Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

Video na Youtube

QR algoritmus

Remark 1

Velkou nevýhodou LR algoritmu je jeho špatná numerická stabilita zejména při aplikování na velké matice. Proto byl v roce 1961 J.G.F. Francisem navržený QR algoritmus. Funguje stejně jako LR algoritmus, ale místo LU rozklad napočítává QR rozklad, tj. rozklad na unitární a horní trojúhelníkovou matici.
Omezíme se nyní pouze na reálné matice.

QR rozklad

Theorem 2

Buď $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$ regulární matice. Pak existuje rozklad $\mathbb{A} = \mathbb{Q}\mathbb{R}$, kde matice $\mathbb{Q}$ je unitární a $\mathbb{R}$ je horní trojúhelníková. Pokud budeme předpokládat, že diagonální prvky matice $\mathbb{R}$ jsou kladné, pak je tento rozklad jednoznačný.

Důkaz.

Video na Youtube

□

Výpočet QR rozkladu

Existují tři způsoby, jak napočítat QR rozklad:

- Gramův-Schmidtův ortonormalizační proces
  - Video na Youtube
- Householderovy transformace
  - Video na Youtube
- Givensovy rotace
  - Video na Youtube

Gramův-Schmidtův ortonormalizační proces

- jde o algoritmus, který převede lineárně nezávislé vektory $\vec{x}^{(1)}, \ldots, \vec{x}^{(n)}$ na množinu vektorů $\vec{q}^{(1)}, \ldots, \vec{q}^{(n)}$, které jsou vzájemně ortonormální a tvoří bázi stejného prostoru jako původní vektory

Gramův-Schmidtův ortonormalizační proces

procedure GRAMMSCHMIDTKLASICKÝ$(\vec{x}^{(1)}, \ldots, \vec{x}^{(n)})$

  $\vec{r}^{(1)} := \vec{r}^{(2)} := \ldots := \vec{r}^{(n)} := \vec{0}$

  $r_1^{(1)} := \left\| \vec{x}^{(1)} \right\|_2$

  $\vec{q}^{(1)} := \frac{1}{r_{11}} \vec{x}^{(1)}$

  for $k = 2, \ldots, n$ **do**

    $\tilde{\vec{q}}^{(k)} := \vec{x}^{(k)}$

    for $i = 1, \ldots, k-1$ **do**

      $r_i^{(k)} := \left(\vec{q}^{(i)}, \vec{x}^{(k)} \right)$

      $\tilde{\vec{q}}^{(k)} := \tilde{\vec{q}}^{(k)} - r_i^{(k)} \vec{q}^{(i)}$

    end for

    $r_k^{(k)} := \left\| \tilde{\vec{q}}^{(k)} \right\|_2$

    $\vec{q}^{(k)} := \frac{1}{r_k^{(k)}} \tilde{\vec{q}}^{(k)}$

  end for

  return $[\vec{q}^{(1)}, \ldots, \vec{q}^{(n)}], [\vec{r}^{(1)}, \ldots, \vec{r}^{(n)}]$

end procedure

Gramův-Schmidtův ortonormalizační proces

- pro lepší numerickou stabilitu se používá modifikovaný G.-S. ort. proces

procedure GRAMMSCHMIDTMODIFIKOVANÝ$(\vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(n)})$

  $\vec{r}^{(1)} := \vec{r}^{(2)} := \dots := \vec{r}^{(n)} := \vec{0}$

  $r_1^{(1)} := \left\|\vec{x}^{(1)}\right\|_2$

  $\vec{q}^{(1)} := \frac{1}{r_{11}}\vec{x}^{(1)}$

  for $k = 2, \dots, n$ **do**

    $\tilde{\vec{q}}^{(k)} := \vec{x}^{(k)}$

    for $i = 1, \dots, k-1$ **do**

      $r_i^{(k)} := \left(\vec{q}^{(i)}, \tilde{\vec{q}}^{(k)}\right)$

      $\tilde{\vec{q}}^{(k)} := \tilde{\vec{q}}^{(k)} - r_i^{(k)}\vec{q}^{(i)}$

    end for

    $r_k^{(k)} := \left\|\tilde{\vec{q}}^{(k)}\right\|_2$

    $\vec{q}^{(k)} := \frac{1}{r_k^{(k)}}\tilde{\vec{q}}^{(k)}$

  end for

  return $[\vec{q}^{(1)}, \dots, \vec{q}^{(n)}], [\vec{r}^{(1)}, \dots, \vec{r}^{(n)}]$

end procedure

Gramův-Schmidtův ortonormalizační proces

- for cykly v proměnných k a j tvoří řádově n^2 iterací, do nich vnořené řádky 8 a 9 mají složitost $O(n)$, celkem je tedy složitost $O(n^3)$

Gramův-Schmidtův ortonormalizační proces

Theorem 3

Buď $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$ regulární matice. Položme v Gramově-Schmidtově ortonormalizačním procesu vektory $\vec{x}^{(1)}, \ldots, \vec{x}^{(n)}$ rovny jednotlivým sloupcům matice $\mathbb{A}$, tj. $\vec{x}^{(1)} = a_{\cdot 1}, \ldots, \vec{x}^{(n)} = a_{\cdot n}$. Pak lze psát

$$(a_{\cdot 1}, \ldots, a_{\cdot n}) = \left(\vec{q}^{(1)}, \ldots, \vec{q}^{(n)}\right) \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \ldots & r_{1n} \\ & r_{22} & \ldots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{pmatrix},$$

tj. $\mathbb{A} = \mathbb{Q}\mathbb{R}$, kde $\mathbb{Q}$ je unitární a $\mathbb{R}$ je horní trojúhelníková matice (s kladnými prvky na diagonále).

Householderovy transformace

Připomeneme si:

Definition 4

Householderovou reflekční maticí (elementární unitární maticí) nazveme každou matici $\mathbb{H}_{\vec{w}}$ tvaru

$$\mathbb{H}_{\vec{w}} = \mathbb{I} - 2\vec{w}\vec{w}^*,$$

kde $\vec{w}$ je **Householderův vektor**, pro který platí $\left\|\vec{w}\right\|_2 = \sqrt{(\vec{w}, \vec{w})} = 1$.

Householderovy transformace

Theorem 5

Nechť $\mathbb{H}_{\vec{w}}$ je Householderova reflekční matice a $\vec{v} \in \mathbb{C}^n$ je libovolný vektor. Pak vektor $\mathbb{H}_{\vec{w}}\vec{v}$ je zrcadlový obraz vektoru $\vec{v}$ podle nadroviny

$$L \equiv \left\{ \vec{x} \in \mathbb{C}^n \mid \vec{w}^H \vec{x} = \left(\vec{w}, \vec{x}\right) = 0 \right\}$$

v tom smyslu, že splňuje následující podmínky:

- $\left\| \mathbb{H}_{\vec{w}}\vec{v} \right\| = \left\| \vec{v} \right\|$
- $\mathbb{H}_{\vec{w}}\vec{v} + \vec{v} \in L$
- $\left(\mathbb{H}_{\vec{w}}\vec{v} - \vec{v}\right) \perp L.$

Householderovy transformace

Remark 6

Chceme-li pomocí Householderovy transformace transformovat vektor $\vec{x}$ na vektor $\vec{y}$, kde $\left\|\vec{x}\right\|_2 = \left\|\vec{y}\right\|_2$, pak volíme

$$\vec{w} = \frac{\vec{x} - \vec{y}}{\left\|\vec{x} - \vec{y}\right\|_2}$$

Pokud zvolíme $\vec{y} = \pm \left\|\vec{x}\right\|_2 \vec{e}^{(1)}$, pak získáme unitární transformaci, která nuluje všechny složky vektoru $\vec{x}$ kromě první.

Householderovy transformace

Remark 7

Pokud by byla první složka vektoru $\vec{x}$ silně převládající tj.

$$|x_1| \approx \left\|\vec{x}\right\|_2 ,$$

pak bychom při špatné volbě znaménka vektoru $\vec{y}$ mohli dostat $\vec{x} - \vec{y}$ velmi malé a dělit téměř nulou. Proto volíme

$$\vec{y} = -\mathrm{sign} x_1 \left\|\vec{x}\right\|_2 \vec{e}^{(1)}$$

tj.

$$\vec{w} = \frac{\vec{x} + \mathrm{sign} x_1 \left\|\vec{x}\right\|_2 \vec{e}_1}{\left\|\vec{x} + \mathrm{sign} x_1 \left\|\vec{x}\right\|_2 \vec{e}_1\right\|_2}.$$

Householderovy transformace

- obecně, pokud pro $k \geq 1$ chceme zachovat prvních $k-1$ složek vektoru $\vec{x}$ a nulovat složky $k+1, \ldots n$, použijeme matici

$$\mathbb{Q}^{(k)} = \begin{pmatrix} \mathbb{I}^{(k)} & \theta \\ \theta & \tilde{\mathbb{Q}}^{(k)} \end{pmatrix},$$

kde $\tilde{\mathbb{Q}}^{(k)} \in \mathbb{R}^{n-k+1,n-k+1}$, $\mathbb{I}^{(k)} \in \mathbb{R}^{k-1,k-1}$ a

$$\tilde{\mathbb{Q}}^{(k)} = \mathbb{I} - 2\vec{w}^{(k)} \left(\vec{w}^{(k)} \right)^T,$$

$$\vec{w}^{(k)} = \frac{\vec{x}^{(k)} + \mathrm{sign} x_1^{(k)} \left\| \vec{x}^{(k)} \right\|_2 \vec{e}^{(k)}}{\left\| \vec{x}^{(k)} + \mathrm{sign} x_1^{(k)} \left\| \vec{x}^{(k)} \right\|_2 \vec{e}^{(k)} \right\|_2},$$

kde $\vec{x}^{(k)} \in \mathbb{R}^{n-k+1}$ je vektor tvořený posledními $n-k+1$ složkami vektoru $\vec{x}$ a vektor $\vec{e}^{(k)}$ je první vektor standardní báze prostoru $\mathbb{R}^{n-k+1}$.

Householderovy transformace

- pro vektor $\vec{y} = \mathbb{Q}^{(k)}\vec{x}$ pak platí,

$$y_j = \begin{cases} x_j & \text{pro} \quad j = 1, \ldots, k-1 \\ \operatorname{sign} x_1^{(k)} \left\| \vec{x}^{(k)} \right\|_2 & \text{pro} \quad j = k \\ 0 & \text{pro} \quad j = k+1, \ldots n \end{cases}$$

- vhodnou aplikací Householderových transformací na sloupce matice $\mathbb{A}$ tak lze eliminovat nenulové prvky pod diagonálou
- jelikož se vše děje pomocí unitárních transformací, získáme unitární převod na matici v horním trojúhelníkovém tvaru, tj. QR rozklad
- konkrétně si to ukážeme na následujícím příkladu

Householderovy transformace - příklad

Mějme matici $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$. Výpočet QR rozkladu probíhá takto:

- volíme $\vec{x}^{(1)} := \mathbb{A}_{\cdot,1}$ tj. první sloupec matice $\mathbb{A}$
- dále volíme

$$\vec{w}^{(1)} := \frac{\vec{x}^{(1)} + \operatorname{sign} x_1^{(1)} \left\|\vec{x}^{(1)}\right\|_2 \vec{e}^{(1)}}{\left\|\vec{x}^{(1)} + \operatorname{sign} x_1^{(1)} \left\|\vec{x}^{(1)}\right\|_2 \vec{e}^{(1)}\right\|_2},$$

  kde $\vec{e}^{(1)}$ je první bazický vektor standardní báze prostoru $\mathbb{R}^n$
- napočítáme

$$\overline{\mathbb{Q}}^{(1)} := \mathbb{I} - 2\vec{w}^{(1)} \left(\vec{w}^{(1)}\right)^T$$

Householderovy transformace - příklad

- potom je

$$\overline{\mathbb{Q}}^{(1)}\mathbb{A} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix},$$

  kde $r_{11} = -\mathrm{sign} x_1^{(1)} \left\| \vec{x}^{(1)} \right\|_2$ (provádíme unitární transformaci, která zachovává velikost původního vektoru).
- nyní označme

$$\mathbb{A}^{(1)} := \begin{pmatrix} a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}$$

Householderovy transformace - příklad

- je tedy

$$\overline{\mathbb{Q}}^{(1)}\mathbb{A} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1n} \\ 0 & & & & \\ \vdots & & \mathbb{A}^{(1)} & & \\ 0 & & & & \end{pmatrix}$$

- podobným způsobem upravíme nyní $\mathbb{A}^{(1)}$
  - postup je trochu podobný jako u Gaussovy eliminace
- volíme

$$x^{(2)} := \mathbb{A}^{(1)}_{\cdot 1},$$

tj. první sloupec matice $\mathbb{A}^{(1)}$ a je $x^{(2)} \in \mathbb{R}^{n-1}$

Householderovy transformace - příklad

- dále volíme

$$\vec{w}^{(2)} := \frac{\vec{x}^{(2)} + \mathrm{sign} x_1^{(2)} \left\| \vec{x}^{(2)} \right\|_2 \vec{e}^{(2)}}{\left\| \vec{x}^{(2)} + \mathrm{sign} x_1^{(2)} \left\| \vec{x}^{(2)} \right\|_2 \vec{e}^{(2)} \right\|_2},$$

  kde $\vec{e}^{(2)}$ je první bazický vektor standardní báze prostoru $\mathbb{R}^{n-1}$

- napočítáme

$$\tilde{\mathbb{Q}}^{(2)} := \mathbb{I} - 2\vec{w}^{(2)} \left(\vec{w}^{(2)} \right)^T,$$

  tj. $\tilde{\mathbb{Q}}^{(2)} \in \mathbb{R}^{n-1,n-1}$

Householderovy transformace - příklad

- potom je

$$\tilde{\mathbb{Q}}^{(2)}\mathbb{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} r_{22} & r_{23} & r_{24} & \dots & r_{2n} \\ 0 & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(2)} \\ 0 & a_{43}^{(2)} & a_{44}^{(2)} & \dots & a_{4n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n3}^{(2)} & a_{n4}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix},$$

kde $r_{22} = -\mathrm{sign} x_1^{(2)} \left\| \vec{x}^{(2)} \right\|_2$.

- nyní označme

$$\mathbb{A}^{(2)} := \begin{pmatrix} a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(2)} \\ a_{43}^{(2)} & a_{44}^{(2)} & \dots & a_{4n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n3}^{(2)} & a_{n4}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}$$

Householderovy transformace - příklad

- potom lze psát

$$\tilde{\mathbb{Q}}^{(2)}\mathbb{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} r_{22} & r_{23} & r_{24} & \dots & r_{2n} \\ 0 & & & & \\ \vdots & & \mathbb{A}^{(2)} & & \\ 0 & & & & \end{pmatrix}$$

- definujeme-li

$$\overline{\mathbb{Q}}^{(2)} := \begin{pmatrix} 1 & \vec{0}^T \\ \vec{0} & \tilde{\mathbb{Q}}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \\ & \tilde{\mathbb{Q}}^{(2)} \end{pmatrix},$$

pak tato transformace při násobení zleva zachovává první řádek a je stále unitární.

Tomáš Oberhuber

QR rozklad
Gramův-Schmidtův ortonormalizační proces
Householderovy transformace
Givensovy rotace

Householderovy transformace - příklad

- potom je tedy vidět, že platí

$$\overline{\mathbb{Q}}^{(2)}\overline{\mathbb{Q}}^{(1)}\mathbb{A} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & \dots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} & \dots & r_{2n} \\ 0 & 0 & a^{(2)}_{33} & a^{(2)}_{34} & \dots & a^{(2)}_{3n} \\ 0 & 0 & a^{(2)}_{43} & a^{(2)}_{44} & \dots & a^{(2)}_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a^{(2)}_{n3} & a^{(2)}_{n4} & \dots & a^{(2)}_{nn} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & \dots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} & \dots & r_{2n} \\ 0 & 0 & & & & \\ \vdots & \vdots & & \mathbb{A}^{(2)} & & \\ 0 & 0 & & & & \end{pmatrix}$$

Householderovy transformace - příklad

V dalším kroku definujeme:

- $x^{(3)} := \mathbb{A}^{(2)}_{\cdot 1}$, tj. $x^{(3)} \in \mathbb{R}^{n-2}$
- $$\vec{w}^{(3)} := \frac{\vec{x}^{(3)} + \operatorname{sign} x_1^{(3)} \left\|\vec{x}^{(3)}\right\|_2 \vec{e}^{(3)}}{\left\|\vec{x}^{(3)} + \operatorname{sign} x_1^{(3)} \left\|\vec{x}^{(3)}\right\|_2 \vec{e}^{(3)}\right\|_2},$$

  kde $\vec{e}^{(3)}$ je první bazický vektor standardní báze prostoru $\mathbb{R}^{n-2}$
- $\tilde{\mathbb{Q}}^{(3)} := \mathbb{I} - 2\vec{w}^{(3)} \left(\vec{w}^{(3)}\right)^T \in \mathbb{R}^{n-2,n-2}$
- $$\overline{\mathbb{Q}}^{(3)} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & \vec{0}^T \\ 0 & 1 & \vec{0}^T \\ \vec{0} & \vec{0} & \tilde{\mathbb{Q}}^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & \tilde{\mathbb{Q}}^{(3)} \end{pmatrix}$$

Householderovy transformace - příklad

A dostáváme tak:

$$\overline{\mathbb{Q}}^{(3)}\overline{\mathbb{Q}}^{(2)}\overline{\mathbb{Q}}^{(1)}\mathbb{A} =$$

$$\overline{\mathbb{Q}}^{(3)} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & \dots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} & \dots & r_{2n} \\ 0 & 0 & & & & \\ \vdots & \vdots & & \mathbb{A}^{(2)} & & \\ 0 & 0 & & & & \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & \dots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} & \dots & r_{2n} \\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} & \dots & r_{3n} \\ 0 & 0 & 0 & a_{44}^{(3)} & \dots & a_{4n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{n4}^{(3)} & \dots & a_{nn}^{(3)} \end{pmatrix}$$

a opět platí, že $r_{33} = -\mathrm{sign} x_1^{(3)} \left\| \vec{x}^{(3)} \right\|_2$.

Householderovy transformace

- postup shrneme v následujícím algoritmu
- matice, které vznikají úpravou původní matice $\mathbb{A}$ a obsahují prvky označované jako r_{ij} a a_{ij}^k v algoritmu označujeme jako $\mathbb{R}^{(k)}$

QR rozklad
Gramův-Schmidtův ortonormalizační proces
Householderovy transformace
Givensovy rotace

Householderovy transformace

procedure HOUSEHOLDERQR($\mathbb{A}$)

$\quad \mathbb{R}^{(1)} = \mathbb{A}$

$\quad \mathbb{Q}^{(1)} = \mathbb{I}$

$\quad$ **for** $k = 1, \ldots, n-1$ **do**

$\quad\quad \vec{x}^{(k)} := \mathbb{R}^{(k)}_{k\ldots n,k}$ (= složky $k \ldots n$ k-tého sloupce)

$$\vec{w}^{(k)} := \frac{\vec{x}^{(k)} + \mathrm{sign}\, x_1^{(k)} \left\| \vec{x}^{(k)} \right\|_2 \vec{e}^{(k)}}{\left\| \vec{x}^{(k)} + \mathrm{sign}\, x_1^{(k)} \left\| \vec{x}^{(k)} \right\|_2 \vec{e}^{(k)} \right\|_2} \in \mathbb{R}^{n-k+1}$$

$$\tilde{\mathbb{Q}}^{(k)} := \mathbb{I} - 2\vec{w}^{(k)} \left(\vec{w}^{(k)} \right)^T \in \mathbb{R}^{n-k+1,n-k+1}$$

$$\overline{\mathbb{Q}}^{(k)} := \begin{pmatrix} \mathbb{I}^{(k)} & \\ & \tilde{\mathbb{Q}}^{(k)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n,n}$$

$$\mathbb{Q}^{(k+1)} := \mathbb{Q}^{(k)} \overline{\mathbb{Q}}^{(k)}$$

$$\mathbb{R}^{(k+1)} := \overline{\mathbb{Q}}^{(k)} \mathbb{R}^{(k)}$$

$\quad$ **end for**

$\quad$ return $\mathbb{Q}^{(n)}, \mathbb{R}^{(n)}$

end procedure

Householderovy transformace

- for cyklus v proměnné k vytváří řádově $O(n)$ iterací
- vnitřek tohoto cyklu obsahuje maticové násobení s Housholderovými transformacemi
- ukážeme, že to lze provést se složitostí $O(n^2)$ a tedy je celková složitost $O(n^3)$

Householderovy transformace

Aplikaci Householderovy transformace $\mathbb{H}_{\vec{w}}$ na matici $\mathbb{A}$ lze provést takto

$$\begin{aligned} \mathbb{H}_{\vec{w}}\mathbb{A} &= \left(\mathbb{I} - 2\vec{w}\vec{w}^*\right)\mathbb{A} = \mathbb{A} - 2\vec{w}\vec{w}^*\mathbb{A} \\ &= \mathbb{A} - 2\vec{w}\left(\mathbb{A}^*\vec{w}\right)^* \end{aligned}$$

Což lze algoritmicky zapsat jako:

1: **procedure** HOUSEHOLDERTRANSFORMATION($\mathbb{A}, \vec{w}$)
2: $\quad\vec{v} := \mathbb{A}^*\vec{w}$
3: $\quad\mathbb{B} := 2\vec{w}\vec{v}^*$
4: $\quad\mathbb{H}_{\vec{w}} := \mathbb{A} - \mathbb{B}$
5: $\quad$return $\mathbb{H}_{\vec{w}}$
6: **end procedure**

A zde má každý krok složitost $O(n^2)$. Složitost celého QR rozkladu je pak $O(n^3)$.

Givensovy rotace

- **Givensovy rotace** jsou ortogonální transformace, které umožňují eliminovat jednotlivé prvky vektoru $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$
- pro dvojici indexů i, j a úhel θ je Givensova rotace definována jako

$$\mathbb{G}(i,j,\theta) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & & \\ & & & \cos\theta & & \sin\theta & & & \\ & & & & \ddots & & & & \\ & & & -\sin\theta & & \cos\theta & & & \\ & & & & & & \ddots & & \\ & & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

- pro vektor $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ odpovídá součin $\vec{y} = \mathbb{G}(i,j,\theta)\,\vec{x}$ rotaci složek (x_i, x_j) o úhel θ po směru hodinových ručiček

Givensovy rotace

- platí tedy

$$y_k = \begin{cases} x_k & \text{pro} \quad k \neq i, j \\ c x_i + s x_j & \text{pro} \quad k = i \\ -s x_i + c x_j & \text{pro} \quad k = j \end{cases}$$

  kde jsme použili značení $s = \sin\theta$ a $c = \cos\theta$.
- volbou

$$c = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, \quad s = \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}},$$

  pak bude $y_i = \sqrt{x_i^2 + x_j^2}$ a $y_j = 0$
- to odpovídá rotaci o úhel $\theta = \arctan -x_j/x_i$
- pomocí Givensových rotací lze postupně eliminovat všechny prvky pod diagonálou a opět tak získat QR rozklad

Givensovy rotace - příklad

Mějme matice $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$, ukážeme výpočet jejího QR rozkladu pomocí Givensových rotací:

- v prním kroku budeme nulovat první prvek v druhém řádku (tj. a_{21}), pomocí prvního řádku
- volíme tedy (horní index se vztahuje k souřadnicím eliminovaného prvku matice)

$$c^{(21)} := \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}, s^{(21)} := \frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}$$

- a definujeme příslušnou Givensovu rotaci

$$\mathbb{G}^{(21)} := \begin{pmatrix} c^{(21)} & s^{(21)} & & & \\ -s^{(21)} & c^{(21)} & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

Givensovy rotace - příklad

- vynásobením matice $\mathbb{A}$ maticí $\mathbb{G}^{(21)}$ dostáváme

$$\mathbb{G}^{(21)}\mathbb{A} =$$

$$\begin{pmatrix} c^{(21)} & s^{(21)} & & & \\ -s^{(21)} & c^{(21)} & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11}^{(21)} & a_{12}^{(21)} & a_{13}^{(21)} & \dots & a_{1n}^{(21)} \\ 0 & a_{22}^{(21)} & a_{23}^{(21)} & \dots & a_{2n}^{(21)} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

- zde platí $a_{11}^{(21)} = \sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}$
- v této výsledné matici budeme chtít nulovat prvek a_{31} pomocí prvního řádku

Givensovy rotace - příklad

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(21)} & a_{12}^{(21)} & a_{13}^{(21)} & \dots & a_{1n}^{(21)} \\ 0 & a_{22}^{(21)} & a_{23}^{(21)} & \dots & a_{2n}^{(21)} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & a_{n,3} & \dots & a_{n,n} \end{pmatrix}$$

- definujeme

$$c^{(31)} := \frac{a_{11}^{(21)}}{\sqrt{\left(a_{11}^{(21)}\right)^2 + {a_{31}}^2}}, s^{(31)} := \frac{a_{31}}{\sqrt{\left(a_{11}^{(21)}\right)^2 + {a_{31}}^2}}$$

- a dále definujeme příslušnou Givensovu rotaci

$$\mathbb{G}^{(31)} := \begin{pmatrix} c^{(31)} & & s^{(31)} & & & \\ & 1 & & & & \\ -s^{(31)} & & c^{(31)} & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

Givensovy rotace - příklad

- tuto transformaci nyní aplikujeme zleva na matici $\mathbb{G}^{(21)}\mathbb{A}$ a dostaneme

$$\mathbb{G}^{(31)}\mathbb{G}^{(21)}\mathbb{A} =$$

$$\begin{pmatrix} c^{(31)} & & s^{(31)} & & & \\ & 1 & & & & \\ -s^{(31)} & & c^{(31)} & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11}^{(21)} & a_{12}^{(21)} & a_{13}^{(21)} & \dots & a_{1n}^{(21)} \\ 0 & a_{22}^{(21)} & a_{23}^{(21)} & \dots & a_{2n}^{(21)} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & \dots & a_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & a_{n,3} & \dots & a_{n,n} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(31)} & a_{12}^{(31)} & a_{13}^{(31)} & \dots & a_{1n}^{(31)} \\ 0 & a_{22}^{(21)} & a_{23}^{(21)} & \dots & a_{2n}^{(21)} \\ 0 & a_{32}^{(31)} & a_{33}^{(31)} & \dots & a_{3n}^{(31)} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & \dots & a_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & a_{n,3} & \dots & a_{n,n} \end{pmatrix}$$

- a platí $a_{11}^{(31)} = \sqrt{\left(a_{11}^{(21)}\right)^2 + a_{31}^2}$

Givensovy rotace - příklad

- stejným způsobem pomocí Givensových rotací

$$
\begin{aligned}
\mathbb{G}^{(41)} &:= \mathbb{G}(a_{41}, a_{11}^{(31)}),\\
\mathbb{G}^{(51)} &:= \mathbb{G}(a_{51}, a_{11}^{(41)}),\\
\vdots \quad &\quad \vdots\\
\mathbb{G}^{(n1)} &:= \mathbb{G}(a_{n,1}, a_{11}^{(n-1,1)})
\end{aligned}
$$

  eliminujeme prvky $a_{41}, a_{51}, \ldots, a_{n1}$
- přitom každá transformace $\mathbb{G}^{(ij)}$ mění pouze i-tý a j-tý řádek matice

Givensovy rotace - příklad

- dostáváme tak vztah

$$\mathbb{G}^{(n1)}\mathbb{G}^{(n-1,1)}\ldots\mathbb{G}^{(21)}\mathbb{A} =$$

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(n,1)} & a_{12}^{(n,1)} & a_{13}^{(n,1)} & \ldots & a_{1n}^{(n,1)} \\ 0 & a_{22}^{(21)} & a_{23}^{(21)} & \ldots & a_{2n}^{(21)} \\ 0 & a_{32}^{(31)} & a_{33}^{(31)} & \ldots & a_{3n}^{(31)} \\ 0 & a_{42}^{(41)} & a_{43}^{(41)} & \ldots & a_{4n}^{(41)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n-1,2}^{(n-1,1)} & a_{n-1,3}^{(n-1,1)} & \ldots & a_{n-1,n}^{(n-1,1)} \\ 0 & a_{n,2}^{(n,1)} & a_{n,3}^{(n,1)} & \ldots & a_{n,n}^{(n,1)} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \ldots & r_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(21)} & a_{23}^{(21)} & \ldots & a_{2n}^{(21)} \\ 0 & a_{32}^{(31)} & a_{33}^{(31)} & \ldots & a_{3n}^{(31)} \\ 0 & a_{42}^{(41)} & a_{43}^{(41)} & \ldots & a_{4n}^{(41)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n-1,2}^{(n-1,1)} & a_{n-1,3}^{(n-1,1)} & \ldots & a_{n-1,n}^{(n-1,1)} \\ 0 & a_{n,2}^{(n,1)} & a_{n,3}^{(n,1)} & \ldots & a_{n,n}^{(n,1)} \end{pmatrix}$$

- kde jsme označili $r_{1j} := a_{1j}^{(n1)}$

Givensovy rotace - příklad

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(21)} & a_{23}^{(21)} & \dots & a_{2n}^{(21)} \\ 0 & a_{32}^{(31)} & a_{33}^{(31)} & \dots & a_{3n}^{(31)} \\ 0 & a_{42}^{(41)} & a_{43}^{(41)} & \dots & a_{4n}^{(41)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n-1,2}^{(n-1,1)} & a_{n-1,3}^{(n-1,1)} & \dots & a_{n-1,n}^{(n-1,1)} \\ 0 & a_{n,2}^{(n,1)} & a_{n,3}^{(n,1)} & \dots & a_{n,n}^{(n,1)} \end{pmatrix}$$

- nyní pomocí Givensových rotací

$$\begin{aligned} \mathbb{G}^{(32)} &:= \mathbb{G}(a_{32}^{(31)}, a_{22}^{(21)}), \\ \mathbb{G}^{(42)} &:= \mathbb{G}(a_{42}^{(41)}, a_{22}^{(32)}), \\ \mathbb{G}^{(52)} &:= \mathbb{G}(a_{52}^{(51)}, a_{22}^{(42)}), \\ &\vdots \qquad \vdots \\ \mathbb{G}^{(n,2)} &:= \mathbb{G}(a_{n2}^{(n,1)}, a_{22}^{(n-1,2)}) \end{aligned}$$

eliminujeme prvky $a_{32}^{(31)}, a_{42}^{(42)}, \dots a_{n2}^{(n,1)}$

Givensovy rotace - příklad

- dostáváme tak, že

$$\mathbb{G}^{n,2}\mathbb{G}^{(n-1,2)}\ldots\mathbb{G}^{(32)}\mathbb{G}^{(n,1)}\ldots\mathbb{G}^{(21)}\mathbb{A} =$$

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \ldots & r_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(n,2)} & a_{23}^{(n,2)} & \ldots & a_{2n}^{(n,2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(32)} & \ldots & a_{3n}^{(32)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(42)} & \ldots & a_{4n}^{(42)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n-1,3}^{(n-1,2)} & \ldots & a_{n-1,n}^{(n-1,2)} \\ 0 & 0 & a_{n,3}^{(n,2)} & \ldots & a_{n,n}^{(n,2)} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \ldots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & \ldots & r_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(32)} & \ldots & a_{3n}^{(32)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(42)} & \ldots & a_{4n}^{(42)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n-1,3}^{(n-1,2)} & \ldots & a_{n-1,n}^{(n-1,2)} \\ 0 & 0 & a_{n,3}^{(n,2)} & \ldots & a_{n,n}^{(n,2)} \end{pmatrix}$$

- kde jsme označili $r_{2j} := a_{2j}^{(n,2)}$
- podobně eliminujeme další prvky pod diagonálou

Givensovy rotace

procedure GIVENSQR($\mathbb{A}$)

  $\mathbb{R}^{(11)} = \mathbb{A}$

  $\mathbb{Q}^{(11)} = \mathbb{I}$

  for $k = 1, \ldots, n-1$ **do**

    for $l = k+1, \ldots, n$ **do**

      $c^{(lk)} := r_{kk}^{(l-1,k)} / \sqrt{\left(r_{kk}^{(l-1,k)}\right)^2 + \left(r_{lk}^{(l-1,k)}\right)^2}$

      $s^{(lk)} := r_{jk}^{(l-1,k)} / \sqrt{\left(r_{kk}^{(l-1,k)}\right)^2 + \left(r_{lk}^{(l-1,k)}\right)^2}$

$$\mathbb{G}_{ij}^{(lk)} := \begin{cases} c^{(lk)} & \textit{pro} \quad i = j = l \lor i = j = k, \\ s^{(lk)} & \textit{pro} \quad i = k \land j = l, \\ -s^{(lk)} & \textit{pro} \quad i = l \land j = k, \\ 1 & \textit{pro} \quad i = j \land i \neq k \land i \neq l, \\ 0 & \textit{jinak} \end{cases}$$

      $\mathbb{R}^{(lk)} := \mathbb{G}^{(lk)} \mathbb{R}^{(l-1,k)}$

      $\mathbb{Q}^{(lk)} := \mathbb{Q}^{(l-1,k)} (\mathbb{G}^{(lk)})^T$

    end for

    $\mathbb{R}^{(k+1,k+1)} := \mathbb{R}^{(kn)}$

    $\mathbb{Q}^{(k+1,k+1)} := \mathbb{Q}^{(kn)}$

  end for

  return $\mathbb{Q}^{(nn)}, \mathbb{R}^{(nn)}$

end procedure

Givensovy rotace

- celkově vytváříme řádově n^2 Givensových transformací
- ačkoliv je aplikace Givensovy transformace maticovým násobením, víme, že ale mění vždy jen dva řádky (sloupce) dané matice
- aplikace Givensovy rotace tak lze snadno implementovat se složitostí $O(n)$

QR rozklad

Ukázali jsme si tři způsoby, jak získat QR rozklad

- Gramův-Schmidtův ortogonalizační proces
  - je numericky nestabilní
  - používá se v modifikované podobě v některých metodách pro řešení soustav lineárních rovnic
- Householderovy a Givensovy transformace jsou numericky stabilnější
- ve všech případech je složitost n^3

QR rozklad

- ztrátu ortogonality lze poměřovat pomocí hodnoty

$$\|\mathbb{I} - \mathbb{Q}\mathbb{Q}^*\|$$

- lze ukázat, že platí (ϵ označuje strojovou přesnost aritmetiky)

Algoritmus	$\|\mathbb{I} - \mathbb{Q}\mathbb{Q}^*\|$
Householderův QR rozklad	ϵ
Givensův QR rozklad	ϵ
Klasický GS	$\kappa(\mathbb{A})^2\epsilon$
Modifikovaný GS	$\kappa(\mathbb{A})\epsilon$
Iterační GS	ϵ