

Αριθμητικές Μεθοδοι στην Στατιστική

ΕΝΟΤΗΤΑ 1: Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα

Α. Ν. Γιαννακόπουλος

Ο.Π.Α

Εαρινό Εξάμηνο 2026

- 1 Εισαγωγή
- 2 Τριγωνικά συστήματα
- 3 Μέθοδος απαλοιφής του *Gauss*
- 4 Οδήγηση (*pivoting*)
- 5 Τριγωνική διάσπαση (*LU – decomposition*)
- 6 Διάσπαση *Cholesky*
- 7 Διάσπαση *QR*

Εισαγωγή

Η βάση όλων των αριθμητικών μεθόδων είναι η αριθμητική γραμμική άλγεβρα.

Η αριθμητική γραμμική άλγεβρα συνίσταται στην κατασκευή και μελέτη αλγορίθμων για την

- Επίλυση γραμμικών συστημάτων εξισώσεων
- Αντιστροφή πινάκων
- Διάσπαση πινάκων

Τριγωνικά συστήματα

Κάτω τριγωνικά συστήματα: $Ax = b$ με $a_{ij} = 0, j > i$.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Η λύση αυτών των συστημάτων γίνεται με ευθεία αντικατάσταση (forward substitution)

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{b_1}{a_{11}} \\ x_i &= \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} x_k \right), \quad i = 2, \dots, n. \end{aligned} \tag{1}$$

Ανω τριγωνικά συστήματα: $Ax = b$ με $a_{ij} = 0, j < i$.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Η λύση αυτών των συστημάτων γίνεται με οπισθοδρομική αντικατάσταση (backward substitution)

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{b_n}{a_{nn}} \\ x_i &= \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{k=i+1}^n a_{ik} x_k \right), \quad i = n-1, \dots, 1. \end{aligned} \tag{2}$$

Υπολογιστικό κόστος της μεθόδου

Η λύση ενός τριγωνικού συστήματος διάστασης n χρειάζεται σε κάθε βήμα i

- 1 διαιρεση (με το στοιχείο a_{ii})
- $n - i$ πολ/σμούς και $n - i$ προσθέσεις

Το κάθε βήμα i χρειάζεται συνολικά $1 + 2(n - i)$ πράξεις οπότε συνολικά η μεθοδος χρειάζεται

$$\sum_{i=1}^{n-1} (1 + 2(n - i)) = n + 2 \sum_{k=1}^{n-1} k = n^2 - 1.$$

Αν σε αυτά προσθέσουμε και την αρχική διαίρεση (για την αρχικοποίηση της μεθόδου) καταλήγουμε ότι

Χρειάζονται n^2 πράξεις συνολικά για την επίλυση τριγωνικών συστημάτων

Μέθοδος απαλοιφής του Gauss

Για γενικά συστήματα η πιο απλή μέθοδος επίλυσης είναι η μεθοδος απαλοιφής του Gauss



$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Η ιδέα της μεθόδου είναι κάνοντας γραμμικές πράξεις με τις γραμμές του συστήματος, να μετασχηματισουμε το παραπάνω σύστημα σε ένα άνω τριγωνικό και κατόπιν να το επιλύσουμε με οπισθοδρομική αντικατάσταση.

$$Ax = b \rightsquigarrow A'x = b' \text{ με } a'_{ij} = 0, j < i$$

$$\begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} \\ 0 & a'_{22} & \cdots & a'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a'_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{pmatrix}$$

Η λύση αυτών των συστημάτων γίνεται με οπισθοδρομική αντικατάσταση (backward substitution)

$$x_n = \frac{b'_n}{a'_{nn}}$$

$$x_i = b'_i - \sum_{k=i}^n a'_{ik} x_k, \quad i = n-1, \dots, 1. \quad (3)$$

Η μέθοδος συνίσταται στο να ξεκινήσουμε απο την πρώτη στήλη και προχωρώντας μέχρι την προτελευταία διαδοχικά με κατάλληλες πράξεις στις γραμμές μηδενίζουμε όλους τους συντελεστές της στήλης κάτω απο την διαγώνιο.

Σε κάθε βήμα της μεθόδου τόσο ο πίνακας A όσο και το b μετασχηματίζονται σε καινούργια

$$(A^{(1)}, b^{(1)}) = (A, b) \rightsquigarrow (A^{(2)}, b^{(2)}) \rightsquigarrow \dots \rightsquigarrow (A^{(n-1)}, b^{(n-1)}) = (U, \bar{b})$$

με U άνω τριγωνικό.

Τελικά λύνουμε το συστημα $Ux = \bar{b}$.

Θα περιγράψουμε το k - βήμα της μεθόδου, χρησιμοποιώντας τον συμβολισμό $(A', b') = (A^{(k-1)}, b^{(k-1)})$ και $(A'', b'') = (A^{(k)}, b^{(k)})$

- 1 Για την στήλη k σκοπός μας είναι να μηδενίσουμε τα στοιχεία a'_{jk} , $j = k + 1, \dots, n$
- 2 Για οποιοδήποτε γραμμή $j \in \{k + 1, \dots, n\}$, ο μηδενισμός του στοιχείου a'_{jk} γίνεται

πολ/ζοντας την γραμμή k του A' με τον πολ/στή $m_{jk} = \frac{a'_{jk}}{a'_{kk}}$ και αφαιρώντας το αποτέλεσμα απο την γραμμη j του A' .

- 3 Αυτό θα μετασχηματίσει τα στοιχεία $a'_{j\ell}$ για $\ell = k + 1, \dots, n$ (δηλαδή των υπολοίπων στηλών δεξιά της k) και τα στοιχεία b'_j σε

$$a''_{j\ell} = a'_{j\ell} - m_{jk} a'_{k\ell} = a'_{j\ell} - \frac{a'_{jk}}{a'_{kk}} a'_{k\ell}, \quad \ell = k + 1, \dots, n$$

$$b''_j = b'_j - m_{jk} b'_k = b'_j - \frac{a'_{jk}}{a'_{kk}} b'_k.$$

- 4 Τα βήματα 2 και 3 γίνονται για όλες τις γραμμές $j = k + 1, \dots, n$. Τα παραπάνω βήματα γίνονται για όλα τα $k = 1, \dots, n - 1$.

Υπολογιστικό κόστος της μεθόδου

Η μεθοδος του Gauss για την λυση ενος συστήματος διάστασης n χρειάζεται μια τάξη μεγέθους n^3 υπολογισμών.

Οδήγηση (pivoting)

Η μέθοδος απαλοιφής του Gauss καταρρέει στο βήμα k αν το στοιχείο $a'_{kk} = 0$.

Αν κάτι τέτοιο συμβεί θα μπορούσαμε απλά να αναδιατάξουμε την σειρά των γραμμών του πίνακα (ή ισοδύναμα του συστήματος) από την k και κάτω αντικαθιστώντας την k γραμμή του πίνακα A' και μία άλλη γραμμή $j \in \{k+1, \dots, n\}$ για την οποία να ισχύει ότι $a'_{jk} \neq 0$.

Είναι λογικό να την αντικαταστήσουμε με αυτή την γραμμή j για την οποία το στοιχείο $|a'_{jk}|$ παίρνει την μεγαλύτερη του τιμή

$$j^* = \arg \max_{j \in \{k+1, \dots, n\}} |a'_{jk}|, \iff |a'_{j^*k}| = \max_{j \in \{k+1, \dots, n\}} |a'_{jk}|.$$

Μετά μπορούμε να συνεχίσουμε την διαδικασία απαλοιφής του Gauss για την στήλη k του καινούργιου πίνακα που πήραμε μετά από την αλλαγή των γραμμών k και j^* μεταξύ τους.

Η παραπάνω διαδικασία ονομάζεται οδήγηση (pivoting) και το στοιχείο a'_{j^*k} στοιχείο οδηγός (pivot) για την στήλη k .

Προφανώς η παραπάνω διαδικασία μπορεί να γίνεται 'προληπτικά' δηλ. για κάθε στήλη k να ψάχνουμε ποιο στοιχείο της απο την k γραμμή και κάτω είναι μεγαλύτερο κατ' απόλυτη τιμή και να κανουμε την εναλλαγή των αντίστοιχων γραμμών.

Στην παραλλαγή αυτή

$$j^* = \arg \max_{j \in \{k, \dots, n\}} |a'_{jk}|, \iff |a'_{j^*k}| = \max_{j \in \{k, \dots, n\}} |a'_{jk}|.$$

Τριγωνική διάσπαση (LU-decomposition)

Η τριγωνική διασπαση ενός πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ είναι μια διάσπαση της μορφής

$$PA = LU,$$

όπου L και U κάτω και άνω τριγωνικοί και P ε πίνακας μετάθεσης.

Χωρίς βλάβη της γενικότητας μπορώ να επιλέξω $L_{ii} = 1$.

Ο πίνακας P περιγράφει το γεγονός ότι ο ίδιος ο πίνακας A μπορεί να μην είναι δυνατόν να γραφεί ως $A = LU$ αλλά αναδιατάσσοντας κατάλληλα τις γραμμές του και οδηγούμενοι στον νέο πίνακα A' μπορούμε να γράψουμε $A' = LU$.

Η αναδιάταξη αυτή 'κωδικοποιείται' στον πίνακα P , ο οποίος είναι τέτοιος ώστε $A' = PU$.

Η τριγωνική διάσπαση είναι **ισοδύναμη** με την μέθοδο απαλοιφής του Gauss, και βρίσκει πολλές εφαρμογές.

Οι πίνακες των στοιχειωδών πράξεων

- E_{ij} : Ο μοναδιαίος πίνακας I έχοντας αλλάξει τις γραμμές i και j (πολλές φορές συμβολίζεται και P_{ij}).
- $E_i(t)$, $t \neq 0$: Ο πίνακας I έχοντας πολλαπλασιάσει την i γραμμή με t .
- $E_{ij}(t)$, $i \neq j$: Ο πίνακας I αφαιρώντας t φορές την j γραμμή του από την i γραμμή του.

Πολλαπλασιασμός ενός τετραγωνικού πίνακα A από τα αριστερά με τον αντίστοιχο πίνακα στοιχειώδους πράξης αντιστοιχεί στο να κάνουμε την αντίστοιχη πράξη στις γραμμές του πίνακα A .

- $E_{ij}^{-1} = E_{it}$.
- $E_i(t)^{-1} = E_i(-t)$.
- $E_{ij}(t)^{-1} = E_{ij}(-t)$.

Ο πίνακας A ονομάζεται ισοδύναμος κατά γραμμές με τον B αν μπορώ απο τον A με πράξεις γραμμών να πάω στον B .

- Αν ο A είναι ισοδύναμος κατά γραμμές με τον B τότε και ο B είναι ισοδύναμος κατά γραμμές με τον A .

→ Αν $B = E_k E_{k-1} \cdots E_1 A$ τότε

$$A = (E_k E_{k-1} \cdots E_1)^{-1} B = E_1^{-1} \cdots E_{k-1}^{-1} E_k^{-1} B \quad (4)$$

- Αν ο A είναι αντιστρέψιμος τότε είναι ισοδύναμος κατα γραμμές με τον I και μπορεί να γραφεί σαν το γινόμενο πινάκων στοιχειωδών πράξεων E_k .

→ Αν $A = E_k E_{k-1} \cdots E_1 I$ τότε $BA = I$ με $B = E_k E_{k-1} \cdots E_1$, και

$$A^{-1} = B = (E_k E_{k-1} \cdots E_1) I, \quad (5)$$

δηλ. για να βρούμε το A^{-1} πρέπει να εφαρμόσουμε την ίδια ακολουθία στοιχειωδών πράξεων.

Πίνακες μεταθέσεων

Ο πίνακας P ονομάζεται πίνακας μετάθεσης και είναι ο μοναδιαίος πίνακας I_n μετά απο αλλαγές των γραμμών μεταξύ τους.

Αυτό μπορεί να περιγράψει τις μεταθέσεις αντικειμένων.

Πίνακες μεταθέσεων μπορεί να χρησιμοποιηθούν για να περιγράψουν την εναλλαγή γραμμών σε ένα πίνακα.

Παράδειγμα

Έστω το σύνολο $\{s_1, s_2, s_3, s_4\} \simeq (s_1, s_2, s_3, s_4)^T = s$ το οποίο μεταθέτωντας τα αντικείμενα του γίνεται $\{s_1, s_4, s_2, s_3\} \simeq (s_1, s_4, s_2, s_3)^T = \pi(s)$.

Αυτό μπορεί να γραφεί χρησιμοποιώντας τον πίνακα

$$P_\pi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

υπο την έννοια ότι $\pi(s) = P_\pi s$.

Εναλλακτικά μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε και το διάνυσμα $\rho_\pi = (1, 4, 2, 3)$.

Οι πίνακες που προκύπτουν από την αντιμετάθεση 2 μόνο στοιχείων π.χ. του i με το j θα συμβολίζεται με P_{ij} , και κατασκευάζεται από τον μοναδιαίο πίνακα I_n αντιμεταθέτωντας την θέση των γραμμών i και j .

Αν σε οποιοδήποτε πίνακα A κάνουμε την πράξη $P_{ij}A$ ο πίνακας που προκύπτει είναι ο A με τις γραμμές i και j αλλαγμένες μεταξύ τους.

Η πράξη της οδήγησης (pivoting) μπορεί να εκφραστεί με την χρήση καταλλήλων πινάκων μεταθέσεων.

Οι πίνακες P_{ij} ονομάζονται απλοί πίνακες μεταθέσεων είναι n^2 το πλήθος και οποιοσδήποτε πίνακας μετάθεσεων P μπορεί να γραφεί σαν γινόμενο τέτοιων πινάκων.

Οι πίνακες μεταθέσεων είναι ορθογώνιοι δηλ.

$$PP^T = P^T P = I_n$$

Οι πίνακες του Gauss

Οι πίνακες

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & m_{k+1} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & m_n & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

ονομάζονται πίνακες του Gauss.

Μπορούμε να δούμε ότι

$$x' = L_k x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & m_{k+1} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & m_n & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ x_{k+1} + m_{k+1}x_k \\ \vdots \\ x_n + m_n x_k \end{pmatrix}$$

ή πιο συνοπτικά

$$x'_i = \begin{cases} x_i, & i = 1, \dots, k, \\ x_i + m_i x_k, & i = k + 1, \dots, n. \end{cases}$$

Η δράση του πίνακα L_k σε οποιοδήποτε διάνυσμα στήλη x αφήνει το διάνυσμα αμετάβλητο μέχρι και την k θέση και αλλάζει μόνο τις συνιστώσες του διανύσματος από την $k + 1$ και μετά.

Η δράση του πίνακα L_k σε πίνακα A αφήνει όλες τις στήλες αμετάβλητες, και δρα μόνο στην στήλη k αφαιρώντας το διάνυσμα αμετάβλητο μέχρι και την k θέση και αλλάζει μόνο τις συνιστώσες του διανύσματος από την $k + 1$ και μετά.

Η διαδικασία απαλοιφής του Gauss μπορεί να ερμηνευθεί σαν την δράση ενός πίνακα L_k για κατάλληλη επιλογή των m στον πίνακα A .

Δεδομένου ότι

$$x_i = \begin{cases} x'_i, & i = 1, \dots, k, \\ x'_i - m_i x'_k, & i = k+1, \dots, n. \end{cases}$$

οι πίνακες μετασχηματισμού του Gauss είναι άμεσα αντιστρέψιμοι και της ίδιας μορφής με τους αρχικούς αλλά με διαφορετικά m ,

$$L_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & -m_{k+1} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -m_n & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Με βάση τα παραπάνω μπορούμε να ξαναγράψουμε την διαδικασία απαλοιφής του Gauss ως

$$A^{(1)} = L_1^{-1} P_1 A$$

$$A^{(2)} = L_2^{-1} P_2 A^{(1)} = L_2^{-1} P_2 L_1^{-1} P_1 A$$

...

$$A^{(n-1)} = U = L_{n-1}^{-1} P_{n-1} A^{(n-2)} = L_{n-1}^{-1} P_{n-1} \cdots L_2^{-1} P_2 L_1^{-1} P_1 A$$

Ο πίνακας U είναι άνω τριγωνικός (απο κατασκευής της διαδικασίας απαλοιφής).

Αν μπορούσαμε να δείξουμε ότι

$$L_{n-1}^{-1} P_{n-1} \cdots L_2^{-1} P_2 L_1^{-1} P_1 = L^{-1} P,$$

για κάποιο κάτω τριγωνικό πίνακα L και ένα πίνακα μεταθέσεων P τότε έχουμε την διασπαση LU .

Μπορεί να αποδειχθεί ότι ο πίνακας P είναι ο

$$P = P_{n-1} \cdots P_1,$$

δηλ. ο πίνακας μετάθεσης που δίνει την τελική θέση των γραμμών του πίνακα μετά απο τα συνολικά στάδια pivoting.

Με λίγο προσπάθεια μπορεί να αποδειχθεί ότι

$$L_{n-1}^{-1} P_{n-1} \cdots L_2^{-1} P_2 L_1^{-1} P_1 = (L'_{n-1} \cdots L'_2 L'_1)(P_{n-1} \cdots P_2 P_1),$$

όπου

$$L'_k = P_{n-1} \cdots P_{k+1} L_k P_{k+1}^{-1} \cdots P_{n-1}^{-1}$$

LU-decomposition

$$1 \quad U = A, L = I, U = I$$

$$2 \quad \text{for } k = 1 \text{ to } n - 1$$

select $j \geq k$ to maximize $|U_{jk}|$

$$U(k, k : n) \leftrightarrow U(j, k : n) \text{ (pivoting)}$$

$$L(k, 1 : k - 1) \leftrightarrow L(j, 1 : k - 1) \text{ (pivoting)}$$

$$p(k, :) \leftrightarrow p(j, :) \text{ (keep track of pivoting operation)}$$

$$\text{for } \ell = k + 1 \text{ to } n$$

$$L(\ell, k) = U(\ell, k) / U(k, k)$$

$$U(\ell, k : n) = U(\ell, k : n) - L(\ell, k)U(k, k : n)$$

Διάσπαση Cholesky

Η διάσπαση Cholesky είναι μια ειδική μορφή της διάσπασης LU για πίνακες συμμετρικούς και θετικά ορισμένους.

Ορισμός

Ένας πίνακας ονομάζεται θετικά (ημι)ορισμένος αν

$$x^T A x \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Σημαντικό παράδειγμα τέτοιων πινάκων είναι οι πίνακες συνδιακύμανσης.

Η διάσπαση Cholesky είναι η διάσπαση ενός συμμετρικού και θετικά ορισμένου πίνακα σε

$$A = LL^T$$

Η διάσπαση Cholesky είναι μια ειδική μορφή της διάσπασης LU .

Για πίνακες της μορφής αυτής δεν χρειάζεται pivoting οπότε μπορεί κανείς να σχεδιάσει ένα πιο αποτελεσματικό αλγόριθμο.

Η μεθοδος αυτή βρίσκει πολύ σημαντικές εφαρμογές στην στατιστική όπως π.χ. στην προσομοίωση κατανομών απο την κανονική οικογένεια ή την οικογένεια της κατανομής Student ή άλλων ελλειπτικών κατανομών σε υψηλές διαστάσεις.

Ένας ισοδύναμος τρόπος να γραφουμε την διάσπαση Cholesky είναι με την μορφή $A = U^T U$ όπου U είναι ένας άνω τριγωνικός πίνακας.

Μπορούμε να δικαιολογήσουμε τον αλγόριθμο με τα παρακάτω βήματα:

Γράφουμε τον A σε block μορφή ως

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & w^T \\ w & K \end{bmatrix}$$

όπου $a_{11} \geq 0$, $K \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ και w κατάλληλο διάνυσμα

Παρατηρούμε ότι ορίζοντας $\alpha = \sqrt{a_{11}}$ μπορούμε να κάνουμε την διάσπαση

$$A = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ \frac{1}{\alpha} w & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & K - \frac{1}{a_{11}} w w^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{\alpha} w^T \\ 0 & I \end{bmatrix} =: R_1^T A_1 R_1,$$

με τον R_1 να είναι άνω τριγωνικός.

Παρατηρήστε ότι ο πίνακας A_1 είναι ένας μοναδιαίος πίνακας στον οποίο έχουμε διατηρήσει την πρώτη γραμμή και την πρώτη στήλη αλλά έχουμε αντικαταστήσει τον υπόλοιπο με τον υποπίνακα

$$K_1 := K - \frac{1}{a_{11}} w w^T \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}.$$

Ας επικεντρώσουμε τώρα στον υποπίνακα

$$K_1 := K - \frac{1}{a_{11}} ww^T \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)} :$$

Ο πίνακας K_1 είναι θετικά ορισμένος

Πράγματι εφόσον $A = R_1^T A_1 R_1$ εύκολα προκύπτει ότι

$$A_1 = (R_1^T)^{-1} A R_1^{-1} = (R_1^{-1})^T A R_1^{-1}$$

Για οποιοδήποτε διανυσμα $z \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ ισχύει

$$\langle z, A_1 z \rangle = \langle z, (R_1^{-1})^T A R_1^{-1} z \rangle = \langle R_1^{-1} z, A R_1^{-1} z \rangle \geq 0,$$

εφόσον ο A είναι θετικά ορισμένος.

Άρα ο A_1 είναι θετικά ορισμένος και κατα συνέπεια και ο K_1 που είναι ένα διαγώνιο block κομμάτι του είναι επίσης θετικά ορισμένος.

Απο το παραπάνω προκύπτει και ότι $(K_1)_{11} > 0$.

Για τον θετικά ορισμένο υποπίνακα $K_1 \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ κάνουμε τώρα ακριβώς ότι με τον πίνακα A αλλά σε μία διάσταση μικρότερη.

Λαμβάνοντας υπόψιν και την δομή του πίνακα A_1 με το βήμα αυτό θα πάρουμε

$$A_1 = R_2^T A_2 R_2$$

με τον πίνακα R_2 να είναι άνω τριγωνικός και τον πίνακα A_2 να είναι ο μοναδιαίος πίνακας στον οποίο έχουμε κρατήσει τις πρώτες 2 γραμμές και στήλες και έχουμε αντικαταστήσει τον υπόλοιπο με τον πίνακα K_2 ο οποίος θα έχει μια μορφή παρόμοια με αυτή του K_1 αλλά με καποια νέα w και στην θέση του a_{11} το $(K_1)_{11}$.

Με τα ίδια επιχειρήματα ο K_2 θα είναι θετικά ορισμένος πίνακας.

Συνδυάζοντας τα δύο παραπάνω βήματα καταλήγουμε ότι

$$A = R_1^T R_2^T A_2 R_2 R_1$$

με τον A_2 να έχει την δομή του A_1 με μια διάσταση κάτω!

Συνεχίζουμε με τα ίδια βήματα και σε κάθε επανάληψη κατεβαίνουμε κατα μία διάσταση έτσι ώστε σε n επαναλήψεις θα έχουμε

$$A = \underbrace{R_1^T R_2^T \cdots R_n^T}_{R^T} \underbrace{R_n \cdots R_2 R_1}_R$$

δηλαδή $A = R^T R$ με τον R άνω τριγωνικό.

Τα παραπάνω βήματα αποδεικνύουν την διάσπαση Cholesky και ταυτόχρονα μας καθορίζουν και ένα πιθανό αλγόριθμο για τον υπολογισμό της.

- Θέτουμε $R = A$
- Για $k = 1, \dots, n$
 - Για $j = k + 1, \dots, n$
 - $R_{j,j:n} = R_{j,j:n} - \frac{R_{kj}}{R_{kk}} R_{k,j:n}$
- $R_{k,k:n} = \frac{1}{\sqrt{R_{kk}}} R_{k,k:n}$

Σχόλια

- 1 Επειδή όλες οι πράξεις γίνονται στο μισό του πίνακα λόγω συμμετρίας ουσιαστικά χρειαζόμαστε μόνο το άνω τριγωνικό κομμάτι του πίνακα A συνεπώς στον αλγόριθμο αρκεί να θέσουμε $R = \text{triu}(A)$ όπου με $\text{triu}(A)$ συμβολίζουμε το άνω τριγωνικό κομμάτι του A .
- 2 Τα βήματα που ακολουθούμε είναι ουσιαστικά τα βήματα της διάσπασης Gauss για τον πίνακα $A = R$

Εναλλακτική προσέγγιση

Ο αλγόριθμος μπορεί να αιτιολογηθεί με τα ακόλουθα βήματα.

Ας ονομάσουμε A_k τους τετραγωνικούς υποπίνακες του A , ξεκινώντας απο τον $A_1 = a_{11}$ και με $A_n = A$.

Είναι προφανες ότι για τον A_1 ισχυει η διάσπαση με $L_1 = \sqrt{a_{11}}$.

Ας υποθέσουμε ότι είμαστε στο βήμα k και ισχυει ότι $A_k = L_k L_k^T$ για κάποιον κάτω τριγωνικό πίνακα L_k .

Γράφουμε τους A_k και L_k σε block μορφή ως

$$A_k = \left[\begin{array}{c|c} A_{k-1} & a_k \\ \hline a_k^T & \alpha_k \end{array} \right], \quad L_k = \left[\begin{array}{c|c} L_{k-1} & 0 \\ \hline \ell_k^T & \lambda_k \end{array} \right],$$

όπου $A_{k-1} \in \mathbb{R}^{(k-1) \times (k-1)}$, $a_k \in \mathbb{R}^{1 \times (k-1)}$, $a_k^T \in \mathbb{R}^{(k-1) \times 1}$, $\alpha_k \in \mathbb{R}$, και όμοια για τον L_k .

Κάνουμε τις πράξεις σε block μορφή

$$\begin{aligned} A_k &= \left[\begin{array}{c|c} A_{k-1} & a_k \\ \hline a_k^T & \alpha_k \end{array} \right] = L_k L_k^T = \left[\begin{array}{c|c} L_{k-1} & 0 \\ \hline \ell_k^T & \lambda_k \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|c} L_{k-1}^T & \ell_k \\ \hline 0 & \lambda_k \end{array} \right] \\ &= \left[\begin{array}{c|c} L_{k-1} L_{k-1}^T & L_{k-1} \ell_k \\ \hline \ell_k^T L_{k-1}^T & \ell_k^T \ell_k + \lambda_k^2 \end{array} \right] \end{aligned}$$

και συγκρίνοντας το δεξιό και το αριστερό μέλος έχουμε

$$A_{k-1} = L_{k-1} L_{k-1}^T \quad (\text{ότι είχαμε στο βήμα } k-1)$$

$$L_{k-1} \ell_k = a_k,$$

$$\ell_k^T L_{k-1}^T = a_k^T, \quad (\text{η ανάστροφη της παραπάνω})$$

$$\ell_k^T \ell_k + \lambda_k^2 = \alpha_k$$

Απο τις σχέσεις αυτές χρειαζόμαστε μονο την δεύτερη και την τέταρτη!

Η δεύτερη είναι ένα κατω τριγωνικό σύστημα και η τέταρτη μία αριθμητική σχέση.

Ξεκινάμε λοιπόν απο $A_1 = a_{11}$ και $L_1 = \sqrt{a_{11}}$.

Στο βήμα k

1 Λύνουμε το κάτω τριγωνικό σύστημα

$$L_{k-1}\ell_k = a_k$$

2 Υπολογίζουμε το

$$\lambda_k = \sqrt{a_k^2 - \ell_k^T \ell_k}$$

Επαναλαμβάνουμε τα βήματα για $k = 1, \dots, n$.

Διάσπαση QR

Η διάσπαση QR είναι η διάσπαση ενός πίνακα A σαν γινόμενο

$$A = QR,$$

$$Q \text{ ορθογώνιος πίνακας } Q^{-1} = Q^T,$$

$$R = U \text{ ανω τριγωνικός}$$

Θεώρημα

Αν A τετραγωνικός μη ιδιόμορφος πίνακας τότε υπάρχει μοναδικό ζεύγος $(Q, R = U)$, όπου Q ορθογώνιος πίνακας και $R = U$ άνω τριγωνικός με θετικά διαγώνια στοιχεία έτσι ώστε $A = QR = QU$.

Η διάσπαση QR για τον πίνακα A συνδέεται με την διάσπαση Cholesky για τον πίνακα $A^T A$.

Πράγματι, αν $A = QR$, με $R = U$, τότε

$$A^T A = R^T Q^T Q R = R^T R = U^T U.$$

Ορίζοντας $L = U^T$ (κάτω τριγωνικός) έχουμε ότι

$$A^T A = LL^T,$$

συνεπώς μπορούμε να υπολογίσουμε τον πίνακα $R = U$ απο την διάσπαση Cholesky του πίνακα $A^T A$.

Έχοντας υπολογίσει τον $R = U$ μπορούμε να υπολογίσουμε τον ορθογώνιο πίνακα Q παρατηρώντας ότι αφού $L = U^T$, απο το ανάστροφο

$$LQ^T = A^T,$$

οποίο είναι ένα συστημα απο n^2 κάτω τριγωνικά συστήματα που μας δινουν τις στήλες του πίνακα Q^T .

Η παραπάνω μέθοδος δεν είναι προτιμητέα για τους εξής λόγους

- 1 Είναι πολύ ακριβή: Χρειάζεται $2n^3 + \frac{n^3}{2}$ πράξεις.
- 2 Το γεγονός ότι ο Q πρέπει να είναι ορθογώνιος πίνακας δεν είναι απο κατασκευής εντός της μεθόδου υπολογισμού συνεπώς επαφύεται στην ορθή επίλυση της $LQ^T = A^T$ και άρα είναι ευαίσθητη σε αριθμητικά σφάλματα.

Ορισμός

Αν $w \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, τότε ο πίνακας $H = H(w) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ονομάζεται πίνακας Housholder αν

$$H(w) = I - \frac{2}{w^T w} w w^T$$

- Οι πίνακες H είναι συμμετρικοί και ορθογώνιοι εφόσον

$$H(w)H(w) = (I - \frac{2}{w^T w} w w^T)(I - \frac{2}{w^T w} w w^T) = I.$$

- Για οποιοδήποτε $a \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ μπορούμε να βρούμε ένα $w \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ τέτοιο ώστε $H(w)a = \|a\|_2 e_1$, και μάλιστα $w = \lambda(a)(a - \|a\|_2 e_1)$, με $\frac{1}{\lambda(a)} = \|a - \|a\|_2 e_1\|_2$.

Η διάσπαση QR μπορεί να εκφραστεί με την χρήση των πινάκων Householder .

Έστω $a_1 = A(1, :) \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ η πρώτη στήλη του πίνακα A .

Μπορούμε να βρούμε ένα πίνακα Householder H_1 τέτοιον ώστε

$$H_1 A = \left[\begin{array}{c|c} \alpha_1 & r_1 \\ \hline 0 & A_1 \end{array} \right],$$

όπου $\alpha_1 \in \mathbb{R}$, $r_1 \in \mathbb{R}^{(n-1) \times 1}$, $A_1 \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$.

Αν $\bar{a}_2 \in \mathbb{R}^{(n-1) \times 1}$, η πρώτη στήλη του A_1 μπορούμε να βρούμε ένα πίνακα Householder $\bar{H}_2 \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ τέτοιον ώστε

$$\bar{H}_2 A_1 = \left[\begin{array}{c|c} \alpha_2 & r_2 \\ \hline 0 & A_2 \end{array} \right],$$

όπου $\alpha_2 \in \mathbb{R}$, $r_2 \in \mathbb{R}^{(n-2) \times 1}$, $A_2 \in \mathbb{R}^{(n-2) \times (n-2)}$.

Ο πίνακας $\bar{H}_2 \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$, αλλά μπορεί να 'επεκταθεί' σε ένα ορθογώνιο πίνακα $H_2 \in \mathbb{R}^{n \times n}$, ως

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \bar{H}_2 & \\ 0 & & & \end{bmatrix},$$

Αν ο πίνακας αυτός πολλαπλασιάσει απο τα αριστερά οποιονδήποτε πίνακα θα του αφήσει την πρώτη γραμμή και την πρώτη στήλη **αμετάβλητες**.

Κατά συνέπεια,

$$H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & * & \cdots & * \\ 0 & \alpha_2 & * & * \\ 0 & 0 & & \\ \vdots & \vdots & \bar{A}_2 & \\ 0 & 0 & & \end{bmatrix},$$

Συνεχίζοντας την διαδικασία αυτή και για τις επόμενες στήλες του πίνακα A μέχρι και την $n - 1$, καταλήγουμε στην μορφή

$$H_{n-1} \cdots H_2 H_1 A = R = U.$$

Ο πίνακας $H_{n-1} \cdots H_2 H_1 =: Q^T$ είναι ορθογώνιος (άρα και ο Q).

Πολλαπλασιάζοντας την σχέση $Q^T A = R = U$ από τα αριστερά με Q και επειδή $QQ^T = I$ καταλήγουμε στην σχέση

$$A = QR = H_1 \cdots H_{n-1} R$$

που είναι η διάσπαση QR .

Διάσπαση QR για μη τετραγωνικούς πίνακες

Η διάσπαση QR μπορεί να γίνει και για μη τετραγωνικούς πίνακες και η επέκταση της αυτή έχει πολύ σημαντικές εφαρμογές.

Θεώρημα

Οποιοσδήποτε πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $n \geq m$ μπορεί να παραγοντοποιηθεί ως

$$A = Q \begin{pmatrix} R \\ 0_{n-m,m} \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} U \\ 0_{n-m,m} \end{pmatrix},$$

όπου

- $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, ορθογώνιος πίνακας
- $R = U \in \mathbb{R}^{m \times m}$ άνω τριγωνικός πίνακας.
- $0_{n-m,m} \in \mathbb{R}^{(n-m) \times m}$ ο μηδενικός πίνακας.

Αν γράψουμε το Q σε block μορφή $Q = [\hat{Q} | \bar{Q}]$ όπου

- $\hat{Q}$ είναι ο πίνακας που αποτελείται από τις πρώτες m στήλες του Q , δηλ. $\hat{Q} \in \mathbb{R}^{n \times m}$
- $\bar{Q} \in \mathbb{R}^{n \times (n-m)}$

μπορούμε να πάρουμε την ‘οικονομική’ μορφή της διάσπασης

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

Αν οι στήλες του A είναι γραμμικά ανεξάρτητες τότε ο πίνακας $R = U$ είναι μη ιδιόμορφος.

FULL QR FACTORIZATION $n \geq m$

$$\begin{array}{ccc}
 \begin{bmatrix} X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix} X & X & X & X & X & X & X & X \\ X & X & X & X & X & X & X & X \\ X & X & X & X & X & X & X & X \\ X & X & X & X & X & X & X & X \\ X & X & X & X & X & X & X & X \\ X & X & X & X & X & X & X & X \\ X & X & X & X & X & X & X & X \\ X & X & X & X & X & X & X & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X & X & X & X \\ & X & X & X \\ & & X & X \\ & & & X \\ \hline & & & & & & & \end{bmatrix} \\
 A & = & Q \quad R \\
 n \times m & & n \times n \quad n \times m
 \end{array}$$

$\hat{R} \ (m \times m)$

REDUCED QR FACTORIZATION $m \geq n$

$$\begin{array}{ccc}
 \begin{bmatrix} X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix} X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X & X & X & X \\ & X & X & X \\ & & X & X \\ & & & X \end{bmatrix} \\
 A & = & \hat{Q} \quad \hat{R} \\
 n \times m & = & n \times m \quad m \times m
 \end{array}$$

Η διάσπαση QR ισχύει και για μιγαδικούς πίνακες.

Θεώρημα (QR διάσπαση)

- 1 Οποιοσδήποτε πίνακας $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $n \geq m$ έχει πλήρη QR διάσπαση (άρα και ανηγμένη QR διάσπαση).
- 2 Οποιοσδήποτε πίνακας $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $n \geq m$, πλήρους τάξης (full rank) έχει μοναδική ανηγμενη QR διάσπαση $A = \hat{Q}\hat{R}$ με $r_{ii} > 0$.

Στην πράξη δεν χρειάζεται να υπολογίσουμε όλους τους πίνακες H στην παραπάνω διάσπαση.

Μπορούμε κατ' αρχήν να παρατηρήσουμε ότι αν $H(u) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ είναι ο πίνακας Householder που αντιστοιχεί στο διάνυσμα u τότε για $\beta = \frac{2}{u^T u}$ έχουμε

$$H(u)v = (I - \beta uu^T)v = v - \beta u(u^T v),$$

$$H(u)A = (I - \beta uu^T)A = A - \beta uu^T A,$$

$$AH(u) = A(I - \beta uu^T) = A - \beta Auu^T,$$

Ας υποθέσουμε ότι ξεκινάμε με ένα πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ τον οποίο θέλουμε να γράψουμε ως $A = QR$.

Η διαδικασία αυτή προϋποθέτει τον μηδενισμό των στοιχείων κάτω από την διαγώνιο για τις πρώτες $k = \min(n - 1, m)$ στήλες του πίνακα A .

Κάθε τέτοιος μηδενισμός ισοδυναμεί με την δράση ενός κατάλληλου πίνακα Householder H_i στον A .

Μετά την δράση k τέτοιων πινάκων θα έχουμε

$$R = H_k \cdots H_1 A$$

που είναι η ζητούμενη διάσπαση αν $Q^{-1} = Q^T = H_k \cdots H_1$.

Θα ξεκινήσουμε απο την πρώτη στηλη και θα βρούμε ένα πίνακα Householder τέτοιον ώστε η δράση του να μηδενίζει όλα τα στοιχεία κατω απο το a_{11} .

Αν $x_1 = A(:, 1)$ η πρώτη στήλη του πίνακα A , το διάνυσμα $u_1 = x_1 \pm \|x_1\|e_1$ θα μας δώσει ένα πίνακα Householder τέτοιο ώστε $H(u_1)x_1 = \|x_1\|e_1$.

Τόσο το $+$ όσο και το $-$ μας κανουν αλλά προτιμαμε να επιλέξουμε αυτό το πρόσημο που δεν θα μηδενίζει την πρώτη συνιστώσα του u οπότε επιλεγουμε

$$u_1 = \begin{cases} x_1 + \|x_1\|e_1 & x_1(1) \geq 0, \\ x_1 - \|x_1\|e_1 & x_1(1) < 0. \end{cases}$$

Ο πίνακας A μετασχηματίζεται στον

$$A \mapsto A_1 := A - \beta u_1 u_1^T A, \quad \beta = \frac{2}{u_1^T u_1}.$$

Στο δεύτερο βήμα θα πρέπει να μηδενίσουμε όλα τα στοιχεία κάτω από την διαγώνιο της δεύτερης στήλης.

Αυτό όμως είναι ισοδύναμο με το να εφαρμόσουμε το πρώτο βήμα στον υποπίνακα $A_1[2 : n, 2 : m]$ δηλ. στο διάνυσμα $x_2 = A_1(2 : n, 2)$ (**Προσοχή έχει διάσταση $n - 1$**)

Το αντίστοιχο διάνυσμα Householder

$$u_2 = \begin{cases} x_2 + \|x_2\| e'_1 & x_2(1) \geq 0, \\ x_2 - \|x_2\| e'_1 & x_2(1) < 0, \end{cases}$$

όπου e'_1 είναι το πρώτο διάνυσμα βάσης του $\mathbb{R}^{n-1}$, θα γεννήσει ένα πίνακα Householder $\bar{H}(u_2) \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ που θα κάνει την δουλειά που θέλουμε για τον υποπίνακα $A_1[2 : n, 2 : m]$.

Ο πίνακας $A_1[2 : n, 2 : m] \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (m-1)}$ θα μετασχηματιστεί στον $\bar{A}_2 \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (m-1)}$,

$$\bar{A}_1 := A_1[2 : n, 2 : m] \mapsto \bar{A}_2 := \bar{A}_1 - \beta u_2 u_2^T \bar{A}_1, \quad \beta = \frac{2}{u_2^T u_2}.$$

Ο πίνακας $\bar{H}(u_2)$ θα πρέπει να **επεκταθεί** σε ένα πίνακα $H(u_2) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, ο οποίος όταν δράσει επάνω στον A_1 του προηγούμενου βήματος να μας δώσει τον πίνακα που θα αντιστοιχεί σε ένα πίνακα που θα διατηρήσει την πρώτη στήλη και την πρώτη γραμμή του A_1 αλλά θα αλλάξει την δευτερη στήλη του έτσι ώστε να μηδενιστούν όλα τα στοιχεία της κατω απο την διαγώνιο.

Ο πίνακα $H(u_2)$ θα είναι ο μοναδιαίος πίνακας I_n στον οποίο ο υποπίνακας $2 : n, 2 : n$ θα έχει αντικατασταθεί απο τον $\bar{H}(u_2)$

Όμοια ο πίνακας $\bar{A}_2$ θα πρέπει να **επεκταθεί** σε ένα πίνακα $A_2 \in \mathbb{R}^{n \times m}$ του οποίου ο $A_2(2 : n, 2 : m) = \bar{A}_2$ ενώ το υπόλοιπο να ταυτίζεται με τον A_1 του προηγούμενου βήματος.

Στο βήμα i θα δουλέψουμε με τον υποπίνακα

$A_{i-1}(i : n, i : m) \in \mathbb{R}^{(n-i) \times (n-i)}$ όπως και στο πρώτο βήμα δηλ. στο διάνυσμα $x_i = A_{i-1}(i : n, i)$.

Το αντίστοιχο διάνυσμα Householder

$$u_i = \begin{cases} x_i + \|x_i\| e'_1 & x_i(1) \geq 0, \\ x_i - \|x_i\| e'_1 & x_i(1) < 0, \end{cases}$$

όπου e'_1 είναι το πρώτο διάνυσμα βάσης του $\mathbb{R}^{n-(i-1)}$, θα γεννήσει ένα πίνακα Householder $\bar{H}(u_i) \in \mathbb{R}^{(n-(i-1)) \times (n-(i-1))}$ που θα κάνει την δουλειά που θέλουμε για τον υποπίνακα $A_{i-1}[i : n, i : m]$.

Ο πίνακας $A_{i-1}[i : n, i : m] \in \mathbb{R}^{(n-(i-1)) \times (m-(i-1))}$ θα μετασχηματιστεί στον $\bar{A}_i \in \mathbb{R}^{(n-(i-1)) \times (m-(i-1))}$,

$$\bar{A}_{i-1} := A_{i-1}[i : n, i : m] \mapsto \bar{A}_i := \bar{A}_{i-1} - \beta u_i u_i^T \bar{A}_{i-1}, \quad \beta = \frac{2}{u_i^T u_i}.$$

Ο πίνακας $\bar{H}(u_i)$ θα πρέπει να **επεκταθεί** σε ένα πίνακα $H(u_i) \in \mathbb{R}^{n \times n}$, ο οποίος όταν δράσει επάνω στον A_{i-1} του προηγούμενου βήματος να μας δώσει τον πίνακα που θα αντιστοιχεί σε ένα πίνακα που θα διατηρήσει τις $i-1$ πρώτες στήλες και τις $i-1$ πρώτες γραμμές του A_{i-1} αλλά θα αλλάξει την i στήλη του έτσι ώστε να μηδενιστούν όλα τα στοιχεία της κατω απο την διαγώνιο.

Ο πίνακας $H_i := H(u_i)$ θα είναι ο μοναδιαίος πίνακας I_n στον οποίο ο υποπίνακας $i:n, i:n$ θα έχει αντικατασταθεί απο τον $\bar{H}(u_i)$

Όμοια ο πίνακας $\bar{A}_i$ θα πρέπει να **επεκταθεί** σε ένα πίνακα $A_i \in \mathbb{R}^{n \times m}$ του οποίου ο $A_i(i:n, i:m) = \bar{A}_i$ ενώ το υπόλοιπο να ταυτίζεται με τον A_{i-1} του προηγούμενου βήματος.

Μετά απο $k = \min(n-1, m)$ βήματα ο πίνακας $A_k = R$ ο άνω τριγωνικός πίνακας που θέλουμε.

Αν χρειαζομαστε και τον πίνακα μετασχηματισμού Q τότε πρέπει να κάνουμε το γινόμενο $H_1 \cdots H_k$.

Ευτυχώς για τον σκοπό αυτό δεν χρειάζεται να κάνουμε όλους τους πολλαπλασιασμούς λόγω της ειδικής μορφής των πινάκων H .

Ξεκινάμε με $Q_0 = I$ και φτιάχνουμε

$$Q_1 = IH(u_1) = IH_1$$

Μετά φτιάχνουμε το

$$Q_2 = Q_1 H_2,$$

το οποίο λόγω της δομής του H_2 αλλάζει μόνο τον υποπίνακα $Q_1(2:n, 2:n)$ και μάλιστα

$$\bar{Q}_1 = Q_1(2:n, 2:n) \mapsto \bar{Q}_2 = \bar{Q}_1 - \beta \bar{Q}_1 u_1 u_1^T, \quad \beta = \frac{2}{u_1^T u_1}.$$

Στο βήμα i υπολογίζουμε το

$$Q_i = Q_{i-1} H_i,$$

το οποίο λόγω της δομής του H_i αλλάζει μόνο τον υποπίνακα $Q_{i-1}(i : n, i : n)$ και μαλιστα

$$\bar{Q}_{i-1} = Q_{i-1}(i : n, i : n) \mapsto \bar{Q}_i = \bar{Q}_{i-1} - \beta \bar{Q}_{i-1} u_i u_1^i, \quad \beta = \frac{2}{u_i^T u_i}.$$

Συνεπώς προχωρούμε μέχρι το βήμα k αντικαθιστώντας κάθε φορά μόνο το κατάλληλο υποπίνακα απο τον Q ξεκινώντας απο τον μοναδιαίο και συνεχίζοντας βήμα βήμα.

Διασπαση QR

$$R = A$$

$$Q = I_n$$

$$k = \min(n - 1, m)$$

for $i = 1 : k$

$$[R(i : n, i : m), u] = \text{firststep}(R(i : n, i : m))$$

% first step for submatrix $R(i : n, i : m)$

$$Q(i : n, i : n) = Q(i : n, i : n) - (2/(\|u\|^2)) * Q(i : n, i : n) * u * u'$$

% modify Q matrix

end

Η συνάρτηση $[C, u] = \text{firststep}(B)$ μηδενίζει όλα τα στοιχεία κάτω από το στοιχείο της πρώτης στήλης στον πίνακα B και επιστρέφει το διάνυσμα Householder u και τον καινούργιο πίνακα C .

$$[C, u] = \text{firststep}(B)$$

$$x = (B(:, 1)$$

$$u = x$$

$$\text{if } x(1) \geq 0$$

$$u(1) = x(1) + \|x\|$$

else

$$u(1) = x(1) - \|x\|$$

end

$$\text{if } \|u\| \neq 0$$

$$\beta = \frac{2}{\|u\|^2}$$

else

$$\beta = 0$$

end

$$C = B - \beta * B * u * u'$$

$$\text{return } [C, u]$$

Αναφορές

L. N. Trefethen, and D. Bau III, Numerical Linear Algebra, SIAM 1997

W. Ford, Numerical Linear Algebra with Applications, using Matlab, Academic Press, 2015

H. Wendland, Numerical Linear Algebra, An introduction, CUP, 2017