KAPITOLA 3

Ortogonální transformace a QR rozklady

V předchozí kapitole jsme na příkladu Schurovy věty ukázali užitečnost unitárních transformací. V této kapitole se podrobně seznámíme se základními dvěma typy unitárních transformací, kterými jsou Givensovy rotace a Householderovy reflexe. Jde o velmi užitečné a často používané nástroje, pomocí nichž můžeme (numericky stabilním způsobem) transformovat danou matici na matici s předem zvolenou strukturou (např. na horní trojúhelníkovou, bidiagonální či horní Hessenbergovu). V této kapitole použijeme Givensovy rotace a Householderovy reflexe k výpočtu tzv. QR rozkladu matice. Jak ukážeme v této i pozdějších kapitolách, QR rozklad matice má široké použití v maticových výpočtech a lze jej např. použít k řešení soustavy lineárních rovnic, problému nejmenších čtverců či jako základní prvek každé iterace v QR algoritmu na výpočet vlastních čísel matice. Seznámíme se i s tzv. Gram-Schmidtovou ortogonalizací a porovnáme různé postupy výpočtu QR rozkladu matice z hlediska výpočetní náročnosti a numerické stability.

3.1 Givensovy rotace v $\mathbb{R}^n$

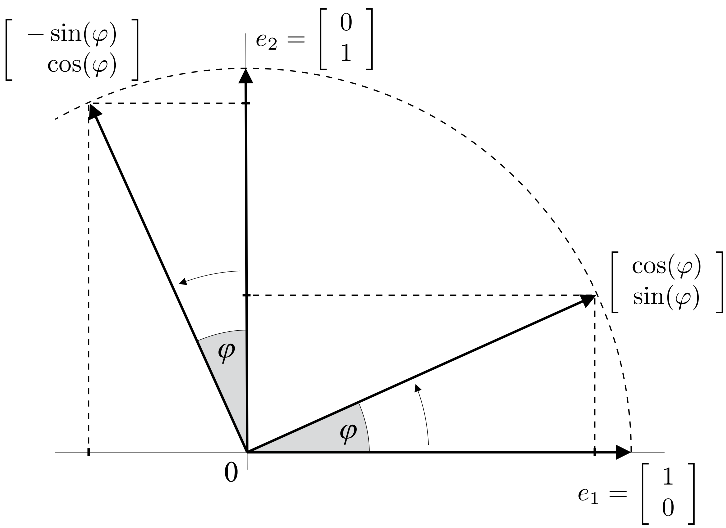
Uvažujme nejprve následující úlohu v $\mathbb{R}^2$. Chceme sestrojit matici $G(\varphi) \in \mathbb{R}^{2\times 2}$, která realizuje pootočení libovolného vektoru x o úhel φ proti směru hodinových ručiček. Zapíšeme-li vektor x v bázi $\{e_1, e_2\}$,

$$x = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} = \xi_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \xi_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \xi_1\, e_1 + \xi_2\, e_2\,,$$

je možné vektor $G(\varphi)x$ vyjádřit ve tvaru

$$G(\varphi)x = \xi_1\,(G(\varphi)\,e_1) + \xi_2\,(G(\varphi)\,e_2).$$

Otáčí-li $G(\varphi)$ bázové vektory e_1 a e_2 o úhel φ, otáčí i libovolný vektor x o úhel φ. Zjevně, viz obrázek 3.1,



Obrázek 3.1: *Rotace jednotkových vektorů o úhel φ.*

$$G(\varphi)\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{bmatrix}, \qquad G(\varphi)\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \end{bmatrix},$$

tj.

$$G(\varphi) = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix}. \tag{3.1}$$

Alternativní odvození matice pootočení $G(\varphi)$ je obsahem cvičení 3.1. Jsou-li v $\mathbb{R}^2$ dány vektory x a y, $\|x\| = \|y\| \neq 0$, svírající úhel

$$\varphi = \arccos \frac{y^T x}{\|x\|\|y\|} \in [0, \pi]$$

tak, že vektor y lze získat pootočením vektoru x proti směru hodinových ručiček o úhel φ, plyne z předchozího

$$y = G(\varphi)x.$$

V zápisu po prvcích

$$y = G(\varphi)\begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_1\cos\varphi - \xi_2\sin\varphi \\ \xi_1\sin\varphi + \xi_2\cos\varphi \end{bmatrix}. \tag{3.2}$$

Matice $G(\varphi)$ se nazývá matice Givensovy rotace. Jak bylo popsáno v úvodu, název Givensova rotace není historicky správný (dříve již tyto matice používal Jacobi, viz např. [125]). Budeme se však držet standardní terminologie zavedené ve výpočetních metodách a používat název Givensova rotace.

Uvažujme nyní prostor $\mathbb{R}^n$. Chceme-li provést rotaci v rovině dané dvojicí jednotkových vektorů $\{e_i\,, e_j\}$, $i < j$, o úhel φ ve směru od e_i k e_j, pak má matice příslušné rotace následující tvar.

Definice 3.1 (Elementární Givensova rotace)**.** *Matice* elementární Givensovy rotace*, která pootočí libovolný vektor v rovině dané dvojicí jednotkových vektorů* $\{e_i\,,\,e_j\}\,,\ i<j$*, o úhel* φ *ve směru od* e_i *k* e_j*, je matice* $G_{i,j}(\varphi)\in\mathbb{R}^{n\times n}$ *tvaru*

$$G_{i,j}(\varphi)=\begin{array}{cl}\left[\begin{array}{ccccccccccc}1&&&&&&&&&&\\&\ddots&&&&&&&&&\\&&1&&&&&&&&\\&&&\cos\varphi&&&&-\sin\varphi&&&\\&&&&1&&&&&&\\&&&&&\ddots&&&&&\\&&&&&&1&&&&\\&&&\sin\varphi&&&&\cos\varphi&&&\\&&&&&&&&1&&\\&&&&&&&&&\ddots&\\&&&&&&&&&&1\end{array}\right]&\begin{array}{l}\\\\\\\cdots\ \textit{i-tý řádek}\\\\\\\\\cdots\ \textit{j-tý řádek}\\\\\\\\\end{array}\end{array},\tag{3.3}$$

přičemž všechny její ostatní prvky jsou nulové.

Zjevně

$$G_{i,j}(\varphi)^TG_{i,j}(\varphi)=G_{i,j}(\varphi)G_{i,j}(\varphi)^T=I_n,$$

tj. $G_{i,j}(\varphi)$ je ortogonální matice. Dále platí $\det(G_{i,j}(\varphi))=1$ (viz cvičení 3.3). Z definice $G_{i,j}(\varphi)$ plyne, že $G_{i,j}(\varphi)x$ modifikuje pouze i-tý a j-tý prvek vektoru $x=[\xi_1,\ldots,\xi_n]^T$,

$$G_{i,j}(\varphi)\,x\ =\begin{array}{cl}\left[\begin{array}{c}\xi_1\\\vdots\\\xi_i\cos\varphi-\xi_j\sin\varphi\\\vdots\\\xi_i\sin\varphi+\xi_j\cos\varphi\\\vdots\\\xi_n\end{array}\right]&\begin{array}{l}\\\\\cdots\ i\text{-tý řádek}\\\\\cdots\ j\text{-tý řádek}\\\\\\\end{array}\end{array}.$$

Givensovy rotace se v numerické lineární algebře používají v řadě algoritmů, kde je potřeba vynulovat prvky matice pomocí násobení unitárními maticemi. Postup nulování opět nejdříve popíšeme v $\mathbb{R}^2$. Chceme vynulovat druhý prvek daného vektoru $x=[\xi_1,\xi_2]^T\in\mathbb{R}^2$, tj. požadujeme, aby platilo

$$y=G(\varphi)\,x=G(\varphi)\left[\begin{array}{c}\xi_1\\\xi_2\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}\\0\end{array}\right].$$

Ze vztahu

$$\xi_1\sin\varphi+\xi_2\cos\varphi=0$$

pro druhý prvek, viz (3.2), dostaneme

$$\begin{aligned} \tan\varphi &= -\frac{\xi_2}{\xi_1}\,, \\ \sin\varphi &= -\frac{\xi_2}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}}\,, \qquad (3.4) \\ \cos\varphi &= \frac{\xi_1}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}}\,. \qquad (3.5) \end{aligned}$$

Druhou možností, jak vynulovat druhý prvek vektoru x, je požadovat

$$y = G(\varphi)\,x = \begin{bmatrix} -\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Potom je

$$\sin\varphi = \frac{\xi_2}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}} \quad \text{a} \quad \cos\varphi = -\frac{\xi_1}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}}\,.$$

Pro obecný n-prvkový vektor $x = [\xi_1, \ldots, \xi_n]^T \in \mathbb{R}^n$ můžeme opakovanou aplikací elementárních Givensových rotací postupně vynulovat $n-1$ prvků vektoru. Chceme-li, aby výsledný vektor y byl násobkem jednotkového vektoru e_1, pak můžeme např. postupně vynulovat prvky na pozicích $n, n-1, \ldots, 2$, a volit roviny rotace postupně jako $\mathrm{span}\{e_1, e_n\}$, $\mathrm{span}\{e_1, e_{n-1}\}, \ldots$, $\mathrm{span}\{e_1, e_2\}$. Celý proces nulování lze schematicky zapsat jako

$$x = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_{n-1} \\ \xi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bullet \\ * \\ \vdots \\ * \\ \bullet \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \bullet \\ * \\ \vdots \\ \bullet \\ 0 \end{bmatrix} \to \;\ldots\; \to \begin{bmatrix} \bullet \\ \bullet \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \pm\|x\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = y\,,$$

kde symboly $*$ značí obecně nenulové prvky, dvojice symbolů $\bullet$ značí prvky, které jsou aktuálně modifikovány elementární rotací. Označíme-li jednotlivé elementární Givensovy rotace jako $G_{1,2}, \ldots, G_{1,n-1}, G_{1,n}$, potom

$$y = \Gamma x\,, \quad \text{kde} \quad \Gamma \equiv G_{1,2} \ldots G_{1,n-1} G_{1,n}\,. \tag{3.6}$$

Matici Γ budeme nazývat *složenou Givensovou rotací*. Poznamenejme, že chcemeli vektor transformovat na násobek jednotkového vektoru, nemusíme prvky vektoru nutně nulovat v pořadí, které jsme naznačili, a ani výběr jednotlivých rovin rotace není nijak předepsán. Protože násobení elementárních (tedy i složených) Givensových rotací není obecně komutativní (cvičení 3.4), záleží ve výrazu (3.6) vyjadřujícím matici Γ na pořadí jednotlivých činitelů. Změníme-li pořadí nulování prvků, dostaneme obecně jinou složenou Givensovu rotaci $\widetilde{\Gamma}$, pro kterou rovněž platí $\widetilde{\Gamma} x = [\pm\|x\|, 0, \ldots, 0]^T$.

3.2 Householderovy reflexe v $\mathbb{R}^n$

Druhou základní unitární transformací je Householderova reflexe (zrcadlení, odraz), jejíž popis začneme pro geometrickou názornost též v reálném oboru. Householderovy reflexe byly poprvé zmíněny v třicátých letech [133, str. 102–105]. Householder [69] byl pak první, který je začal systematicky používat, a to při výpočtu QR rozkladu prezentovaného v následujícím odstavci 3.5.

Uvažujme následující úlohu. Nechť je v $\mathbb{R}^n$ dána nadrovina dimenze $n-1$, kterou popíšeme jejím normálovým vektorem q, $\|q\| = 1$,

$$\mathcal{H}(q) \equiv \{z \in \mathbb{R}^n : \, z \perp q\} \,,$$

a nechť je dán vektor $x \in \mathbb{R}^n$. Naším cílem je nalézt zrcadlový obraz vektoru x podle nadroviny $\mathcal{H}(q)$ (nadrovinu $\mathcal{H}(q)$ nazveme *nadrovinou zrcadlení*).

Vektor x můžeme rozložit na složku

$$x_q = (qq^T)\, x$$

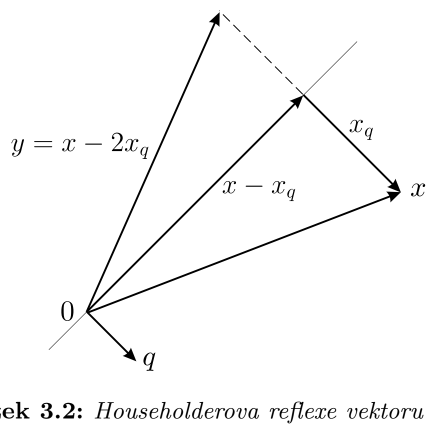
ležící ve směru normálového vektoru a na složku $(x - x_q)$ ortogonální na q, tedy na složku ležící v dané nadrovině. Zjevně

$$x = (x - x_q) + x_q \,,$$

viz kapitola 1, odstavec 1.4. Vektor y, zrcadlový obraz vektoru x podle nadroviny $\mathcal{H}(q)$, získáme tak, že složku x_q zaměníme za $-x_q$ a složka ležící v nadrovině $\mathcal{H}(q)$ se nezmění, tedy

$$y = (x - x_q) - x_q = x - 2x_q = (I - 2qq^T)\, x \equiv H(q)\, x \,, \tag{3.7}$$

viz obrázek 3.2.



Obrázek 3.2: *Householderova reflexe vektoru x v $\mathbb{R}^2$.*

Definice 3.2 (Householderova reflexe)**.** *Nechť $q \in \mathbb{R}^n$ a $\|q\| = 1$. Pak matici*

$$H(q) = I - 2qq^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

nazýváme maticí Householderovy reflexe *vzhledem k nadrovině $\mathcal{H}(q)$ definované normálovým vektorem q.*