Sveučilište J.J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Valentina Per

Metode za određivanje QR dekompozicije

Završni rad

Osijek, 2018.

Sveučilište J.J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Valentina Per

Metode za određivanje QR dekompozicije

Završni rad

Mentor: doc.dr.sc. Darija Marković

Osijek, 2018.

Sažetak

U ovom radu najprije ćemo objasniti što je to QR dekompozicija matrice. Nakon toga ćemo navesti tri metode uz pomoć kojih možemo odrediti QR dekompoziciju dane matrice. Kao prvu od metoda za određivanje QR dekompozicije pojasnit ćemo Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije. Navest ćemo osnovne definicije i teoreme vezane za ortogonalnost te pojasniti sam Gram–Schmidtov postupak. Opisanu metodu ilustrirat ćemo primjerom. U drugom poglavlju pojasnit ćemo QR dekompoziciju pomoću Householderovih transformacija. Definirat ćemo Householderove matrice i Householderov vektor. Opisat ćemo kako određujemo QR dekompoziciju dane matrice te metodu ilustrirati primjerom. U posljednjem poglavlju pojasnit ćemo kako možemo odrediti QR dekompoziciju pomoću Givensovih rotacija. Uvest ćemo pojam matrica rotacija te navesti neka njihova osnovna svojstva. Zatim ćemo pojasniti Givensove rotacije te kako uz pomoć njih određujemo QR dekompoziciju. Također ćemo kao i u prethodnim poglavljima opisanu metodu ilustrirati primjerom.

Ključne riječi: QR dekompozicija, Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije, Householderove matrice, Givensove rotacije

Abstract

In this paper we will first explain what a QR decomposition of the matrix is. After that, we will name three methods which can help us determine the QR decomposition of any given matrix. First method to be explained will be the Gram-Schmidt orthogonalization process. We will list the main definitions and theorems significant for orthogonalization and the Gram-Schmidt process itself will be explained. Described method we will apply on a given example. In second chapter we will clarify QR decomposition using Householder transformations. Householder matrixes and Householder vector will be define. We will clarify how to determine QR decomposition of a given matrix and apply it on an example. In last chapter we will explain how to determine QR decomposition using Givens rotations. We will define the term of matrix rotation and name some basic properties. Then, we will clarify Givens rotations and how to use them to determine QR decomposition. Also, we will explain the procedure using an example.

Key words: QR decomposition, Gram-Schmidt orthogonalization process, Householder matrix, Givens rotations

Sadržaj

1 Uvod **1**

2 QR dekompozicija koristeći Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije **2**

2.1 Ortogonalnost 2

2.2 Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije 3

2.3 QR dekompozicija 4

3 QR dekompozicija koristeći Householderove transformacije **9**

3.1 Householderove matrice (Householderovi reflektori) 9

3.2 Householderova QR dekompozicija 11

4 QR dekompozicija koristeći Givensove rotacije **13**

4.1 Matrice rotacije 13

4.2 Givensove rotacije 14

4.3 Određivanje QR dekompozicije koristeći Givensove rotacije 16

1 Uvod

Tema ovog rada su metode pomoću kojih možemo odrediti QR dekompoziciju matrice. U pojedinom poglavlju opisanu metodu ilustrirat ćemo primjerom. $\mathcal{M}_{mn}$ predstavlja oznaku vektorskog prostora matrica koje imaju m redaka i n stupaca, dok je $\mathcal{M}_n$ oznaka vektorskog prostora svih kvadratnih matrica reda n.

Ako je $A \in \mathcal{M}_{mn}$ matrica, tada rastav matrice na produkt ortogonalne matrice $Q \in \mathcal{M}_m$ i gornje trokutaste matrice $R \in \mathcal{M}_{mn}$, tako da vrijedi $A = QR$ nazivamo QR dekompozicija (rastav) matrice A. Prisjetimo se da je realna kvadratna matrica Q ortogonalna ako vrijedi $Q^T \cdot Q = I$. Matricu R zovemo gornje trokutastom ako su joj svi elementi ispod glavne dijagonale jednaki nula.

Postoje razni načini za određivanje QR dekompozicije matrice, a mi ćemo promatrati sljedeće:

1. Koristeći Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije;
2. Koristeći Householderove transformacije;
3. Koristeći Givensove rotacije.

Još neke metode mogu se pronaći u [4] i [5].

Nakon što jednom izračunamo ovakav rastav matrice, ubrzava se postupak rješavanja raznih problema u numeričkoj linearnoj algebri. Primjerice, na QR dekompoziciji matrice sustava mogu se bazirati metode za rješavanje problema kao što je problem rješavanja sustava linearnih jednadžbi i linearni problem najmanjih kvadrata o čemu se više može saznati u [7] i [3]. Jedna od najkorisnijih primjena QR dekompozicije je pronalaženje svojstvenih vrijednosti i svojstvenih vektora matrice. Detaljnije pogledati u [2].

U algoritmima koristit ćemo oznake kao u programskom paketu Matlab. Za matricu A oznaka $A([i,k],:)$ predstavljat će matricu s dva retka koja se sastoji od i-tog i k-tog retka matrice A. Analogno, oznaka $A(:,[i,k])$ predstavlja će matricu s dva stupca koja se sastoji od i-tog i k-tog stupca matrice A.

2 QR dekompozicija koristeći Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije

2.1 Ortogonalnost

Kako bi smo mogli promotriti Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije, najprije ćemo se upoznati s osnovnim pojmovima ortogonalnosti. Sve definicije, pojmovi i teoremi su preuzeti iz [1].

Definicija 2.1.1. Neka je V vektorski prostor nad poljem $\mathbb{F}$. Skalarni produkt na V je preslikavanje

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{F}$$

koje ima sljedeća svojstva:

1. $\langle x, x \rangle \geq 0, \quad \forall x \in V;$
2. $\langle x, x \rangle = 0 \iff x = 0;$
3. $\langle x_1 + x_2, y \rangle = \langle x_1, y \rangle + \langle x_2, y \rangle, \quad \forall x_1, x_2, y \in V;$
4. $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle, \quad \forall \alpha \in \mathbb{F}, x, y \in V$;
5. $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}, \quad \forall x, y \in V.$

Definicija 2.1.2. Vektorski prostor na kojem je definiran skalarni produkt zove se unitaran prostor.

Definicija 2.1.3. Neka je V unitaran prostor. Norma na V je funkcija

$$\| \cdot \| : V \to \mathbb{R}$$

definirana s

$$\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}.$$

Definicija 2.1.4. Neka je V unitaran prostor. Kaže se da su vektori x, y iz V međusobno okomiti ili ortogonalni (oznaka: $x \perp y$) ako je $\langle x, y \rangle = 0$. Konačan skup vektora $\{e_1, \ldots, e_k\}$ je ortogonalan ako je $e_i \perp e_j, \forall i \neq j$. Skup $\{e_1, \ldots, e_k\}$ je ortonormiran ako je ortogonalan i ako je $\|e_i\|$=1, $\forall i = 1, \ldots, k$.

Propozicija 2.1.1. Neka je V unitaran prostor. Svaki ortogonalan skup $\{e_1, \ldots, e_k\} \subseteq V$, $k \in \mathbb{N}$, čiji su svi članovi netrivijalni vektori je linearno nezavisan. Posebno, svaki ortonormiran skup je linearno nezavisan.

Dokaz. Neka je $\sum_{i=1}^{k} \alpha_i e_i = 0$. Nakon skalarnog množenja s e_j i primjene svojstva linearnosti skalarnog produkta u prvom argumentu dobivamo da je $\alpha_j \langle e_j, e_j \rangle = 0$. Kako $e_j \neq 0$, smijemo dijeliti s $\langle e_j, e_j \rangle$, pa izlazi $\alpha_j = 0$. □

Definicija 2.1.5. Ortonormiran skup $\{e_1, \ldots, e_n\}$ u unitarnom prostoru V je ortonormirana baza ako je taj skup ujedno i baza za V.

Teorem 2.1.1. (Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije)
Neka je dan linearno nezavisan skup $\{x_1, \ldots, x_k\}, k \in \mathbb{N}$, u unitarnom prostoru V. Tada postoji ortonormiran skup $\{e_1, \ldots, e_k\}$ u V takav da je $[\{e_1, \ldots, e_j\}] = [\{x_1, \ldots, x_j\}], \quad \forall j = 1, \ldots, k.$

Dokaz. Dokaz teorema je moguće pronaći u [1]. □

2.2 Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije

Primjedba 2.2.1. U ovom poglavlju ćemo isključivo koristiti Euklidsku normu. Općenito Euklidsku normu na $\mathcal{M}_{m1}$ definiramo na sljedeći način

$$\|x\| = \sqrt{\langle x, x\rangle} = \sqrt{\sum_{i=1}^{m} x_i^2}.$$

Svi korišteni pojmovi preuzeti su iz [6].
Neka je zadan skup linearno nezavisnih vektora $a_1, a_2, \ldots, a_n \in \mathcal{M}_{m1}$ pri čemu očigledno mora biti $m \geqslant n$. Gram-Schmidtovim postupkom na prirodan način se konstruira ortonormirani skup vektora $q_1, q_2, \ldots, q_n \in \mathcal{M}_{m1}$ koji razapinju isti potprostor u $\mathcal{M}_{m1}$. Postupak je sljedeći:

$$\begin{aligned}
q_1 &= \frac{a_1}{\|a_1\|};\\
q_2 &= \frac{\overline{a_2}}{\|\overline{a_2}\|}, \quad \overline{a_2} = a_2 - \langle q_1, a_2\rangle \cdot q_1;\\
q_3 &= \frac{\overline{a_3}}{\|\overline{a_3}\|}, \quad \overline{a_3} = a_3 - \langle q_1, a_3\rangle \cdot q_1 - \langle q_2, a_3\rangle \cdot q_2;\\
&\cdots\\
q_n &= \frac{\overline{a_n}}{\|\overline{a_n}\|}, \quad \overline{a_n} = a_n - \sum_{i=1}^{n-1} \langle q_i, a_n\rangle \cdot q_i.
\end{aligned}$$

Algoritam 1: Klasična Gram-Schmidtova ortogonalizacija

Ulaz: n = broj vektora
$a_1, a_2, \ldots, a_n$ linearno nezavisni vektori
Izlaz: $a_1, a_2, \ldots, a_n$ ortonormirani vektori
for $j = 1, 2, \ldots, n$, **do**
  $v = a_j$
  for $i = 1, 2, \ldots, j-1$, **do**
    $r = \langle a_i, v\rangle$
    $a_j = a_j - \langle r, a_i\rangle$
  end
  $r = \|a_j\|$
  $a_j = a_j / r$
end

Algoritam je prirodno formirati tako da radi na ulaznom skupu vektora koje pretvara u ortonormirane. Algoritam 1 se ne koristi u praksi budući je numerički nestabilan. Stabilnost algoritma može se poboljšati ako se odmah nakon formiranja vektora q_i eliminira komponenta u njegovom smjeru u svim vektorima $a_{i+1}, \ldots, a_n$. U slučaju četiri vektora to bi funkcioniralo na sljedeći način:

$$
\begin{aligned}
q_1 &= \frac{a_1}{\|a_1\|}; \\
a_2' &= a_2 - \langle q_1, a_2 \rangle \cdot q_1; \\
a_3' &= a_3 - \langle q_1, a_3 \rangle \cdot q_1; \\
a_4' &= a_4 - \langle q_1, a_4 \rangle \cdot q_1.
\end{aligned}
$$

Sada možemo izračunati

$$q_2 = \frac{a_2'}{\|a_2'\|},$$

te

$$
\begin{aligned}
a_3'' &= a_3' - \langle q_2, a_3' \rangle \cdot q_2; \\
a_4'' &= a_4' - \langle q_2, a_4' \rangle \cdot q_2.
\end{aligned}
$$

Sada je

$$q_3 = \frac{a_3''}{\|a_3''\|},$$

i konačno

$$
\begin{aligned}
a_4''' &= a_4'' - \langle q_3, a_4'' \rangle \cdot q_3 \\
q_4 &= \frac{a_4''}{\|a_4''\|}.
\end{aligned}
$$

Algoritam 2: Modificirana Gram-Schmidtova ortogonalizacija

Ulaz: n = broj vektora
$a_1, a_2, \ldots, a_n$ linearno nezavisni vektori
Izlaz: $a_1, a_2, \ldots, a_n$ ortonormirani vektori

for $i = 1, 2, \ldots, n$, **do**
  $r = \|a_i\|$
  $a_i = a_i / r$
  for $j = i + 1, \ldots, n$, **do**
    $r = \langle a_j, a_i \rangle$
    $a_j = a_j - \langle r, a_i \rangle$
  end
end

2.3 QR dekompozicija

U ovom poglavlju pojasnit ćemo kako pomoću Gram-Schmidtova postupka ortogonalizacije možemo načiniti QR dekompoziciju matrice. Iskazat ćemo i dokazati teorem vezan za ovo poglavlje. Također ćemo pomoću Gram-Schmidtova postupka ortogonalizacije na danom primjeru odrediti QR dekompoziciju matrice. Svi pojmovi i teoremi korišteni u ovom poglavlju preuzeti su iz [6].

Skup vektora pamtit ćemo u obliku matrice. Ako su $a_1, a_2, \ldots, a_n$ vektori u $\mathcal{M}_{m1}$ onda ih smještamo u stupce matrice A tipa $m \times n$. Ako je skup vektora linearno nezavisan, onda je nužno $m \geqslant n$ pa imamo pravokutnu matricu koja ima više redaka nego stupaca. Na isti način poredamo ortonormirane vektore q_i, dobivene Gram-Schmidtovim postupkom ortogonalizacije, u stupce matrice koju ćemo nazvati Q, tipa $m \times n$. Uvedimo oznake

$$r_{ij} = \langle q_i, a_j \rangle, \quad \text{za} \quad i \leq j.$$

Vidimo da formule Gram-Schmidtove ortogonalizacije mogu biti zapisane u obliku

$$\begin{aligned}
a_1 &= r_{11} \cdot q_1; \\
a_2 &= r_{12} \cdot q_1 + r_{22} \cdot q_2; \\
a_3 &= r_{13} \cdot q_1 + r_{23} \cdot q_2 + r_{33} \cdot q_3; \\
&\cdots \\
a_n &= r_{1n} \cdot q_1 + r_{2n} \cdot q_2 + \cdots + r_{nn} \cdot q_n.
\end{aligned}$$

što dovodi do sljedećeg oblika matrica

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{3n} \\ a_{41} & a_{42} & \cdots & a_{4n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2n} \\ q_{31} & q_{32} & \cdots & q_{3n} \\ q_{41} & q_{42} & \cdots & q_{4n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{m1} & q_{m2} & \cdots & q_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{bmatrix}$$

gdje su a_i i q_i i-ti stupci matrica A i Q.

Faktorizacija matrice A tipa $m \times n, \quad m \geq n$, oblika $A = QR$ gdje je Q matrica tipa $m \times n$ s ortonormiranim stupcima, a R gornja trokutasta matrica tipa $n \times n$, naziva se reducirana QR faktorizacija matrice A. Potpuna QR faktorizacija matrice A je faktorizacija oblika $A = QR$ gdje je Q matrica tipa $m \times m$ s ortonormiranim stupcima, a R gornja trokutasta matrica tipa $m \times n$. Potpuna QR faktorizacija se dobiva iz reducirane QR faktorizacije tako da se matrici Q doda $m - n$ ortonormiranih stupaca koji s ostalim stupcima čine ortonormiranu bazu u $A \in \mathcal{M}_{mn}$, a matrici R se dodaju nul-reci kako bi se dopunila do matrice tipa $m \times n$.

Teorem 2.3.1. Svaka matrica $A \in \mathcal{M}_{mn}(\mathbb{R})$ ili $A \in \mathcal{M}_{mn}(\mathbb{C})$, gdje je $m \geqslant n$, ima QR faktorizaciju.

Dokaz. Ako je matrica punog ranga, onda je egzistencija faktorizacije dana Gram-Schmidtovom ortogonalizacijom. Ako matrica nije punog ranga, onda je moguće u tijeku ortogonalizacije dobiti nul vektor. U tom je slučaju dovoljno nul vektor zamijeniti s bilo kojim ortonormiranim vektorom, ortogonalnim na prethodno generirane vektore. $\square$

Primjer 2.3.1. Neka su dane točke $T_1 = (3, -3)$, $T_2 = (-1, 2)$, $T_3 = (2, -3)$, $T_4 = (1, -5)$, $T_5 = (1, 1)$. Trebamo pronaći funkciju $f(x) = ax^2 + bx$ tako da njezin graf prolazi što bliže točkama $T_i, i = 1, \ldots, 4$. (u smislu najmanjih kvadrata).

Naša model funkcija je oblika $f(x) = ax^2 + bx$. Trebamo odrediti koeficijente a i b. Nakon uvrštavanja danih podataka slijedi

$$\begin{aligned} f(3) &= 9a + 3b = -3 \\ f(-1) &= a - b = 2 \\ f(2) &= 4a + 2b = -3 \\ f(1) &= a + b = -5 \\ f(1) &= a + b = 1. \end{aligned}$$

Potrebno je riješiti sustav

$$\begin{bmatrix} 9 & 3 \\ 1 & -1 \\ 4 & 2 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 2 \\ -3 \\ -5 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Zbog jednostavnosti uvest ćemo sljedeće oznake

$$A = \begin{bmatrix} 9 & 3 \\ 1 & -1 \\ 4 & 2 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix},$$

$$z = \begin{bmatrix} -3 \\ 2 \\ -3 \\ -5 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$v = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}.$$

Odredimo prvo QR dekompoziciju matrice A pomoću Gram-Schmidtova postupka ortogonalizacije. Iz matrice A vidimo da je

$$a_1 = \begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{i} \quad r_{11} = \|a_1\| = 10.$$

Slijedi da je

$$q_1 = \frac{a_1}{\|a_1\|} = \frac{1}{10}\begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Dalje,

$$\overline{a_2} = a_2 - \langle q_1, a_2 \rangle \cdot q_1 = \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \\ 2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{18}{5} \cdot \frac{1}{10}\begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 4 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{25}\begin{bmatrix} -6 \\ -34 \\ 14 \\ 16 \end{bmatrix}.$$

Iz ovog računa slijedi da je

$$r_{12} = \langle q_1, a_2 \rangle = \frac{18}{5}$$

i

$$r_{22} = \|\overline{a_2}\| = \frac{2\sqrt{19}}{5}.$$

Pa je

$$q_2 = \frac{\overline{a_2}}{\|\overline{a_2}\|} = \frac{1}{95}\begin{bmatrix} -3\sqrt{19} \\ -17\sqrt{19} \\ 7\sqrt{19} \\ 8\sqrt{19} \\ 8\sqrt{19} \end{bmatrix}.$$

Tražene matrice Q i R su sljedećeg oblika

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{9}{10} & \frac{-3\sqrt{19}}{95} \\ \frac{1}{10} & \frac{-17\sqrt{19}}{95} \\ \frac{4}{10} & \frac{7\sqrt{19}}{95} \\ \frac{1}{10} & \frac{8\sqrt{19}}{95} \\ \frac{1}{10} & \frac{8\sqrt{19}}{95} \end{bmatrix}$$

$$R = \begin{bmatrix} 10 & \frac{18}{5} \\ 0 & \frac{2\sqrt{19}}{5} \end{bmatrix}.$$

Odredimo sada Q^T i $Q^T z$.

$$Q^T = \begin{bmatrix} \frac{9}{10} & \frac{1}{10} & \frac{4}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{10} \\ \frac{-3\sqrt{19}}{95} & \frac{-17\sqrt{19}}{95} & \frac{7\sqrt{19}}{95} & \frac{8\sqrt{19}}{95} & \frac{8\sqrt{19}}{95} \end{bmatrix}.$$

$$Q^T z = \begin{bmatrix} \frac{-41}{10} \\ \frac{-78}{5\sqrt{19}} \end{bmatrix}.$$

Riješimo sada sustav

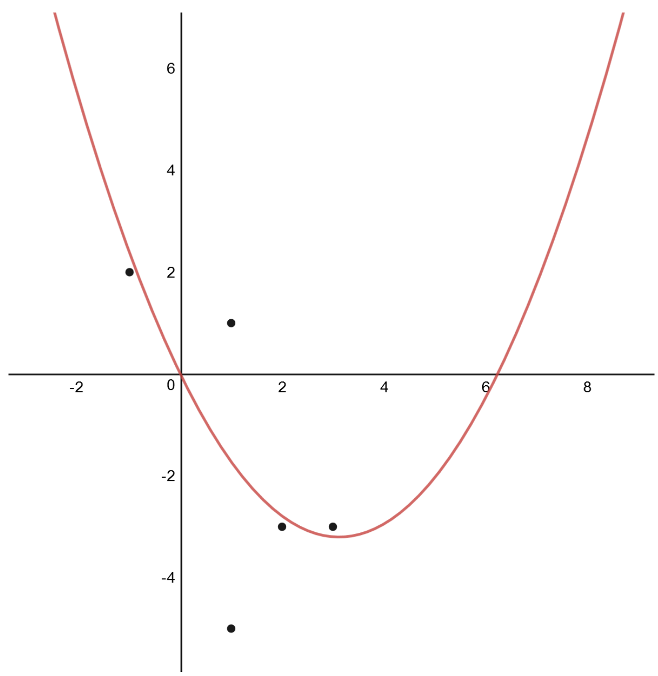
$$Rv = Q^T z$$

$$\begin{bmatrix} 10 & \frac{18}{5} \\ 0 & \frac{2\sqrt{19}}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{-41}{10} \\ \frac{-78}{5\sqrt{19}} \end{bmatrix}.$$

Rješenje sustava je

$$v = \begin{bmatrix} \frac{25}{76} \\ \frac{-39}{19} \end{bmatrix}.$$

Funkcija čiji graf prolazi što bliže zadanim točkama je funkcija oblika $f(x) = \frac{25}{76}x^2 - \frac{39}{19}x$. Na sljedećoj slici prikazani su dani podatci i dobivena funkcija.



3 QR dekompozicija koristeći Householderove transformacije

Kako Gram-Schmidtov postupak ortogonalizacije nije numerički stabilan američki matematičar Alston Scott Householder predložio je drugačiji način transformacije matrice. Predložio je da se matrica transformira u gornje trokutastu uz pomoć unitarnih transformacija koji su primjenjeni na stupce matrice A. U ovom poglavlju pojasnit ćemo pojam Householderovih matrica (reflektora) te navesti neka njihova svojstva. Također ćemo pomoću Householderovih transformacija na danom primjeru odrediti QR dekompoziciju matrice. Osnovne definicije, izvodi i primjeri preuzeti su iz [7] i [9].

3.1 Householderove matrice (Householderovi reflektori)

Neka je

$$H = H(u) := I - 2uu^T, \quad u^T u = 1, \quad u \in \mathcal{M}_{m1}, \quad H \in \mathcal{M}_m. \tag{1}$$

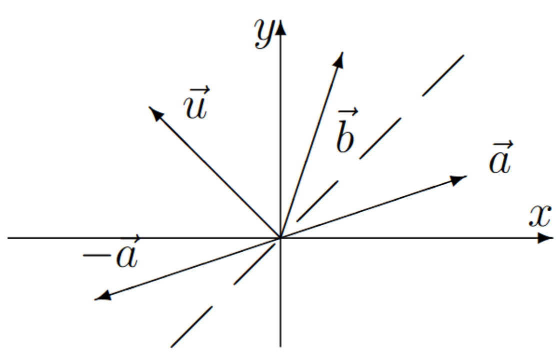
Matricu H iz (1) zovemo Householderova matrica. Također, vektor u iz (1) nazivamo Householderov vektor. Očigledno je da je Householderova matrica simetrična, tj. da vrijedi $H = H^T$. Nadalje, vrijedi

$$HH^T = (I - 2uu^T)(I - 2uu^T) = I - 4uu^T + 4u(u^T u)u^T = I.$$

Time smo pokazali da vrijedi

$$H^T H = HH^T = I,$$

što pokazuje da je matrica H ortogonalna.



Slika 1: Householderov vektor

Primjedba 3.1.1. Pogledajmo Sliku 1. Vidimo da su vektori a i b osno simetrični obzirom na pravac koji prolazi kroz ishodište. Taj pravac je okomit na vektor u. Zaključujemo da Householderova matrica u geometrijskom smislu zapravo predstavlja zrcaljenje ili rotaciju prostora.

Sljedeća lema nam daje jedno od najvažnijih svojstava Householderovih matrica.

Lema 3.1.2. Za dva vektora a i b jednake euklidske norme postoji Householderov vektor u, tako da je $Ha = b$, odnosno, zbog simetričnosti matrice H, $Hb = a$.

Dokaz. Ako je $a = b$, onda je $H = I$. Pretpostavimo zato da su a i b dva vektora takva da je

$$a \neq b \quad \& \quad \|a\| = \|b\|.$$

Ovo također znači da vektori a i b ne mogu biti nulvektori. Također, zbog $a \neq b$ slijedi da je $\|a - b\| > 0$. Zato možemo definirati Householderov vektor

$$u = \frac{1}{\|a-b\|}(a-b).$$

Kako je

$$a - Hb = (a-b) + 2\frac{a-b}{\|a-b\|}\frac{(a-b)^T}{\|a-b\|}b = \frac{a-b}{\|a-b\|^2}(\|a-b\|^2 + 2(a-b)^T b),$$

onda zbog

$$\|a-b\|^2 + 2(a-b)^T b = a^T a - 2a^T b + b^T b + 2a^T b - 2b^T b = a^T a - b^T b,$$

vrijedi $Hb = a$. $\square$

Primjer 3.1.3. Neka su dani vektori $a = \begin{bmatrix} \frac{9}{2} \\ 1 \end{bmatrix}$ i $b = \begin{bmatrix} 3 \\ \frac{7}{2} \end{bmatrix}$. Pogledajmo kako izgleda Householderova matrica.

Znamo da za Householderov vektor vrijedi

$$u = \frac{(a-b)}{\|a-b\|}.$$

Nakon uvrštavanja danih vektora dobivamo

$$u = \frac{2}{\sqrt{34}} \begin{bmatrix} \frac{3}{2} \\ -\frac{5}{2} \end{bmatrix}$$

Householderova matrica glasi

$$H = I - 2uu^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{4}{17} \begin{bmatrix} \frac{3}{2} \\ -\frac{5}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{3}{2} & -\frac{5}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{8}{17} & \frac{15}{17} \\ \frac{15}{17} & -\frac{8}{17} \end{bmatrix}$$

Napomena. Householderovu matricu H možemo na jednostavan način množiti sa nekim vektorom y. Dakle, vektor Hy možemo izračunati kao

$$Hy = (I - 2uu^T)y = y - 2(u^T y)u.$$

3.2 Householderova QR dekompozicija

Kako nam je osnovni cilj transformirati matricu A na gornjetrokutasti oblik, njene stupce ćemo promatrati kao vektore u $\mathcal{M}_{m1}$. Neka je $a \in \mathcal{M}_{m1}$ i neka je barem jedna od komponenti $a_k, \cdots, a_m$ vektora a različita od nule za $k \geq 1$. Householderovu matricu H konstruirat ćemo tako da se prvih $k-1$ komponenti vektora $b := Ha$ i vektora a podudara, a da se posljednjih $m-k$ komponenti vektora b poništi. Odnosno,

$$(Ha)_i = b_i = \begin{cases} a_i, & \text{za } i = 1, \dots, k-1 \\ \pm\gamma, & \text{za } i = k, \\ 0 & \text{za } i = k+1, \dots, m \end{cases}, \quad \gamma = \sqrt{a_k^2 + \cdots + a_m^2}.$$

Predznak $(\pm\gamma)$ biramo tako da je suprotan predznaku od a_k pa je stoga $b_k = -\text{sgn}(a_k)\gamma$. [1] Vrijedi da je $|a_k| = a_k \text{sgn}(a_k)$. Pogledajmo sada koji je oblik vektora u.

$$\begin{aligned} \|a-b\|^2 &= (a_k + \text{sgn}(a_k)\gamma)^2 + a_{k+1}^2 + \cdots + a_m^2 \\ &= a_k^2 + 2\gamma a_k \text{sgn}(a_k) + \gamma^2 + a_{k+1}^2 + \ldots + a_m^2 = 2\gamma(\gamma + |a_k|). \end{aligned}$$

Dakle, slijedi da vektor u ima oblik

$$u = \frac{a-b}{\|a-b\|} = \frac{1}{\sqrt{2\gamma(\gamma + |a_k|)}} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ a_k + \text{sgn}(a_k)\gamma \\ a_{k+1} \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix}.$$

Primjer 3.2.1. Primjenom Householderovih transformacija izračunat ćemo QR faktorizaciju sljedeće matrice

$$A = \begin{bmatrix} 10 & 9 & 18 \\ 20 & -15 & -15 \\ 20 & -12 & 51 \end{bmatrix}.$$

1. Prvo ćemo staviti da je $k = 1$ i $a = \begin{bmatrix} 10 \\ 20 \\ 20 \end{bmatrix}$. Slijedi da je $\gamma = \sqrt{10^2 + 20^2 + 20^2} = 30$

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{60(30+10)}} \begin{bmatrix} 10+30 \\ 20 \\ 20 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

[1]

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} +1 & \text{ako je } x \geq 0 \\ -1, & \text{ako je } x < 0 \end{cases}$$

Dobivamo

$$H_1 = -\frac{1}{3}\begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & 1 \\ 2 & 1 & -2 \end{bmatrix}.$$

Odakle slijedi da je

$$A_1 := H_1 A = \begin{bmatrix} -30 & 15 & -30 \\ 0 & -12 & -39 \\ 0 & -9 & 27 \end{bmatrix}.$$

2. Sada ćemo staviti da je $k = 2$ i $a = \begin{bmatrix} 15 \\ -12 \\ -9 \end{bmatrix}$. Slijedi da je $\gamma = \sqrt{(-12)^2 + 9^2} = 15$

$$u_2 = \frac{1}{\sqrt{30(15+12)}}\begin{bmatrix} 0 \\ -12-15 \\ -9 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{10}}\begin{bmatrix} 0 \\ -3 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Dobivamo

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.8 & -0.6 \\ 0 & -0.6 & 0.8 \end{bmatrix}.$$

Odakle slijedi da je

$$A_2 := H_2 A_1 = \begin{bmatrix} -30 & 15 & -30 \\ 0 & 15 & 15 \\ 0 & 0 & 45 \end{bmatrix}.$$

Uočimo da vrijedi $A_2 = H_2 A_1 = H_2 H_1 A$. Dobivamo da je

$$Q = H_1 H_2 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3} & \frac{14}{15} & -\frac{2}{15} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{2}{15} & \frac{11}{15} \end{bmatrix}.$$

$$R = A_2 = \begin{bmatrix} -30 & 15 & -30 \\ 0 & 15 & 15 \\ 0 & 0 & 45 \end{bmatrix}.$$

4 QR dekompozicija koristeći Givensove rotacije

U ovom poglavlju najprije ćemo uvesti pojam matrice rotacije te pojam Givensovih rotacija. Nakon toga ćemo opisati postupak određivanja QR dekompozicije pomoću istih i postupak pokazati na primjeru. Svi pojmovi, definicije i primjeri potrebni za razumijevanje ovog poglavlja preuzeti su iz [8].

4.1 Matrice rotacije

Matrica $A \in \mathcal{M}_2$ je matrica rotacije u ravnini ako vrijedi

$$A = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix},$$

gdje je gdje je φ kut rotacije suprotan smjeru rotacije kazaljke na satu.

Za matricu rotacije $A \in \mathcal{M}_2$ vrijedi:

1. Matrica A je regularna.

$$\det A = \begin{vmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{vmatrix} = \cos^2\varphi + \sin^2\varphi = 1 \neq 0$$

2. Matrica A je ortogonalna, tj.vrijedi $A^{-1} = A^T$

$$A^{-1}A^T = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = A^T A^{-1}$$

3. Matrica A čuva euklidsku normu vektora.
Neka je $x = [x_1 \quad x_2]^T \in \mathcal{M}_{21}$, tada je euklidska norma dana s $\|x\| = \sqrt{{x_1}^2 + {x_2}^2}$. Naime, djelovanjem matrice A na vektor x dobivamo vektor

$$Ax = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1\cos\varphi - x_2\sin\varphi \\ x_1\sin\varphi + x_2\cos\varphi \end{bmatrix},$$

te vrijedi:

$$\begin{aligned} \|Ax\|^2 &= (x_1\cos\varphi - x_2\sin\varphi)^2 + (x_1\sin\varphi + x_2\cos\varphi)^2 \\ &= x_1^2\cos^2\varphi - 2x_1x_2\cos\varphi\sin\varphi + x_2^2\sin^2\varphi + x_1^2\sin^2\varphi + 2x_1x_2\sin\varphi\cos\varphi + x_2^2\cos^2\varphi \\ &= x_1^2(\cos^2\varphi + \sin^2\varphi) + x_2^2(\cos^2\varphi + \sin^2\varphi) \\ &= x_1^2 + x_2^2 = \|x\|^2 \end{aligned}$$

4. Produkt matrica rotacija je opet matrica rotacije.
Neka su $A, B \in \mathcal{M}_2$ matrice rotacije za kut φ i ψ. Njihov produkt je matrica rotacije za

kut $\varphi + \psi$.

$$\begin{aligned} AB &= \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\psi & -\sin\psi \\ \sin\psi & \cos\psi \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos\varphi\cos\psi - \sin\varphi\sin\psi & -\cos\varphi\sin\psi - \sin\varphi\cos\psi \\ \sin\varphi\cos\psi + \cos\varphi\sin\psi & -\sin\varphi\sin\psi + \cos\varphi\cos\psi \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\varphi+\psi) & -\sin(\varphi+\psi) \\ \sin(\varphi+\psi) & \cos(\varphi+\psi) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Jednako tako možemo pokazati da je matrica $M(i,k,\varphi) \in \mathcal{M}_n$ matrica rotacije za kut φ (u ravnini određenoj i-tim i k-tim vektorima) ukoliko je zadana na sljedeći način:

$$M(i,k,\varphi) = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \cos\varphi & \dots & -\sin\varphi & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \sin\varphi & \dots & \cos\varphi & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix},$$

pri čemu se podmatrica $\begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix}$ nalazi na presjeku i-tog i k-tog retka odnosno stupca. Za ovako zadanu matricu vrijede ista svojstva kao i za matrice rotacije iz $\mathcal{M}_2$.

4.2 Givensove rotacije

Givensove rotacije $G \in \mathcal{M}_2$ su matrice rotacije koje rotiraju vektore u ravnini tako da drugu komponentu ponište ili postave na nulu, tj. ako imamo vektor $x = [x_1 \quad x_2]^T \in \mathcal{M}_{21}$ matrica G će na njega djelovati na sljedeći način:

$$Gx = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Iz sustava određujemo koliki su $\sin\varphi$ i $\cos\varphi$.

$$\begin{aligned} x_1\cos\varphi - x_2\sin\varphi &= y_1 \\ x_1\sin\varphi + x_2\cos\varphi &= 0 \end{aligned} \tag{2}$$

Iz (2) slijedi da je u slučaju kada je $x_2 = 0$ matrica G jednaka jediničnoj matrici I, inače imamo da je

$$x_2\cos\varphi = -x_1\sin\varphi \tag{3}$$

i iskoristimo li $\sin^2\varphi + \cos^2\varphi = 1$ slijedi:

$$x_2\cos\varphi = -x_1\sin\varphi = -x_1\sqrt{1-\cos^2\varphi}.$$

Kvadriranjem dobivamo:

$$\begin{aligned} x_2^2 \cos^2 \varphi &= x_1^2 - x_1^2 \cos^2 \varphi \\ x_1^2 &= (x_1^2 + x_2^2) \cos^2 \varphi, \end{aligned}$$

te za $x_1^2 + x_2^2 \neq 0$, tj. $\|x\| \neq 0$ vrijedi

$$\cos^2 \varphi = \frac{x_1^2}{x_1^2 + x_2^2}, \text{tj.} \cos \varphi = \frac{\pm x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}$$

Ukoliko želimo da y_1 bude pozitivan uzmemo da je

$$\cos \varphi = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}},$$

a tada iz (3)

$$\sin \varphi = \frac{-x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}, \quad \text{tj.} \quad y_1 = \frac{x_1^2 + x_2^2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}$$

i dobivamo vektor $y = [y_1 \quad 0]^T$. Jednako tako i za matrice iz $\mathcal{M}_n$ možemo konstruirati Givensove rotacije. To bi bile matrice oblika

$$G(i,k,\varphi) = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \cos\varphi & \dots & -\sin\varphi & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \sin\varphi & \dots & \cos\varphi & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix},$$

pri čemu se podmatrica $\begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix}$ nalazi na presjeku i-tog i k-tog retka odnosno stupca, a ostali dijagonalni elementi su jednaki 1, a preostali elementi izvan dijagonale su jednaki 0. Vrijednosti $\sin\varphi$ i $\cos\varphi$ računaju se na prethodno opisan način, tj. za $x \in \mathcal{M}_{n1}$

$$\cos \varphi = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_k^2}}, \quad \sin \varphi = \frac{-x_k}{\sqrt{x_i^2 + x_k^2}}.$$

Tada djelovanjem Givensove rotacije $G \in \mathcal{M}_n$ na vektor x dobivamo vektor $y \in \mathcal{M}_{n1}$ oblika:

$$y_j = \begin{cases} x_j, & \text{za } j \neq i, j \neq k \\ 0, & \text{za } j = k, \\ \dfrac{{x_i}^2 + {x_k}^2}{\sqrt{{x_i}^2 + {x_k}^2}}, & \text{za } j = i \end{cases}$$

odnosno poništavamo k-tu komponentu vektora x, i-tu mijenjamo dok ostale komponente ostaju nepromijenjene.

4.3 Određivanje QR dekompozicije koristeći Givensove rotacije

Neka je $A \in \mathcal{M}_{mn}$, gdje je $m \geq n$. Pomoću Givensovih rotacija odredimo QR rastav matrice, odnosno odredimo ortogonalnu matricu $Q \in \mathcal{M}_m$ i gornje trokutastu $R \in \mathcal{M}_{mn}$ tako da vrijedi $A = QR$.

Kako Givensove rotacije poništavaju samo jedan element u matrici koju množimo mi ćemo s $G_l(i, k, \varphi) \in \mathcal{M}_m$ označiti matricu koja poništava element a_{kl} (element u k-tom retku i l-tom stupcu), a kut φ izračunava za zadane a_{il} i a_{kl}. Poništavanje će se vršiti po sljedećem algoritmu:

Algoritam 3: QR dekompozicija pomoću Givensovih rotacija

Ulaz: $A \in \mathcal{M}_{mn}$
Izlaz: $R \in \mathcal{M}_{mn}$ gornje trokutasta, $Q \in \mathcal{M}_m$ ortogonalna

```
R = A, Q = I
for l = 1, ..., n do
    for i = m, ..., l + 1 do
        izračunati kut φ (tj. elemente Givensove rotacije G_l(i − 1, i, φ))
        R = G_l(i − 1, i, φ)R (poništava element a_il)
        Q = Q G_l(i − 1, i, φ)^T
    end
end
```

Primjer 4.3.1. Koristeći se prethodnim algoritmom izračunat ćemo QR faktorizaciju sljedeće matrice

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Prvo ćemo izračunati Givensovu rotaciju, koja kada se primjeni poništi element a_{31} pomoću matrice $G_1(2, 3, \varphi_1)$, koja glasi

$$G_1(2, 3, \varphi_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.4472 & -0.8944 \\ 0 & 0.8944 & -0.4472 \end{bmatrix}.$$

Množenjem matrice A i $G_1(2, 3, \varphi_1)$ dobivamo

$$A_1 = G_1(2, 3, \varphi_1)A = \begin{bmatrix} -2.0000 & 1.0000 \\ -2.2361 & -1.3416 \\ 0 & 0.4472 \end{bmatrix}.$$

Zatim želimo poništiti element a_{21} pomoću matrice

$$G_1(1, 2, \varphi_2) = \begin{bmatrix} -0.6667 & -0.7454 & 0 \\ 0.7454 & -0.6667 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

te dobivamo

$$A_2 = G_1(1,2,\varphi_2)G_1(2,3,\varphi_1)A = \begin{bmatrix} 3.0000 & 0.3333 \\ 0 & -1.6398 \\ 0 & 0.4472 \end{bmatrix}.$$

Ostalo nam je još poništiti element a_{32}. Za poništavanje ćemo koristiti matricu

$$G_2(2,3,\varphi_3) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.9648 & 0.2631 \\ 0 & -0.2631 & 0.9648 \end{bmatrix},$$

te dobivamo

$$R = G_2(2,3,\varphi_3)G_1(1,2,\varphi_2)G_1(2,3,\varphi_1)A = \begin{bmatrix} 3.0000 & 0.3333 \\ 0 & 1.6997 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Tada je matrica Q iz QR dekompozicije jednaka

$$Q = G_1(2,3,\varphi_3)^T G_1(1,2,\varphi_2)^T G_2(2,3,\varphi_1)^T = \begin{bmatrix} -0.6667 & 0.71916192 & -0.1961147 \\ 0.33334288 & 0.522970062 & 0.7844743181 \\ 0.66668576 & 0.4576485239 & -0.5883441639 \end{bmatrix}.$$

Literatura

[1] Damir Bakić, *Linearna algebra*, Školska knjiga, Zagreb, 2008.

[2] J. W. Demmel, *Applied Numerical Linear Algebra*, SIAM, 1997.

[3] Z. Drmač, V. Hari, M. Marušić, M. Rogina, S. Singer, S. Singer, *Numerička analiza*, Zagreb, 2003.

[4] Walter Gander, *Algorithms for the QR-Decomposition*, Research report No. 80-02, 1980.

[5] Elias Jarlebring, *QR algorithm*, Lecture notes in numerical linear algebra, 2014.

[6] Mladen Jurak, *Ortogonalizacija*, Radna verzija, Prirodoslovno - matematički fakultet Zagreb, 2007.

[7] Rudolf Scitovski, *Numerička matematika*, Sveučilište u Osijeku, Odjel za matematiku, 2015.

[8] Zoran Tomljanović, Matea Ugrica, *QR dekompozicija koristeći Givensove rotacije i primjene*, Osječki matematički list 14 (2014), 117-141.

[9] Ninoslav Truhar, *Numerička linearna algebra*, Sveučilište u Osijeku, Odjel za matematiku, 2010.