Cholesky: praktisch

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ g_{21} & g_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} & \cdots & g_{n1} \\ 0 & g_{22} & \cdots & g_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix}$$

Cholesky: praktisch

Algoritme:

voor $i = 1, 2, \ldots, n$:

$$
\begin{aligned}
g_{ij} &= \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} g_{ik} g_{jk} \right) / g_{jj} \qquad (j = 1, 2, \ldots, i-1) \,, \\
g_{ii} &= \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{ik}^2 \right)^{1/2} \,.
\end{aligned}
$$

Tridiagonale matrices

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & c_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ b_2 & a_2 & c_2 & 0 & & \vdots \\ 0 & b_3 & a_3 & c_3 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & b_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & b_n & a_n \end{pmatrix}.$$

A bezit rechtstreekse LU-decompositie:

$$A = LU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & & 0 \\ \beta_2 & 1 & 0 & & & \vdots \\ 0 & \beta_3 & 1 & 0 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & & \beta_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 & c_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha_2 & c_2 & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & & \alpha_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \alpha_n \end{pmatrix}$$

Tridiagonale matrices

Dit levert:

$$\begin{aligned} a_1 &= \alpha_1 \ , \\ b_i &= \beta_i \alpha_{i-1} \qquad (i = 2, 3, \ldots, n) \ , \\ a_i &= \beta_i c_{i-1} + \alpha_i \qquad (i = 2, 3, \ldots, n) \ . \end{aligned}$$

Oplossing:

(1) $\alpha_1 = a_1$

(2) voor $i = 2, 3, \ldots, n$:

$$\begin{aligned} \beta_i &= b_i / \alpha_{i-1} \\ \alpha_i &= a_i - \beta_i c_{i-1} \ . \end{aligned}$$

Idem om uit $LUx = f$ het stelsel op te lossen.

QR-decompositie, Householder

Idee: waarom $A = QR$?

QR-decompositie: Householder matrix

- Definitie: een $m \times m$-matrix H is een Householder-matrix als

$$\boxed{H = I - 2hh^T}$$

zodat $h \in \mathbb{R}^m$ voldoet aan

$$\sum_{j=1}^{m} h_j^2 = h^T h = \langle h, h \rangle = \|h\|_2^2 = 1 \; .$$

- H is symmetrisch en orthogonaal.

$$H^2 = I^2 - 4hh^T + 4hh^T hh^T = I$$

- Meetkundig: spiegeling om een hypervlak

$$x = \langle h, x \rangle h + (x - \langle h, x \rangle h)$$

$$Hx = (I - 2hh^T)x = x - 2h(h^T x) = -\langle h, x \rangle h + (x - \langle h, x \rangle h)$$

QR-decompositie: Householder matrix

Eig: voor elke $x \neq 0$ bestaat een h zodat Hx een veelvoud is van de eenheidsvector e_1, $Hx = \sigma e_1$.

$$Hx = x - 2(hh^T)x = x - 2(h^T x)h = \sigma e_1 \ .$$

H orthogonaal: $\|x\|_2 = \|Hx\|_2 = |\sigma|$. Er volgt

$$h = \frac{x - \sigma e_1}{\|x - \sigma e_1\|_2} \ .$$

Teken van σ is vrij:

$$\sigma = -\,\mathrm{sgn}(x_1)\|x\|_2 \ ,$$

Berekening:

$$\begin{aligned} \|x - \sigma e_1\|_2^2 &= \|x + \mathrm{sgn}(x_1)\|x\|_2 e_1\|_2^2 \\ &= (|x_1| + \|x\|_2)^2 + x_2^2 + x_3^2 + \cdots + x_m^2 \\ &= 2\|x\|_2^2 + 2|x_1|\,\|x\|_2 \ . \end{aligned}$$

QR-decompositie: Householder matrix

Voor gegeven x kunnen we H dus als volgt berekenen:

$$
\begin{array}{ll}
\text{(i)} & u = (\operatorname{sgn}(x_1)(|x_1| + \|x\|_2), x_2, \ldots, x_m) \ , \\
\text{(ii)} & \beta = 1/(\|x\|_2^2 + |x_1|\,\|x\|_2) \ , \\
\text{(iii)} & H = I - \beta u u^T \ .
\end{array}
$$

QR-decompositie

Stap 1, . . ., Stap k

QR-decompositie

Na $n-1$ stappen bekomen we dus

- een boventriangulaire matrix $R = A^{(n-1)}$
- en een orthogonale matrix $Q = \left(H^{(n-1)} \cdots H^{(1)}\right)^{-1} = H^{(1)} H^{(2)} \cdots H^{(n-1)}$

met $A = QR$.

Stelling 2.3. Elke reële $n \times n$-matrix A kan ontbonden worden in een product $A = QR$ van een orthogonale matrix Q en een boventriangulaire matrix R.

QR-decompositie

Om stelsel $Ax = b$ op te lossen: pas linkse vermenigvuldiging met $H^{(k)}$ toe op $C = (A|b) \in \mathbb{R}^{n\times(n+1)}$:

voor $k = 1$ *tot* $n-1$, *stel*

$$
\begin{aligned}
s &= \left(\sum_{j=k}^{n} c_{jk}^2\right)^{1/2} \\
\beta &= (s(|c_{kk}| + s))^{-1} \\
u &= (0, 0, \ldots, 0, c_{kk} + \mathrm{sgn}(c_{kk})s, c_{k+1,k}, \ldots, c_{nk})^T \\
H^{(k)} &= I - \beta u u^T \\
C &= H^{(k)} C
\end{aligned}
$$

QR-decompositie

Algoritme *Householder*
for $k = 1 : n - 1$
    $s = \textbf{sqrt}(C(k:n,k)C(k:n,k));$
    $\beta = 1/(s(\textbf{abs}(C(k,k)) + s));$
    $u(k) = C(k,k) + \textbf{sgn}(C(k,k))s;$
    $u(k+1:n) = C(k+1:n,k);$
    for $j = k : n+1$
        $v(j) = C(k:n,j)u(k:n)$
    end;
    for $i = k : n$
        for $j = k : n+1$
            $C(i,j) = C(i,j) - \beta u(i)v(j)$
        end
    end
end;