

Μετασχηματισμοί Householder

Ορισμός: Ένας πίνακας $n \times n$ της μορφής

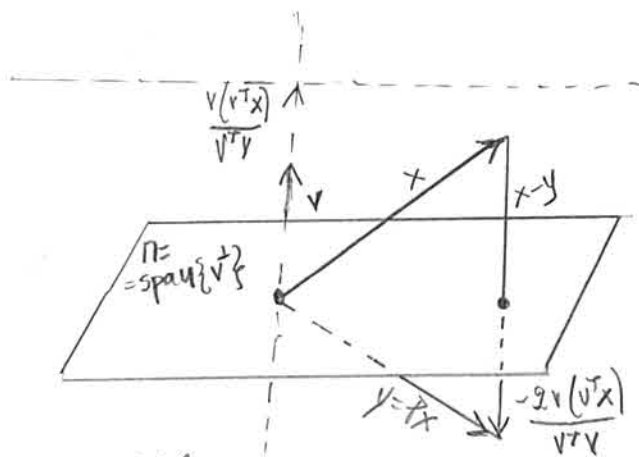
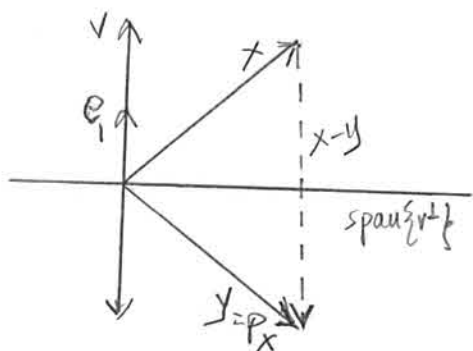
$$P = I - \frac{2vv^T}{v^T v}, \quad v \neq 0, v \in \mathbb{R}^n$$

λέγεται πίνακας Householder ή μετασχηματισμός Householder.

Αν θέσουμε $v^T \cdot v = \|v\|_2^2$ και $w = \frac{v}{\|v\|_2}$, τότε ο πίνακας P μπορεί να πάρει τη μορφή

$$P = I - 2 \frac{vw^T}{\|w\|_2} = I - 2ww^T, \quad w \in \mathbb{R}^n, \|w\|_2 = 1.$$

Όταν ένα διάνυσμα x πολλαπλασιάζεται με τον μετασχηματισμό P προβάλλεται στο χώρο $\text{span}\{v\}^\perp$ (orthogonal complement του υποχώρου $S \subset \mathbb{R}^n : S^\perp = \{y \in \mathbb{R}^n \mid y^T x = 0, \text{ για κάθε } x \in S\}$ που παράγεται από το $v^\perp$



Αν $x, y \in \mathbb{R}^n$ με $\|x\|_2 = \|y\|_2$ και επιλέξουμε ένα μοναδιαίο διάνυσμα $v \parallel (x-y)$ τότε ο $P = I - 2vv^T$ προβάλλει το x στο y , δηλ. η επίδραση του μετασχηματισμού Householder στο διάνυσμα x είναι η

$$y = Px = I - 2vv^T$$

Γενικά, ο μετασχηματισμός Householder ($P' = I - 2ww^T$, $\|w\|_2^2 = 1$) είναι μία γεωμετρική ανάκλαση γύρω από ένα επίπεδο ή υπερεπίπεδο που περιέχει την αρχή.

Οι Householder πίνακες είναι συμμετρικοί και ορθογώνιοι και έχουν πρακτικό ενδιαφέρον γιατί έχουν την δυνατότητα να ειδικούν μηδενικά β' έναν πίνακα ή διάνυσμα. Ισχύει: $v^T x = v^T x v$

Λήμμα: Έστω δοσμένο διάνυσμα $x \in \mathbb{R}^n$ μη μηδενικό, $x \neq e_1 = [1 \ 0 \dots 0]^T$. Παντοτε υπάρχει ένας πίνακας Householder P έτσι ώστε Px να είναι πολλαπλάσιο του e_1 , δηλ. $Px = ke_1 = [k \ 0 \dots 0]^T$

Απόδειξη:

Από τον ορισμό του πίνακα Householder έχουμε ότι:

$$Px = \left[I - \frac{2vv^T}{v^T v} \right] x \stackrel{(*)}{=} x - \frac{2v^T x}{v^T v} \cdot v \quad (1)$$

(*) γιατί ισχύει ότι: $vv^T x = v^T x v \rightarrow$ ιδιότητα γινομένου

Παρατηρούμε ότι για να αυξηθεί το Px στον χώρο που παράγεται από το e_1 , δηλ. να ισχύει $Px \in \text{span}\{e_1\}$, θα πρέπει $v \in \text{span}\{x, e_1\}$.

Αν θέσουμε $v = x + ae_1$ (2)

$$\text{Παίρνουμε } v^T x \stackrel{(2)}{=} (x + ae_1)^T x = (x^T + ae_1^T) x = x^T x + ax_1 \quad (3)$$

όπου $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ και $e_1^T = [1, 0, \dots, 0]$

και

$$v^T x = x^T x + 2ax_1 + a^2. \quad (4)$$

Κατά συνέπεια από την (1) λόγω των (2)-(4) έχουμε

$$p_{x^{(2)}} = x - 2 \frac{v^T x}{v^T v} (x + ae_1)$$

$$\stackrel{(3)(4)}{=} \underbrace{\left[1 - 2 \frac{x^T x + ax_1}{x^T x + 2ax_1 + a^2} \right]}_A x - \underbrace{2a \frac{v^T x}{v^T v}}_k e_1$$

Για να είναι ο συντελεστής A του x ίσος με το μηδέν θα πρέπει

$$x^T x + 2ax_1 + a^2 - 2(x^T x + ax_1) = 0$$

$$\Leftrightarrow \cancel{x^T x} + \cancel{2ax_1} + a^2 - 2\cancel{x^T x} - 2\cancel{ax_1} = 0 \Leftrightarrow -x^T x + a^2 = 0 \Leftrightarrow \boxed{a = \pm \|x\|_2} \quad (5)$$

Έτσι λοιπόν, αν

$$y = x \pm \|x\|_2 e_1 \quad (6)$$

προκύπτει ότι

$$p_x = \pm \|x\|_2 e_1. \quad (7)$$

(για να έχω $p_x = ke_1$)

Επιλογή προβήμου:

1. Έστω $x = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n)^T$. Αν το x είναι ^(πολύ κοντά σε) παράλληλο του e_1 (π.χ. $x = (5 \ 0.0001 \ 0.0003 \ \dots)^T$) τότε το $v = x - \text{sign}(x_1) \|x\|_2 e_1$

έχει μικρή νόρμα. Συνεπώς, μπορεί να έχει μεγάλο σχετικό βήγμα δυν παραγοντα $\beta = \frac{2}{v^T v}$.

Η δυσκολία αυτή μπορεί να αποφευχθεί επιλέγοντας $\text{sign}(a) = \text{sign}(x_1)$ οπότε

$$v = x + \text{sign}(x_1) \|x\|_2 e_1. \quad (8)$$

Με αυτόν τον τρόπο, αποφεύγεται το ευδεχόμενο εμφάνισης κατατροφικής διαγραφής αν το a έχει διαφορετικό πρόσημο από το x_1 .

Αυτός ο απλός ορισμός του v καθιστά τον πίνακα Householden ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο. Παρατηρούμε επίσης, ότι αφού

$v = x + \text{sign}(x_1) \|x\|_2 e_1 = (x_1 + \text{sign}(x_1) \|x\|_2, x_2, \dots, x_n)^T$, το διάνυσμα v μπορεί να αποθηκεύεται πάνω στο x . Επίσης, ισχύει ότι

$$p_x = (-\text{sign}(x_1) \|x\|_2, 0, 0, \dots, 0)^T \quad (9)$$

Παράδειγμα: (Μετασχηματισμός Householder)

Έστω $x = [3, 1, 5, 1]^T$. Τότε $\|x\|_2 = \sqrt{3^2 + 1^2 + 5^2 + 1^2} = \sqrt{36} = 6$

Αν v και (6) έχουμε $v = x \oplus \frac{\text{sign}(x_1)}{\|x\|_2} e_1 = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix} \oplus 6 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (9')$

Τότε $(7) \Rightarrow P_x = \pm \|x\|_2 e_1 = \pm \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

Εναι $P = I - 2 \frac{vv^T}{v^T v} \quad (10)$ όπου

$$v \cdot v^T = \begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9 & 1 & 5 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 81 & 9 & 45 & 9 \\ 9 & 1 & 5 & 1 \\ 45 & 5 & 25 & 5 \\ 9 & 1 & 5 & 1 \end{bmatrix}$$

$$v^T v = \begin{bmatrix} 9 & 1 & 5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix} = 81 + 1 + 25 + 1 = 108$$

Απλ $(10) \Rightarrow P = I - 2 \cdot \frac{1}{108} \begin{bmatrix} 81 & 9 & 45 & 9 \\ 9 & 1 & 5 & 1 \\ 45 & 5 & 25 & 5 \\ 9 & 1 & 5 & 1 \end{bmatrix}$

$$= \frac{1}{54} \begin{bmatrix} 54 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 54 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 54 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 54 \end{bmatrix} - \frac{1}{54} \begin{bmatrix} 81 & 9 & 45 & 9 \\ 9 & 1 & 5 & 1 \\ 45 & 5 & 25 & 5 \\ 9 & 1 & 5 & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{54} \begin{bmatrix} -27 & -9 & -45 & -9 \\ -9 & 53 & -5 & -1 \\ -45 & -5 & 29 & -5 \\ -9 & -1 & -5 & 53 \end{bmatrix}$$

Οπότε έχουμε την επίδραση του μετασχηματισμού Householder στο διάνυσμα x , δηλ

$$P_x = \frac{1}{54} \begin{bmatrix} -27 & -9 & -45 & -9 \\ -9 & 53 & -5 & -1 \\ -45 & -5 & 29 & -5 \\ -9 & -1 & -5 & 53 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -6 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = -6 \cdot e_1 =$$

$$\stackrel{(9)}{=} -\text{sign}\{x_1\} \|x\|_2 \cdot e_1 \quad (11)$$

Προσοχή: Ενώ στην (9') έχουμε $\text{sign}\{x_1\} = +$, στην (11) έχουμε $-\text{sign}\{x_1\}$.

2. Για να εξαλειφθεί οποιαδήποτε πιθανότητα υπερχείλισης ή υποχείλισης, κατά του υπολογισμού της $\|x\|_2$ χρησιμοποιούμε παράλληλη αλλαγή κλίμακας στο διάνυσμα x . Συγκεκριμένα για του ορίσμού του v χρησιμοποιούμε το διάνυσμα $\frac{x}{\max\{x_i\}}$ αντί του x .

Έστω $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$. Ο παρακάτω αλγόριθμος υπολογίζει ένα διάνυσμα v και ένα βαθμωτό σ έτσι ώστε $Px = (I - 2 \frac{vv^T}{v^T v})x = (\sigma, 0, 0, \dots, 0)^T$ ($Px = -\text{sign}\{x_1\} \|x\|_2 e_1$). Το v αποθηκεύεται πάνω στο x . Χρειάζεται να επισημάνουμε ότι δεν απαιτείται η κατασκευή του πίνακα P .

$$(v = x + \text{sign}(x_1) \|x\|_2 e_1)$$

Αλγόριθμος 1: (Διφύλαξη μηδενικών ε' ένα διάνυσμα με το μετασχηματισμό Householder)

$$B1: m = \max\{|x_i| \mid i=1, 2, \dots, n\}$$

$$B2: x_i \equiv v_i = \frac{x_i}{m}, i=1, 2, \dots, n \text{ (κανονίκε κανονικοποίηση στο διάνυσμα)}$$

$$B3: \sigma = \operatorname{sign}(v_1) \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_n^2}$$

$$B4: x_i \equiv v_i = v_i + \sigma$$

$$B5: \sigma = -m \cdot \sigma$$

Πλοηγητικότητα: Ο αλγόριθμος αυτός για την εκτέλεσή του απαιτεί $2(n+1)$ flops και μία τετραγωνική ρίζα για την εισαγωγή μηδενικών στις θέσεις 2 έως n ενός διανύσματος. Πραγματι, στο B2. έχουμε n διαιρέσεις, στο B3. έχουμε n πολλαπλασιασμούς και 1 ρίζα και στα B4, B5 έχουμε από 1 πράξη.

Ευστάθεια: Αποδεικνύεται ότι ο πίνακας Householder P που κατασκευάζεται από ένα διάνυσμα v με τον αλγόριθμο 1 ικανοποιεί τη σχέση

$$\|P - \hat{P}\| \leq 10u \quad (\text{δηλ. } 10 \text{ μονάδες σφάλματος στρογγύλευσης})$$

Αν χρησιμοποιήσουμε διπλή ακρίβεια για το εσωτερικό γινόμενο τότε $\ell(\hat{P}x) = P(x+\epsilon)$ όπου $|\epsilon| \leq cu \|x\|_2$, όπου $c = O(1)$ σταθερά.

Παρατηρούμε ότι το φράγμα που προκύπτει είναι ανεξάρτητο του n και επομένως ο αλγόριθμος είναι ευεσταθής.

-8-

Παράδειγμα: Έστω $x = [0, 4, 1]^T$. Να προσδιοριστεί το v έτσι ώστε

$$Px = [0, 0, 0]^T, \text{ όπου } P = I - 2 \frac{vv^T}{v^T v}$$

Λύση: Εφαρμόζοντας τον Αλγόριθμο 1 έχουμε

$$B1: m = \max\{|0|, |4|, |1|\} = 4$$

$$B2: i=1 \rightarrow x_1=0, v_1=0 \text{ (αυ είναι 0 επιλέγουμε + ή -)}$$

$$i=2 \rightarrow x_2=1, v_2=1$$

$$i=3 \rightarrow x_3=0.25, v_3=0.25$$

$$B3: \sigma = \sqrt{0^2 + 1^2 + 0.25^2} \approx 1.0308$$

$$B4: x_1 = v_1 = v_1 + \sigma = 0 + 1.0308 = 1.0308 \text{ δηλ. } v = (1.0308, 1, 0.25)^T$$

$$B5: \sigma = -u\sigma = -4 \cdot 1.0308 = -4.1232$$

$$\text{Άρα επαληθεύεται ότι: } Px = (-4.1232, 0, 0)^T.$$

Η διαδικασία μηδενισμού των εισόδων διανυσμάτων με μετασχηματισμούς Householder, μπορεί να οδηγήσει στην άνω τριγωνοποιημένη πίνακα.

Αλγόριθμος 2: (Γινόμενο πίνακα με διάνυσμα μ' ένα πίνακα Householder P_x)

$$B1: \beta = \frac{2}{v^T v}$$

$$B2: s = \sum_{i=1}^n v_i x_i = v^T x \rightarrow n \text{ πολ/γοί } O(n)$$

$$B3: \beta = \beta \cdot s$$

$$B4: \text{Για } i=1(1)n \\ x_i = x_i - \beta v_i \rightarrow n \text{ πολ/γοί } \begin{cases} O(n) \\ n \text{ αφαιρέσεις} \end{cases}$$

Άρα, η πολυπλοκότητα είναι $O(n)$ (έναντι $O(n^2)$ για το συνηθισμένο πολλαπλασιασμό πίνακα με διάνυσμα).

Παραγοντοποίηση QR (για εύρεση ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων)

Θεώρημα: Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Τότε υπάρχει ορθογώνιος πίνακας $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ και άνω τριγωνικός πίνακας $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ έτσι ώστε:

$$A = QR.$$

Ο πίνακας Q μπορεί να γραφτεί ως $Q = P_1 P_2 \dots P_{n-1}$, όπου κάθε πίνακας $P_i, i=1, 2, \dots, n-1$ είναι πίνακας Householder. Η παραγοντοποίηση αυτή του A ονομάζεται παραγοντοποίηση QR του A .

Σημείωση: Οι στήλες του πίνακα Q είναι τα ιδιοδιανύσματα του A και τα διαγώνια στοιχεία του R είναι οι ιδιοτιμές του A .

Απόδειξη: Το Θεώρημα θα αποδειχθεί μαθηματικά.

Βήμα 1: Κατασκευάζουμε ένα πίνακα Householder P_1 της μορφής

$$I - 2 \frac{v_n v_n^T}{v_n^T v_n}$$
 έτσι ώστε να εστιάσει μηδενικά στην 1η στήλη κάτω από το $(1,1)$, δηλ.

$$P_1 A = \begin{bmatrix} * & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Είναι λοιπόν $P_1 = I - 2 \frac{v_n v_n^T}{v_n^T v_n}$, όπου v_n το αρχικό διάνυσμα που έχει "n" συνιστώσες

$$\text{όπου } P_1 = \begin{bmatrix} \alpha_{11} \\ \alpha_{21} \\ \vdots \\ \alpha_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Στη θέση του A τοποθετείται ο πίνακας $P_1 A$ κι έτσι έχουμε

$$A \equiv A^{(1)} = P_1 A = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix}$$

Βήμα 2: Κατασκευάζουμε ένα πίνακα Householder P_2 έτσι ώστε

$$A^{(2)} = P_2 A^{(1)} = \begin{bmatrix} * & * & * & \dots & * \\ 0 & * & * & \dots & * \\ 0 & 0 & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & * & \dots & * \end{bmatrix}$$

Ο P_2 μπορεί να κατασκευασθεί ως εξής:

Πρώτα κατασκευάζουμε έναν πίνακα Householder

$$\hat{P}_2 = I_{n-1} - 2 \frac{V_{n-1} V_{n-1}^T}{V_{n-1}^T V_{n-1}} \text{ τάξης } n-1, \text{ έτσι ώστε}$$

$$\hat{P}_2 \begin{bmatrix} a_{22} \\ a_{32} \\ \vdots \\ a_{n2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \text{ και έπειτα ορίζουμε τον } P_2 = \left[\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \hat{P}_2 & \\ 0 & & & \end{array} \right]$$

και πολλαπλασιάζουμε από αριστερά με τον $A^{(1)}$ έτσι ώστε

$$A^{(2)} = P_2 A^{(1)} = \left(\begin{array}{c|ccc} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & A_1^{(1)} & \\ 0 & & & \end{array} \right)$$

Βήμα k: Κατασκευάζουμε πίνακα Householder $\hat{P}_k = I_{n-k+1} - \frac{2 V_{n-k+1} V_{n-k+1}^T}{V_{n-k+1}^T V_{n-k+1}}$

δίδοντας $n-k+1$ έτσι ώστε:

$$\hat{P}_k \begin{bmatrix} a_{kk} \\ a_{k+1,k} \\ \vdots \\ a_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

και μετά ορίζουμε $P_k = \begin{bmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & \hat{P}_k \end{bmatrix}$ και επιδρούμε με αυτόν

στον $A^{(k-1)}$ έτσι ώστε

$$A^{(k)} = P_k A^{(k-1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1k}^{(1)} & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2k}^{(2)} & \dots & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{k-1,k}^{(k-1)} & \dots & \dots & a_{n,k}^{(k-1)} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & A_{k-1}^{(k-1)} & \\ 0 & 0 & & 0 & & & \end{pmatrix}$$

Βήμα n-1: Στο τέλος του n-1 βήματος, ο πίνακας $A^{(n-1)}$ θα είναι

$$A^{(n-1)} = P_{n-1} A^{(n-2)} = P_{n-1} P_{n-2} A^{(n-3)} = \dots = \underbrace{P_{n-1} P_{n-2} \dots P_2 P_1}_R A = R \quad (12)$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ & a_{33}^{(3)} & \dots & \dots & a_{3n}^{(3)} \\ & & \ddots & & \vdots \\ 0 & & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix} = R$$

Θέτουμε $Q^T = P_{n-1} P_{n-2} \dots P_2 P_1$ (13).

Από κάθε πίνακα Householder P_i είναι ορθογώνιος τότε και το γινόμενο τους, που είναι ο πίνακας Q^T , είναι ορθογώνιος καθώς και ο πίνακας $Q = P_1^T P_2^T \dots P_{n-1}^T$.

Τελικά, από τις (12), (13) προκύπτει ότι:

$$R = Q^T A \Rightarrow A = QR.$$

Παράδειγμα: Να προσδιοριστεί η QR παραγοντοποίηση του πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Householder. Να χρησιμοποιηθεί αριθμός 45φ.

Λύση:

Βήμα 1: $k=1$.

Κατασκευή P_1 : $P_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

Προσδιορισμός v_3 : $v_3 = x + \text{sign}(x_1) \|x\|_2 e_1$, $x = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$. Τότε

$$\|x\|_2 = \sqrt{0^2 + 1^2 + 1^2} = \sqrt{2}, \text{ sign}(x_1) = \text{sign}(0) = +1, \text{ οήστε}$$

$$v_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} + (+1)\sqrt{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{Άρα, } P_1 = I_3 - \frac{2 v_3 v_3^T}{v_3^T v_3} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{2}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & -1/2 & 1/2 \end{bmatrix}$$

Επομένως

$$A^{(1)} = P_1 A = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{2} & -\frac{3\sqrt{2}}{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & \frac{1-\sqrt{2}}{2} & \frac{2-\sqrt{2}}{2} \\ 0 & -\frac{1+\sqrt{2}}{2} & -\frac{2+\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

Άρα,

$$A \equiv A^{(1)} = \begin{bmatrix} -1.4142 & -2.1213 & -2.8284 \\ 0 & -0.2071 & 0.2929 \\ 0 & -1.2071 & -1.7071 \end{bmatrix}$$

Βήμα 2 : $k=2$.

$$\text{Κατασκευά } P_2 : \hat{P}_2 : \hat{P}_2 \begin{bmatrix} -0.2071 \\ -1.2071 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Οπότε } v_2 = \hat{x} + \text{sign}\{\hat{x}_2\} \|\hat{x}\|_2 e_1 = \begin{bmatrix} -0.2071 \\ -1.2071 \end{bmatrix} + (-1) 1.2247 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.4318 \\ -1.2071 \end{bmatrix}$$

$$\hat{P}_2 = I_2 - \frac{2 v_2 v_2^T}{v_2^T v_2} = \begin{bmatrix} -0.1691 & -0.9856 \\ -0.9856 & 0.1691 \end{bmatrix}$$

$$\text{Κατασκευά } P_2 : P_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.1691 & -0.9856 \\ 0 & -0.9856 & 0.1691 \end{bmatrix}$$

$$\text{Συμπαράγωγος } A^{(2)} = P_2 A^{(1)} = P_2 P_1 A = \begin{bmatrix} -1.4142 & -2.1213 & -2.8284 \\ 0 & 1.2247 & 1.6330 \\ 0 & 0 & -0.5774 \end{bmatrix} = R$$

$$\text{Συμπαράγωγος } Q = P_1 P_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0.8165 & 0.5772 \\ -0.7071 & 0.4082 & -0.5774 \\ -0.7071 & -0.4082 & 0.5770 \end{bmatrix}$$

Η διαγωνίος του R έχει τις προσεγγίσεις των ιδιοτιμών του A και οι στήλες του Q είναι τα ιδιοδιανύσματα

Παρατηρήσεις:

1. Κάθε πίνακας Householder P_k ορίζεται μονοδιάστα από το διάνυσμα v_{n-k+1} που καθορίζει τον πίνακα $\hat{P}_k$. Επομένως, αρκεί κάθε φορά να αποθηκεύουμε μόνο το διάνυσμα v_{n-k+1} . Αν χρειαζόμαστε ολόκληρο τον πίνακα Q , αυτός μπορεί να υπολογιστεί από τους πίνακες Householder P_1 έως P_{n-1} .

2. Το διάνυσμα $v_{n-k+1} = (v_{kk}, \dots, v_{nk})^T$ έχει $(n-k+1)$ συνιστώσες και παράγει $(n-k)$ μηδενικά στο k βήμα. Έτσι, μπορούμε να αποθηκεύσουμε τη $2n$ έως την $(n-k+1)$ συνιστώσα του βέλους $(k+1, k), \dots, (n, k)$ του πίνακα A . Η πρώτη συνιστώσα θα αποθηκεύεται ξεχωριστά σε ένα μονοδιάστατο array.

3. Για τον υπολογισμό του γινομένου $A^{(k)} = P_k A^{(k-1)}$, αρκεί μόνο ο υπολογισμός του διανύσματος v_{n-k+1} , που καθορίζει τον P_k . Πράγματι, όπως φαίνεται και από την απόδειξη του θεωρήματος παραγοντοποίησης QR , ο πίνακας $A^{(k)}$ προκύπτει από τον $A^{(k-1)}$ ως εξής:

- (i) Οι πρώτες $(k-1)$ γραμμές παραμένουν αναλλοίωτες
- (ii) Οι υπόλοιπες $(n-k+1)$ γραμμές προκύπτουν από τη σχέση

$$\left(I - \frac{2 v_{n-k+1} v_{n-k+1}^T}{v_{n-k+1}^T v_{n-k+1}} \right) A_{k-1}^{(k-1)}, \text{ όπου } A_{k-1}^{(k-1)} \text{ είναι ο πίνακας που}$$

προκύπτει από τον $A^{(k-1)}$ αν απομακρυνθούν οι πρώτες $(k-1)$ γραμμές και στήλη του. Από τη σχέση αυτή φαίνεται ότι το

χρόνο μπορεί να υπολογισθεί αποθηκεύοντας μόνο το διάνομα v_{n-k+1} .

Householder Παραγοντοποίηση QR

Έστω ένας $n \times n$ πίνακας A . Ο παρακάτω αλγόριθμος δημιουργεί τα διανύσματα $v_{n-k+1} = (v_{kk}, \dots, v_{nk})^T$, $k=1, \dots, n-1$ που ορίζουν τους πίνακες Householder $P_1, \dots, P_{n-1}$ και έναν άνω τριγωνικό πίνακα R έτσι ώστε :

$$A = QR, \quad Q = P_1 P_2 \dots P_{n-1}$$

Οι συνιστώσες $v_{k+1,k}, \dots, v_{nk}$ αποθηκεύονται στις θέσεις $(k+1, k), \dots, (n, k)$ του A , ενώ οι συντελεστές v_{kk} αποθηκεύονται σε ένα μονοδιάστατο διάνυσμα (array) $v = (v_1, v_2, \dots, v_n)^T$. Οι μη μηδενικές είσοδοι του $A^{(k)} = P_k A^{(k-1)}$, $k=1, \dots, (n-1)$ επηρεάζονται αυτές του A , έτσι ο R καταχωρείται στο άνω τριγωνικό μέρος του A

Αλγόριθμος QR

for $k=1, 2, \dots, n-1$.

B1 : Να προσδιοριστεί διάνυσμα $v_{n-k+1} = (v_{kk}, \dots, v_{nk})^T$ που ορίζει τον $\hat{P}_k$ έτσι

$$\hat{P}_k \begin{pmatrix} a_{kk} \\ \vdots \\ a_{nk} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$a_{kk} = \sigma; \quad a_{ik} = v_{ik} \text{ για } i = k+1, \dots, n$$

$$v_k = v_{kk}; \quad \beta = 2 / (v_{n-k+1}^T v_{n-k+1})$$

B2 : Συμμετρων των εισόδων του υποπίνακα του A που περιέχει τις γραμμές από k έως n και τις στήλες από $k+1$ έως n

$$\text{for } j = k+1, \dots, n \quad s = \beta \sum_{i=k}^n u_{ij} a_{ij}; \quad a_{ij} = a_{ij} - s u_{ik}, \quad i = k, k+1, \dots, n.$$

Πολυπλοκότητα: Για την μετασκευή κάθε $\hat{P}_k$ απαιτούνται περίπου $2(n-k)$ flops ενώ για την μετασκευή κάθε $A^{(k)}$ από τη σχέση $A^{(k)} = P_k A$ (λαμβάνοντας υπόψη την ειδική δομή των P_k) απαιτούνται περίπου $2(n-k)^2$ flops. Έτσι, ο συνολικός αριθμός των flops ισούται με:

$$2 \sum_{k=1}^{n-1} [(n-k)^2 + (n-k)] = 2 \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} + 2 \frac{n(n-1)}{2} \approx \frac{2n^3}{3}.$$

Σε αυτόν τον αριθμό των flops δεν περιλαμβάνεται η αναλυτική μετασκευή του Q . Στις περισσότερες των περιπτώσεων, είναι αρκετό να έχουμε τον Q σε παραγοντοποιημένη μορφή ενώ σε άλλες εφαρμογές ο Q δεν χρειάζεται καθόλου. Εάν παρόλα αυτά απαιτείται ο υπολογισμός του Q , ο αλγόριθμος χρειάζεται επιπλέον $\frac{2}{3}n^3$ flops.

Μετασχηματισμοί Householder για μη τετραγωνικό πίνακα

Σε πολλές εφαρμογές, όπως σε προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων, χρειάζεται η παραγοντοποίηση QR ενός πίνακα διάστασης $m \times n$.

Η μέθοδος Householder μπορεί να χρησιμοποιηθεί, μόνο που τώρα θα απαιτούνται $s = \min\{n, m-1\}$ βήματα (όπου m γραφές και n στήλες του A). Έτσι θα μετασκευάζονται διαδοχικά πίνακες Householder $P_1, P_2, \dots, P_s$ που τελικά θα ικανοποιούν τη σχέση

$$P_s P_{s-1} \dots P_2 P_1 A = Q^T A = \begin{cases} \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \text{αν } m > n \\ (R, S), & \text{αν } m \leq n. \end{cases}$$

Απαιτούμενα flops: Σ' αυτή την περίπτωση τα flops που χρειάζονται για την εκτέλεση του αλγορίθμου είναι:

$$\begin{cases} n^2(m - n/3), & m > n \\ m^2(n - m/3), & m \leq n \end{cases}$$

Αλγόριθμος QR για πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m > n$, $\text{rank}(A) = n$

Περιγράφουμε μόνο την ενημέρωση των εισόδων που διαφοροποιείται από τον προηγούμενο αλγόριθμο της παραγοντοποίησης QR για πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Για $k = 1, 2, \dots, n-1$

◦
◦
◦

Βήμα 2: Ενημέρωση των εισόδων του υποπίνακα A που περιέχει τις γραμμές από k έως n και τις στήλες από $k+1$ έως n .

for $j = k+1, \dots, n$

$$s = \sum_{i=k}^m u_{ik} a_{kj}$$

$$a_{ij} = a_{ij} - s u_{ik}, \quad i = k, k+1, \dots, m.$$

Πλοηγητικότητα: Αλλάζα τώρα η καταμέτρηση των απαιτούμενων πράξεων για την ενημέρωση των εισόδων. Συγκεκριμένα, απαιτούνται $2(m-k-1)(n-k)$ για κάθε επανάληψη. Επομένως, ο συνολικός αριθμός των flops είναι:

$$2 \sum_{k=1}^{n-1} [(m-k-1)(n-k)] = 2 \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} - 2m \frac{n(n+1)}{2} - 2n \frac{n(n+1)}{2} + 2mn^2 + 2n^2 \simeq mn^2 - n^3/3.$$

Ευαίσθητα: Η παραγοντοποίηση QR ενός ορθογώνιου πίνακα με χρήση μετασχηματισμών Householder είναι ευαίσθητη.

Παράδειγμα: Να προσδιορίσετε την παραγοντοποίηση QR του πίνακα $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0.0001 & 0 \\ 0 & 0.0001 \end{pmatrix}$ με $s = \min\{n, m-1\} = \min\{2, 2\} = 2$.

Λύση

Βήμα 1: Κατασκευή P_1 : $P_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0.0001 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

$$v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.0001 \\ 0 \end{pmatrix} + (+1) \sqrt{1^2 + 0.0001^2 + 0^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0.0001 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$P_1 = I_3 - \frac{2v_2 v_2^T}{v_2^T v_2} \approx \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 4 & 0.0002 & 0 \\ 0.0002 & 10^{-8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & -0.0001 & 0 \\ -0.0001 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Αρα $A^{(1)} = P_1 A = \begin{pmatrix} -1 & -0.0001 & 0 \\ -0.0001 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0.0001 & 0 \\ 0 & 0.0001 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & -0.0001 \\ 0 & 0.0001 \end{pmatrix}$

Βήμα 2: Κατασκευή P_2

$$\hat{P}_2 \begin{bmatrix} -0.0001 \\ 0.0001 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}$$

οπότε

$$V_2 = \begin{pmatrix} -0.0001 \\ 0.0001 \end{pmatrix} + (-1) \sqrt{(-0.0001)^2 + 0.0001^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 10^{-4} \begin{pmatrix} -2.4141 \\ 0.1000 \end{pmatrix}$$

$$\hat{P}_2 = I_2 - \frac{2V_2 V_2^T}{V_2^T V_2} = \begin{pmatrix} -0.7071 & 0.7071 \\ 0.7071 & 0.7071 \end{pmatrix}$$

Apa $P_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.7071 & 0.7071 \\ 0 & 0.7071 & 0.7071 \end{bmatrix}$

$$A^{(2)} = P_2 A^{(1)} = P_2 P_1 A = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 0.0001 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Terakhir

$$Q = P_1 P_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0.0001 & -0.0001 \\ -0.0001 & -0.7071 & 0.7071 \\ 0 & 0.7071 & 0.7071 \end{pmatrix},$$

$$R_1 = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 0.0001 \end{pmatrix}.$$

Μετασχηματισμοί Givens

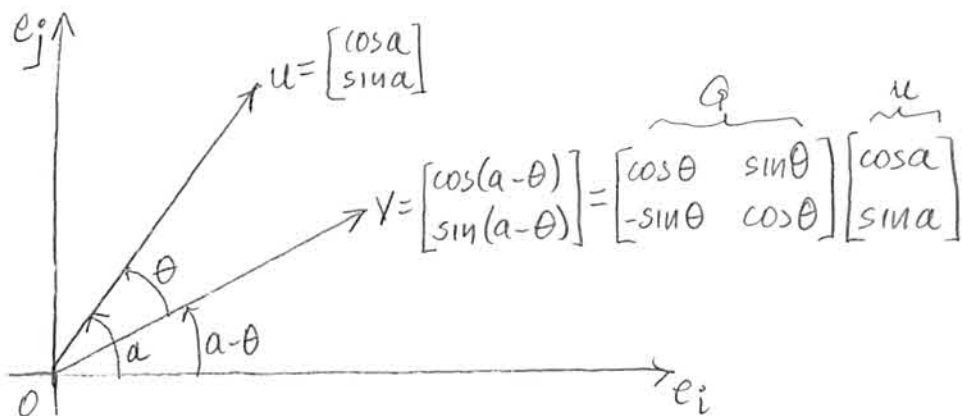
Ορισμός: Ένας πίνακας της μορφής

$$J(i, j, c, s) = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & c & s & \\ & & & -s & c & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

where $c^2 + s^2 = 1$.

ονομάζεται πίνακας Givens και συμβολίζεται $J(i, j, c, s)$.

Επιλέγοντας $c = \cos \theta$ και $s = \sin \theta$, ο πίνακας Givens συμβολίζεται με $J(i, j, \theta)$.



Γεωμετρικά, ο πίνακας Givens $J(i, j, \theta)$ περιστρέφει το ζεύγος αξόνων συνεσφαγμένων $(0, \hat{e}_i, \hat{e}_j)$ κατά τη δοθείσα γωνία θ στο (i, j) επίπεδο. Γι' αυτό ο μετασχηματισμός αυτός είναι γνωστός ως περιστροφή του Givens.

Έτσι λοιπόν, αν ένα διάνυσμα $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$ πολλαπλασιάζεται με του πίνακα Givens $J(i,j,\theta)$ τροποποιούνται μόνο οι i και j συσταγμένες του x .

Ο μετασχηματισμός Givens είναι ορθογώνιος γιατί $J(i,j,\theta) \cdot J(i,j,\theta)^T = I$ αφού $c^2 + s^2 = 1$.

Οι περιστροφές Givens είναι ειδικά χρήσιμοι στην εξαγωγή μηδενικών σε μία συγκεκριμένη θέση ενός διανύσματος. Έτσι λοιπόν, αν

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

και θέλουμε να μηδενίσουμε μόνο το x_k , τότε μπορούμε να παραμενάσουμε την περιστροφή $J(i,k,\theta)$ ($i < k$) τέτοια ώστε το διάνυσμα $J(i,k,\theta) \cdot x$ να έχει 0 στην k θέση. Για να παραμενάσουμε την περιστροφή $J(i,k,\theta)$, παραμενάσουμε πρώτα μια 2×2 περιστροφή Givens $\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}$ έτσι ώστε

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_i \\ x_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \quad (14')$$

Πίνακας core Givens

$$\boxed{c = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_k^2}} \text{ και } s = \frac{x_k}{\sqrt{x_i^2 + x_k^2}}} \quad (14)$$

και 'πειτα εκκλιμαξουμε τον πίνακα $J(i,k,\theta)$ με την εξαγωγή του c στις θέσεις (i,i) και (k,k) , και την εξαγωγή των s και $-s$ στις θέσεις (i,k) και (k,i) , αντίστοιχα. Το υπόλοιπο τμήμα του πίνακα το συμπληρώνουμε με τα στοιχεία του μοναδιαίου πίνακα.

Παράδειγμα: Να μηδενιστεί η 3η συντεταγμένη του διανύσματος $x = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix}$, με διαδικασία ορθογωνίου μετασχηματισμού.

Λύση: Αφού θέλουμε να μηδενίσουμε την 3η συντεταγμένη, θα έχουμε $k=3$. Θέλουμε να παρασκευάσουμε την περιστροφή $J(i,k,\theta)$ όπου $i < k$, ऐसा ώστε το διάνυσμα $J(i,k,\theta) \cdot x$ να έχει το 0 στη θέση $k=3$. Επομένως $i=1$ ή 2.

1. Αν επιλέξουμε $i=1$ τότε θα έχουμε από την (14') τον core Givens

$$\textcircled{B1} \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_i \\ x_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \leadsto \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \leadsto \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}$$

οπότε λόγω της (14)

$$c = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_3^2}} = \frac{1}{\sqrt{1^2 + 3^2}} = \frac{1}{\sqrt{10}}.$$

$$s = \frac{x_3}{\sqrt{x_1^2 + x_3^2}} = \frac{3}{\sqrt{1^2 + 3^2}} = \frac{3}{\sqrt{10}}.$$

και ο core Givens πίνακας, ο οποίος μου εκφράζει μια 2x2 περιστροφή είναι ο:

$$\begin{bmatrix} 1/\sqrt{10} & 3/\sqrt{10} \\ -3/\sqrt{10} & 1/\sqrt{10} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}$$

(B2) Σχηματισμός του πίνακα Givens $J(1,3,\theta) = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{10} & 0 & 3/\sqrt{10} \\ 0 & 1 & 0 \\ -3/\sqrt{10} & 0 & 1/\sqrt{10} \end{bmatrix}$

και $J(1,3,\theta) \cdot x = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{10} & 0 & 3/\sqrt{10} \\ 0 & 1 & 0 \\ -3/\sqrt{10} & 0 & 1/\sqrt{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10/\sqrt{10} \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{10} \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$

2. Αν επιλέξουμε $i=2$ τότε από την (14') θα έχουμε

(B1) $\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}$ όπου λόγω της (14) είναι

$$c = \frac{x_2}{\sqrt{x_2^2 + x_3^2}} = \frac{-1}{\sqrt{(-1)^2 + 3^2}} = \frac{-1}{\sqrt{10}}, \quad s = \frac{x_3}{\sqrt{x_2^2 + x_3^2}} = \frac{3}{\sqrt{(-1)^2 + 3^2}} = \frac{3}{\sqrt{10}}$$

(B2) Οπότε $J(2,3,\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/\sqrt{10} & 3/\sqrt{10} \\ 0 & -3/\sqrt{10} & -1/\sqrt{10} \end{bmatrix}$ και

$$J(2,3,\theta) x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1/\sqrt{10} & 3/\sqrt{10} \\ 0 & -3/\sqrt{10} & -1/\sqrt{10} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 10/\sqrt{10} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{10} \\ 0 \end{bmatrix}$$

Ο παρακάτω αλγόριθμος υπολογίζει για δομένο $x \in \mathbb{R}^2$ ως παραμέτρους c και s . Το καινούριο x θα είναι $x = J(1, 2, c, s)x$.

Αλγόριθμος μηδενισμού εισόδου διαυδίσματος με πίνακα G δίνοντας

Διαβάσε $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2$

$$\eta x = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$$

$$c = x_1 / \eta x \rightarrow 2 \text{ flops}$$

$$s = x_2 / \eta x \rightarrow 2 \text{ flops}$$

Πολυπλοκότητα: $O(4)$

Παρατήρηση: Ο αλγόριθμος αυτός μπορεί να επεκταθεί για διαδοχικό μηδενισμό εισόδων διαυδίσματος $x \in \mathbb{R}^n$ ώστε να γίνει σπριτζ (δηλ. να έχει όλα τις συνιστώσες, εκτός της πρώτης, μηδέν) ως εξής:

for $i = 2 \dots n$

$x = J(1, i, c, s)x \rightarrow 4 \text{ flops}$

end

Πολυπλοκότητα: $O(4n)$

Γνωρίζουμε ότι η εξαγωγή μηδενικών σε διάνυσμα ώστε να γίνει σπριτζ με τη μέθοδο Householder απαιτεί $O(2n)$ flops. Επομένως

η διαδικασία γίνεται απαιτεί διπλάσια πολυπλοκότητα από την Household. Όμως μπορεί να πετύχει επιπλέον μείωση εισόδων του διαυόμενου, πράγμα που της δίνει πλεονέκτημα έναντι της Household.

Διφύορξια μηδενικών β' ένα διάνυσμα εις της 1ης συστήματι

Παράδειγμα: Δίνεται $x = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}$. Να γίνει σπαιξεί? δμ. να εισάξουμε

0 στη 2η και 3η συστήματι.

Λύση:

(B1) Μηδενισμός της x_2 συστήματι του διανύματος x .

Τότε: $x^{(1)} = J(1,2,c,s)x$

Υπολογισουμε τα c, s : $\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \leadsto \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}$

$$\text{δμλ. } \begin{cases} -s-c=0 \\ s^2+c^2=1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c=1/\sqrt{2} \\ s=-1/\sqrt{2} \end{cases}$$

ή αμεγα από την (14') έχουμε: $c = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $s = \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}} = -\frac{1}{\sqrt{2}}$

Άρα:

$$J(1,2,c,s) = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ και } x^{(1)} = J(1,2,c,s)x = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

(B2) Μηδενισμός ως X_3 συσχετισμένου του διανύσματος $X^{(1)}$
 $i=1, k=3$.

Υπολογίζουμε τα νέα c, s , όπως c', s'

$$\begin{bmatrix} c' & s' \\ -s' & c' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(1)} \\ x_3^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \leadsto \begin{bmatrix} c' & s' \\ -s' & c' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{οπότε } c' = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2^2+2^2}} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{6}} = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad s' = \frac{2}{\sqrt{2^2+2^2}} = \frac{2}{\sqrt{6}} = \frac{\sqrt{6}}{3}$$

$$\text{Άρα, } J(1, 3, c', s') = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & 0 & \sqrt{6}/3 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{6}/3 & 0 & 1/\sqrt{3} \end{bmatrix}$$

$$\text{και } X^{(2)} = J(1, 3, c', s') X^{(1)} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & 0 & \sqrt{6}/3 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{6}/3 & 0 & 1/\sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{6} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Έτσι, $X^{(2)} = P X$, όπου

$$P = J(1, 3, c', s') \cdot J(1, 2, c, s)$$

$$\text{Επαληθεύουν: } P = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & 0 & \sqrt{6}/3 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{6}/3 & 0 & 1/\sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{6} & \sqrt{6}/3 \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{6}}{3\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{6}}{3\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}$$

$$\text{και } P \cdot X = \begin{bmatrix} \sqrt{6} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Παρατήρηση: Όπως αναφέραμε, η ίδια αυτή επεξεργασία και για την εξαγωγή μηδενικών σε συγκεκριμένα θέσης ενός πίνακα.

Περιστροφές Givens και παραγοντοποίηση QR

Είναι φανερό ότι μπορούμε να εφαρμόσουμε μετασχηματισμούς περιστροφής Givens, όπως και με τους μετασχηματισμούς Householder, για την εύρεση μιας QR παραγοντοποίησης ενός πίνακα.

Η μέθοδος του Givens όμως είναι διπλά δαπανηρή συγκριτικά με τη μέθοδο Householder. Όμως, η παραγοντοποίηση QR με εφαρμογή περιστροφών Givens είναι πολύ χρήσιμη στις επαναλήψεις QR για υπολογισμούς ιδιοτιμής και στην επίλυση γραμμικών συστημάτων με δομημένους πίνακες, όπως πίνακες Toeplitz (ένας πίνακας $T = (T_{ij})$ είναι Toeplitz όταν τα στοιχεία κατά μήκος κάθε διαγωνίου είναι ίδια, π.χ. $\begin{bmatrix} 5 & 1 & 3 \\ 2 & 5 & 1 \\ 4 & 2 & 5 \end{bmatrix}$).

Οι περιστροφές Givens προβάλλονται επίσης ως σημαντική εργαλεία στην παράλληλη υπολογιστική σε πολλά σημαντικά προβλήματα της γραμμικής άλγεβρας.

Επί συνέχεια παρουσιάζεται ο αλγόριθμος της QR παραγοντοποίησης ενός πινάκα A με εφαρμογή της μεθόδου Givens. Η βασική ιδέα είναι ακριβώς όπως και με τη μέθοδο Householder.

Υπολογίζονται οι ορθογώνιοι πίνακες $Q_1, Q_2, \dots, Q_k$ εφαρμόζοντας περιστροφές Givens έτσι ώστε

• $A^{(1)} = Q_1 A$ έχει μηδενικά στοιχεία στην 1η στήλη εκτός από τη θέση (1,1)

• $A^{(2)} = Q_2 A^{(1)}$ έχει μηδενικά στοιχεία στην 2η στήλη εκτός από τη θέση (2,2)

κ.ο.κ

Κάθε Q_i δημιουργείται ως ένα γινόμενο περιστροφών Givens.

Ένας τρόπος για τον εκχιασμό των $\{Q_i\}$ είναι:

$$Q_1 = J(1, m, \theta) J(1, m-1, \theta) \dots J(1, 2, \theta)$$

$$Q_2 = J(2, m, \theta) J(2, m-1, \theta) \dots J(2, 3, \theta)$$

κ.ο.κ.

(Γενικά για τα Q_i θέλουμε $m-1$ μεταχιασμούς για να φτιάξουμε τα μηδεν. Ξεκινάμε από το $k=2$ και φτάνουμε στο $k=m$)

Έστω $s = \sin(\eta, m-1)$, όπου η στήλη, m γραμμές. Τότε

$$R = A^{(s)} = Q_s A^{(s-1)} = Q_s Q_{s-1} A^{(s-2)} = \dots = Q_s Q_{s-1} \dots Q_2 Q_1 A = Q^T A$$

Άρα έχουμε: $A = QR$ με $Q^T = Q_s Q_{s-1} \dots Q_2 Q_1$.

Αν $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ είναι ένα διδιάστατο διάνυσμα, τότε είναι

$$c = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}, \quad s = \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \quad \text{και η περιστροφή Givens είναι}$$

$$J(1, 2, \theta) = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \quad \text{επειδή ώστε να ισχύει } J(1, 2, \theta)x = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix}$$

Αλγόριθμος 1: Υπολογισμός των παραμέτρων c και s της περιστροφής του δίνους $I(1,2,\theta)$

B1. Διαβάσε x

B2. Αν $|x_2| \geq |x_1|$ τότε $t = \frac{x_1}{x_2}$, $s = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}$, $c = st$

B3. Αν $|x_2| < |x_1|$ τότε $t = \frac{x_2}{x_1}$, $c = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}$, $s = ct$

(Κάνουμε κανονικοποίηση διαγράφοντας πάντα με το μεγαλύτερο)

Πομπηλοπόση: η flops και 1 τετραγωνική ρίζα.

Αλγόριθμος 2: Υπολογισμός του πολλαπλασιασμού από αριστερά ενός πίνακα A με τον πίνακα περιστροφής του δίνους $I(i,j,\theta)$.

B1. Διαβάσε m, n, A, c, s, i, j ($1 \leq i \leq j \leq m$)

B2. Για $k = 1(1)n$

$$a = a_{ik}$$

$$b = a_{jk}$$

$$a_{ik} = ac + bs$$

$$a_{jk} = -as + bc$$

Πομπηλοπόση: $4n$ flops.

Αλγόριθμος 3: Δημιουργία μηδενικών σε μία συζευγμένη θέση (j, j) ενός $n \times n$ πίνακα A με την εφαρμογή περιστροφών Givens $J(i, j, \theta)$

B1. Διαβάσε $n, A, (j, j)$

B2. Έστω $c = \cos \theta$ και $s = \sin \theta$ έτσι ώστε

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{ji} \\ a_{jj} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{Αλγόριθμος 1})$$

B3. Θέσε $A = J(i, j, \theta)A$ (Αλγόριθμος 2)

Πομπητικότητα: $O(4n)$ flops.

Η διαδικασία αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για επιλεκτικό μηδενισμό εισόδων πίνακα, αλλά και για άνω τριγωνποίηση του πίνακα.

Παράδειγμα: Να μηδενιστεί η a_{21} συζευγμένη τω πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 3 & 4 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix}$$

Λύση: Προσδιορίσουμε τις παραμέτρους Givens c, s .

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ 0 \end{bmatrix} \leadsto c = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}} = \frac{1}{\sqrt{1^2 + 3^2}} = \frac{1}{\sqrt{10}}$$

$$s = \frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}} = \frac{3}{\sqrt{1^2 + 3^2}} = \frac{3}{\sqrt{10}}$$

Άρα

$$J(1, 2, \theta) = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{10} & 3/\sqrt{10} & 0 \\ -3/\sqrt{10} & 1/\sqrt{10} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{και}$$

$$J(1, 2, \theta) A = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{10} & 3/\sqrt{10} & 0 \\ 3/\sqrt{10} & 1/\sqrt{10} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 3 & 4 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10/\sqrt{10} & 1/\sqrt{10} & 15/\sqrt{10} \\ 0 & -3/\sqrt{10} & -5/\sqrt{10} \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix}$$

Παράδειγμα: Δίνεται ο πίνακας $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$, Να μηδενιστεί η είσοδος a_{12} με μετασχηματισμούς Givens

Λύση:

Θετίζουμε ως παραμέτρους Givens για το $x = [1 \ 2]^T$. Πολλαπλασιάζοντας εκ δεξιών με μετασχηματισμό Givens θα έχουμε

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} c' & -s' \\ s' & c' \end{bmatrix}}_{J^T} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{5} & -2/\sqrt{5} \\ 2/\sqrt{5} & 1/\sqrt{5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{5} & 0 \\ 1/\sqrt{5} & -2/\sqrt{5} \end{bmatrix}$$

Αλγόριθμος 4: Παραγοντοποίηση QR ενός μικτού πίνακα A με εφαρμογή περιτροφών Givens

B1. Διαβάσει m, n, A

B2. Για $k = 1(1) \min\{n, m-1\}$

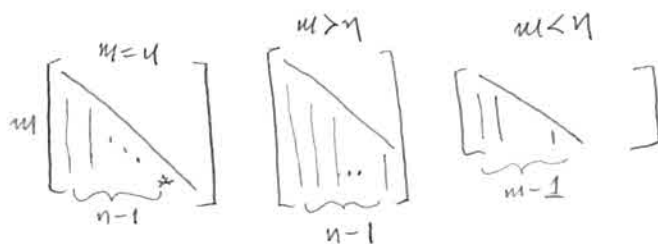
Για $l = k+1, \dots, m$

B21. Εύρεση c και s έτσι ώστε

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{kk} \\ a_{lk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{Αλγόριθμος 1}) \rightarrow 4 \text{ flops.}$$

B22. Φύλαξη των δεικτών k, l και των αριθμών c και s

B23. $A = J(k, l, \theta) A$ (Αλγόριθμος 2) $\rightarrow 4(n-k)$ flops καθώς σε κάθε επανάληψη ενδιαφέρονται $n-k$ στήλες των k, l γραμμών



Συνολική Πολυπλοκότητα: (Υποθέτουμε ότι $m \geq n$)

$$\sum_{k=1}^n [4(m-k) + 4(n-k)(m-k)] = \sum_{k=1}^n [4m - 4k + 4nm - 4nk - 4mk + 4k^2] =$$

$$= 4mn - 4 \left(\sum_{k=1}^n k \right) + 4n^2m - 4n \left(\sum_{k=1}^n k \right) - 4m \left(\sum_{k=1}^n k \right) + 4 \left(\sum_{k=1}^n k^2 \right)$$

$$= 4mn - 4 \frac{n(n+1)}{2} + 4n^2m - 4n \frac{n(n+1)}{2} - 4mn \frac{n(n+1)}{2} + 4 \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$$

$$4mn - 2n(n+1) + 4n^2m - 2n^2(n+1) - 2mn(n+1) + 2 \frac{n(n+1)(2n+1)}{3}$$

$$4mn - 2n^2 - 2n + 4n^2m - 2n^3 - 2n^2 - 2mn^2 - 2mn + \frac{2n}{3}(2n^2 + n + 2n + 1)$$

$$2n^2m - 2n^2 - 2n^3/3 - 4n/3 + 2mn = O(2n^2m - 2n^2/3)$$

Διηγήτρια πολυπλοκότητα από την QR με Householder

Δεν περιλαμβάνεται ο υπολογισμός του Q.

Αν $m < n$ τότε έχουμε $O(2m^2n - 2m^2/3)$

Παράδειγμα: Να προσδιοριστεί η QR παραγοντοποίηση του πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

με μετασχηματισμούς Givens.

Λύση: (B1) Προσδιορισμός παραμέτρων Givens c και s ώστε

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \text{ όπου } c = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}} = \frac{0}{1} = 0, s = \frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}} = 1.$$

-33-

α) $J(1,2,\theta) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

και $A^{(1)} = J(1,2,\theta)A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$

Προσδιορισμός παραμέτρων c και s τέτοιων ώστε

$$\begin{bmatrix} c & -s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{31} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \text{ οπου } c = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{31}^2}} = \frac{1}{\sqrt{1^2 + 1^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ και } s = \frac{a_{31}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{31}^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

α) $J(1,3,\theta) = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$

και $A^{(1)} = J(1,3,\theta)A = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1/\sqrt{2} & -\sqrt{2} \end{bmatrix}$

β) Προσδιορισμός παραμέτρων c και s ώστε

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{22} \\ a_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \end{bmatrix} \text{ οπου } c = \frac{a_{22}}{\sqrt{a_{22}^2 + a_{32}^2}} = \frac{-1}{\sqrt{(-1)^2 + (-1/\sqrt{2})^2}} = \frac{-1}{\sqrt{1+1/2}} = -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$$

$$\text{και } s = \frac{a_{32}}{\sqrt{a_{22}^2 + a_{32}^2}} = \frac{-1/\sqrt{2}}{\sqrt{1+1/2}} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1/\sqrt{2}}{\sqrt{3}} = -\frac{1}{\sqrt{3}}$$

α) $A^{(2)} = J(2,3,\theta)A^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 1/\sqrt{3} & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & -1/\sqrt{2} & -\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 3/\sqrt{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 2\sqrt{2}/\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{3} \end{bmatrix} (=)$

$$\Leftrightarrow A^{(2)} = \begin{bmatrix} 1.4142 & 2.1213 & 2.8284 \\ 0 & 1.2247 & 1.6330 \\ 0 & 0 & 0.5774 \end{bmatrix} = R$$

με 4 γυφία ακρίβειας.

Παρατηρούμε ότι: $R = A^{(2)} = J(2,3,0) A^{(1)}$

$$= \underbrace{J(2,3,0)}_{Q_2} \cdot \underbrace{J(1,3,0)}_{Q_1} \cdot J(1,2,0) \cdot A \Rightarrow$$

$$\Rightarrow R = Q \cdot A \Rightarrow \boxed{A = Q^T R}$$

Παρατήρηση: Αν $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ μη ιδίαζων τότε η QR είναι "έχειδόν" μοναδική. Αν οι διαγώνιοι είσοδοι του R είναι θετικές, τότε είναι ίδιες. Οι πίνακες Q, R που προκύπτουν από την παραγοντοποίηση με μετασχηματισμούς Givens διαφέρουν μόνο στα πρόσημα από αυτή που προκύπτει με Householder. Πιο συγκεκριμένα, στον παραπάνω πίνακα A αν εφαρμόσουμε μετασχηματισμούς Householder βλέπουμε ότι βρίσκουμε $A = Q, R$, όπου

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0.8165 & 0.5774 \\ -0.7071 & 0.4082 & -0.5774 \\ -0.7071 & -0.4082 & 0.5774 \end{bmatrix}, R_1 = \begin{bmatrix} -1.4142 & -2.1213 & -2.8284 \\ 0 & 1.2247 & 1.6330 \\ 0 & 0 & -0.5774 \end{bmatrix}$$

Ενώ με Givens έχουμε $A = Q \cdot R$ όπου

- 35 -

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & 0.8165 & -0.5774 \\ 0.7071 & 0.4082 & 0.5774 \\ 0.7071 & -0.4082 & -0.5774 \end{bmatrix}$$

και R ο παραπάνω πίνακας. Βλέπουμε δηλαδή ότι $Q_1 = Q \cdot C$

και $R_1 = C \cdot R$ με $C = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$.

Θεώρημα (Μοναδικοποίηση της QR παραγοντοποίησης)

Αν $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) και έχει γραμμικά ανεξάρτητες στήλες, τότε υπάρχει μοναδικός $m \times n$ πίνακας Q με ορθοκανονικές στήλες και μοναδικός $n \times n$ άνω τριγωνικός πίνακας R με θετικά διαγώνια στοιχεία τέτοιος ώστε $A = Q \cdot R$.

Αλγόριθμος Lanczos για συμμετρικούς πίνακες

Υπάρχουν περιοχές εφαρμογών, όπως τα δυναμικά συστήματα, διαβητική, φυσική κβάντων, πυρηνική, όπου υπάρχουν προβλήματα ιδιοτιμών για πολύ μεγάλους και αραιούς πίνακες.

Η μέθοδος QR δεν είναι βέβαια πράξη η πιο κατάλληλη για τέτοια προβλήματα διότι με την εφαρμογή της μετατρέφεται η αραιότητα του πίνακα και δημιουργείται πρόβλημα μνήμης.

Αλγόριθμος της μεθόδου Lanczos για συμμετρικούς πίνακες

Έστω $A^{n \times n}$ ένας συμμετρικός πίνακας και v_1 μοναδιαίο διάνυσμα. Ο αλγόριθμος Lanczos κατασκευάζει ταυτόχρονα ένα συμμετρικό ερμιδιακό πίνακα $T^{m \times m}$ και ένα ορθογώνιο πίνακα $V^{n \times m}$ τέτοιο ώστε

$$T = V^T A V$$

Έστω

$$T = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & b_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & b_{n-1} & a_n \end{bmatrix} \text{ και } V = [v_1, v_2, \dots, v_n]$$

διανύσματα Lanczos

$$v_{j+1}^T v_j = 1$$

Τότε έχουμε:

- 3f -

$$V^T A V = \bar{T}$$

$$\text{ή } AV = V \bar{T}$$

$$\text{ή } A \cdot [v_1, v_2, \dots, v_n] = [v_1, v_2, \dots, v_n] \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & b_2 & 0 \\ b_1 & a_2 & & \\ 0 & b_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & b_{n-1} & a_n \end{bmatrix}$$

$$\text{ή } A v_j = a_j v_j + b_{j-1} v_{j-1} + b_j v_{j+1}, \quad j=1, 2, \dots, n-1 \quad (1')$$

$$(\text{εδώ } b_0 v_0 = 0)$$

Πολλαπλασιάζοντας την (1') από αριστερά με v_j^T λαμβάνοντας υπόψη ότι η συνθήκη ορθογωνιότητας δίνει

$$v_j^T v_j = 1$$

$$v_j^T v_k = 0, \quad \text{για } j \neq k$$

υποκώπεται

$$a_j = v_j^T A v_j, \quad j=1, 2, \dots, n \quad (2')$$

Επίσης, αν θέσουμε

$$r_j = A v_j - a_j v_j - b_{j-1} v_{j-1} \quad (3')$$

τότε από (1') και (3') έχουμε

$$r_j = b_j v_{j+1} \Leftrightarrow v_{j+1} = \frac{r_j}{b_j}, \quad \text{αν } b_j \neq 0$$

ου εξασφαλίζεται αν πάρουμε $b_j = \|r_j\|_2$.

Αλγόριθμος 1 (Βασική συγγραμική μέθοδος Lanczos)

// Κατασκευή συγγραμικού τριδιαγωνίου πίνακα T και
 // ορθογώνιου $V = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ έτσι ώστε $V^T A V = T$.

B1. Διάβασε n, A, v_1

B2. Θέσε $v_0 = 0$

$$\beta_0 = 1$$

$$r_0 = v_1$$

B3. Για $j = 1(1)n$

$$v_j = r_{j-1} / \beta_{j-1}$$

$$\alpha_j = v_j^T A v_j$$

$$r_j = (A - \alpha_j I) v_j - \beta_{j-1} v_{j-1}$$

$$\beta_j = \|r_j\|_2.$$

Ένας πιο αποελεγματικός αλγόριθμος είναι:

Αλγόριθμος 2 (Ανασκευασμένη Lanczos) (Gram-Schmidt)

$$v_0 = 0; \beta_0 = 1; v_0 = v_1;$$

Για $j = 1(1)m$ ($m \leq n$) (m αριθμός βημάτων
 ηχημεθόδου πίνακα)

$$v_j = r_{j-1} / \beta_{j-1}$$

$$u_j = A v_j$$

$$r_j = u_j - \beta_{j-1} v_{j-1}$$

$$\alpha_j = v_j^T u_j$$

$$r_j = r_j - \alpha_j v_j$$

$$\beta_j = \|r_j\|_2.$$

Παράδειγμα

Έστω $A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ και αρχικό διάνυσμα $v_1 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$. Να εφαρμοστεί ο αλγόριθμος Lanczos.

Λύση: Σύμφωνα με τον Αλγόριθμο 2 έχουμε:

$$v_0 = 0; \quad \beta_0 = 1; \quad v_0 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = v_1.$$

$$\textcircled{j=1} \quad v_1 = r_0 / \beta_0 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

$$u_1 = A v_1 = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \cdot 1/\sqrt{2} + 1 \cdot 1/\sqrt{2} \\ 1 \cdot 1/\sqrt{2} + 2 \cdot 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3/\sqrt{2} \\ 3/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

$$r_1 = u_1 - \beta_0 v_0 = \begin{bmatrix} 3/\sqrt{2} \\ 3/\sqrt{2} \end{bmatrix} - 1 \cdot 0 = \begin{bmatrix} 3/\sqrt{2} \\ 3/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

$$\alpha_1 = v_1^T u_1 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3/\sqrt{2} \\ 3/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{3}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{3}{\sqrt{2}} = 3.$$

$$r_1 = r_1 - \alpha_1 v_1 = \begin{bmatrix} 3/\sqrt{2} \\ 3/\sqrt{2} \end{bmatrix} - 3 \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\beta_1 = \|r_1\|_2 = 0.$$

Αφού $\beta_1 = 0$, ο αλγόριθμος τελειώνει.

Συμπέρασμα: Ο πίνακας T (με στοιχεία a_j και v_j) είναι

$$T = [a_1] = 3$$

Οι ιδιοτιμές του A προερχίζονται από τις ιδιοτιμές του T .

Στην προκειμένη περίπτωση, ο A έχει ιδιοτιμές 3 και 1.

($\det(A - \lambda I) = 0 \Leftrightarrow \lambda = 3$ ή $\lambda = 1$) και ο αλγόριθμος μας βοήθησε να προερχίσουμε την ιδιοτιμή 3.