T, \quad w = \tilde{a}_1 + \|\tilde{a}_1\| \, \tilde{e}_1$$

και τον πίνακα Householder

$$H_2 = I_4 - 2u_2u_2^T = \begin{bmatrix} -0.8435 & 0.2028 & -0.4655 & -0.1751 \\ 0.2028 & 0.9777 & 0.0512 & 0.0193 \\ -0.4655 & 0.0512 & 0.8824 & -0.0442 \\ -0.1751 & 0.0193 & -0.0442 & 0.9834 \end{bmatrix},$$

5. Υπολογίζουμε το γινόμενο των πινάκων

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix} H_1 A = \begin{bmatrix} -3.3165 & 0 & -0.9045 \\ 0 & -2.6459 & -0.0002 \\ 0 & 0 & 1.1791 \\ 0 & 0 & 0.4177 \\ 0 & 0 & -2.9355 \end{bmatrix}.$$

6. Με διάνυσμα $\tilde{a}_2 = \begin{bmatrix} 1.1791 & -0.4177 & -2.9355 \end{bmatrix}^T$ θα υπολογίσουμε το διάνυσμα Householder

$$u_3 = \frac{w}{\|w\|} = \begin{bmatrix} 0.8275 & 0.0791 & -0.5559 \end{bmatrix}^T, \quad w = \tilde{a}_2 + \|\tilde{a}_2\| \tilde{e}_1$$

και τον πίνακα Householder

$$H_3 = I_3 - 2u_3u_3^T = \begin{bmatrix} -0.3695 & -0.1309 & 0.9200 \\ -0.1309 & 0.9875 & 0.0879 \\ 0.9200 & 0.0879 & 0.3820 \end{bmatrix},$$

7. Υπολογίζουμε το γινόμενο των πινάκων

$$\begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & H_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix} H_1 A = \begin{bmatrix} -3.3166 & 0 & -0.9045 \\ 0 & -2.6458 & 0 \\ 0 & 0 & -3.1909 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

8. Τελικά, θα έχουμε

$$A = \underbrace{H_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & H_3 \end{bmatrix}}_{Q \in \mathbb{R}^{5\times 5}} \underbrace{\begin{bmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{bmatrix}}_{R \in \mathbb{R}^{5\times 3}} .$$

Πλήρης QR Παραγοντοποίηση στο MatLab

Η εντολή

$$[Q, R] = qr(A); \quad \% \text{ compute full QR factorization}$$

κατασκευάζει την πλήρη QR παραγοντοποίηση του full rank πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ με ορθογώνιο πίνακα $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ και άνω τριγωνικό πίνακα $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$.

Ειδικότερα, στην άσκηση μας έχουμε:

$$Q = \begin{bmatrix} -0.3015 & 0.3780 & -0.2279 & -0.0869 & -0.8407 \\ -0.3015 & -0.7559 & -0.2279 & -0.5218 & -0.1160 \\ -0.6030 & 0.3780 & -0.4558 & -0.1160 & 0.5218 \\ -0.3015 & -0.3780 & -0.2279 & 0.8407 & -0.0869 \\ -0.6030 & 0 & 0.7977 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} -3.3166 & 0 & -0.9045 \\ 0 & -2.6458 & 0 \\ 0 & 0 & -3.1909 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

LU Παραγοντοποίηση

Πρόταση

Αν σε έναν πίνακα A η διαδικασία απαλοιφής του Gauss βρίσκει ένα πλήρες σύνολο οδηγών στοιχείων χωρίς να γίνουν εναλλαγές γραμμών, τότε ο πίνακας A μπορεί να γραφεί στη μορφή $A = LU$, όπου

- *L είναι κάτω τριγωνικός, με 1 στη διαγώνιο και τους πολλαπλασιαστές Gauss κάτω από τη διαγώνιο,*
- *U είναι άνω τριγωνικός με τους οδηγούς στη διαγώνιο, ο οποίος προκύπτει από την απαλοιφή.*

Πίνακας εναλλαγής

- *Πίνακας εναλλαγής* P_{ij}: Έχει 1 στις θέσεις ij, ji και στη διαγώνιο εκτός από τις θέσεις ii και jj, ενώ έχει 0 στις υπόλοιπες θέσεις.
- $P_{ij}A$ εναλλάσει την i και τη j γραμμή του πίνακα A
- AP_{ij} εναλλάσει την i και τη j στήλη του πίνακα A
- Το γίνόμενο πινάκων εναλλαγής ονομάζεται *πίνακας μετάθεσης*.

Πρόταση

Αν η διαδικασία απαλοιφής του Gauss βρίσκει ένα πλήρες σύνολο οδηγών στοιχείων με εναλλαγές γραμμών, τότε υπάρχει πίνακας μετάθεσης P *ώστε* $PA = LU$, *για έναν πίνακα* A.

Παράδειγμα - Άσκηση

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1.0 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1.0 & 0 \\ 1.0 & 0.4 & 1 \\ 0.5 & 0.6 & 0 \\ 0.5 & -0.2 & 0 \end{bmatrix}}_{L} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 0 & 2.5 & 0 \\ 0 & 0 & -4 \end{bmatrix}}_{U}$$

με πίνακα μετάθεσης $P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$.