Téma 2: Ortogonální transformace

motivace: při řešení úloh je výhodné problém transformovat, aby jeho řešení bylo jednodušší

př. (GE): $Ax = b \xrightarrow[A=LU]{\text{implicitně}} Ux = L^{-1}b$

Jaké transformace je vhodné používat?

citlivost řešení lin. alg. rnic na chyby v b:

$Ax = b$ .. přesná úloha – v praxi nemáme

→ uvažujme, že v b je kontaminováno perturbací (malou) Δb

→ jak se může změnit řešení úlohy?

ozn.: $\boxed{A(x+\Delta x) = b + \Delta b}$ perturbace měření

chyba řešení způsobená perturbací

Věta: $\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \cdot \varkappa(A)$, kde $\varkappa(A) \equiv \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ je číslo podmíněnosti matice A.

D: $\left.\begin{array}{l} \|\Delta x\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta b\| \\ \|b\| \leq \|A\| \cdot \|x\| \end{array}\right\} \Rightarrow \frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \cdot \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$ □

platí: 1, $\varkappa(A) \geq 1 \quad \forall A \in \mathbb{C}^{n \times n}$

D: triv. 2, $\varkappa(A) = 1 \iff A$ – unitární

- při velké $\varkappa(A)$ může i malá perturbace v b způsobit velkou chybu v x

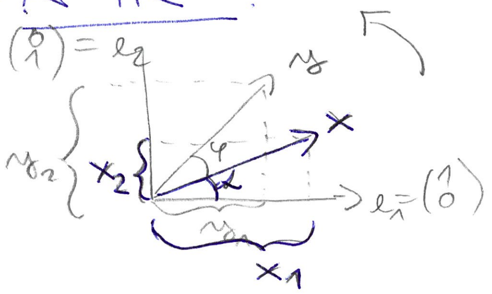
př. (GE): $\varkappa(U) = \varkappa(L^{-1}A) \neq \varkappa(A)$

← může být větší

⇒ chci transformace, které nemění vzdálenosti v prostoru, normy, podmíněnosti matic, ... ⇒ UNITÁRNÍ ≡ ~~v $\mathbb{R}^n$~~ ORTOGONÁLNÍ

2.1 Givensovy rotace v $\mathbb{R}$

• v $\mathbb{R}^2$:



$G(\varphi) \in \mathbb{R}^{2\times 2}$: chci $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ otočit o $\measuredangle \varphi$ na $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$, kde $\|x\| = \|y\|$

polární souřadnice:

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \|x\| \cdot \begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \|x\| \cdot \begin{pmatrix} \overset{\cos\varphi\cos\alpha - \sin\varphi\sin\alpha}{\cos(\varphi+\alpha)} \\ \underset{\sin\varphi\cos\alpha + \cos\varphi\sin\alpha}{\sin(\varphi+\alpha)} \end{pmatrix} = \|x\| \cdot \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} x \equiv G(\varphi) \cdot x$$

def: Matici $G(\varphi)$ realizující otočení (rotaci) vektoru o $\measuredangle \varphi$ nazveme elementární Givensovou rotací v $\mathbb{R}^2$.

• v $\mathbb{R}^n$: $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_j \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ \text{– i-tá pozice} \\ \\ \text{– j-tá pozice} \\ \\ \\ \end{array}$ ... otočení provedeme jen v rovině $\{e_i, e_j\}$

def: Matice elementární Giv. rotace, která otočí lib. vektor $x \in \mathbb{R}^n$ v rovině $\{e_i, e_j\}$, $i<j$, o $\measuredangle \varphi$ směrem od e_i k e_j je tvaru

$$G_{ij}(\varphi) = \begin{array}{c} \\ i \\ \\ j \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} & i & & j & \end{array} \\ \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \cos\varphi & & -\sin\varphi & \\ & & 1 & & \\ & \sin\varphi & & \cos\varphi & \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \end{array} \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$

vlastnosti:

- matice $G_{ij}(-\varphi) = G_{ij}^T(\varphi)$ otáčí zpět o ∡ $-\varphi$

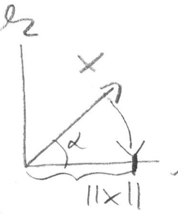
  $\Rightarrow G_{ij}(\varphi)^T \cdot G_{ij}(\varphi) = G_{ij}(\varphi) \cdot G_{ij}^T(\varphi) = I$

  $\Rightarrow$ matice el. Giv. rotace je ortonormální
- $\det(G_{ij}(\varphi)) = 1$ (D: $\det(G_{ij}) = \sin^2\varphi + \cos^2\varphi = 1$)
- násobení $G_{ij}(\varphi)x$ mění jen 2 složky x

  $\Rightarrow$ výpočetně nenáročné

jak vynulovat prvky x:

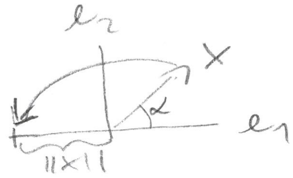
- $\mathbb{R}^2$: $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \xrightarrow{G(\varphi)} y = \begin{pmatrix} \pm\|x\| \\ 0 \end{pmatrix}$ ← zachovává normu



  ⊕ $\varphi := -\alpha \Rightarrow G(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} = \frac{1}{\|x\|}\begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ -x_2 & x_1 \end{pmatrix}$

  potom $G(\varphi)x = \begin{pmatrix} \|x\| \\ 0 \end{pmatrix}$

  ⊖ $\varphi := \pi - \alpha$, analogicky



- $\mathbb{R}^n$: $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \longrightarrow y = \begin{pmatrix} \pm\|x\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ ... obecně potřebuji $(n-1)$ el. rotací

postup:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \xrightarrow[\substack{c_1 = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_n^2}} \\ s_1 = \frac{x_n}{\sqrt{x_1^2 + x_n^2}}}]{G_{1,n} = \begin{bmatrix} c_1 & & -s_1 \\ & I & \\ s_1 & & c_1 \end{bmatrix}} \begin{bmatrix} \overbrace{\sqrt{x_1^2 + x_n^2}}^{=\tilde{x}_1} \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ 0 \end{bmatrix} \xrightarrow[\substack{c_2 = \frac{\tilde{x}_1}{\sqrt{\tilde{x}_1^2 + x_{n-1}^2}} \\ s_2 = \frac{x_{n-1}}{\sqrt{\tilde{x}_1^2 + x_{n-1}^2}}}]{G_{1,n-1} = \begin{bmatrix} c_2 & & -s_2 & 0 \\ & I & & \\ s_2 & & c_2 & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}} \cdots \longrightarrow \begin{bmatrix} \|x\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \underbrace{G_{12} \cdots G_{1,n-1} G_{1,n}}_{= \Gamma} x$$

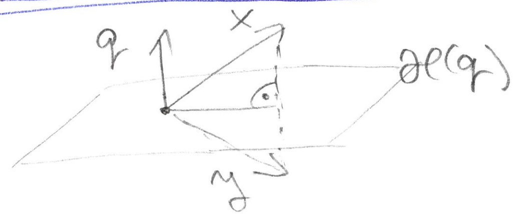
Γ ... složená Giv. rotace, je ortogonální

pozn: Γ není určena jednoznačně, můžu nulovat v jiném pořadí

vlastnosti:

- paměť – ukládám jen c_i, s_i, Γ nekonstruujeme
- výp. náklady – $O(n)$

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



$x, y \in \mathbb{R}^n$, $\|x\| = \|y\|$

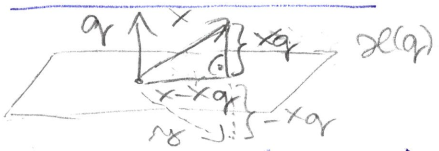
Chci najít nadrovinu zrcadlení $\underline{x}$ na $\underline{y}$.

$\mathcal{H}(q) := \{z \in \mathbb{R}^n : z \perp q\}$, kde $q \in \mathbb{R}^n$, $\|q\| = 1$

… nadrovina zrcadlení daná normálovým vektorem q, $q = \frac{x-y}{\|x-y\|}$

OG projekce na span $\{q\}$!

rozklad x: $x = \underbrace{(qq^T)x}_{=: x_q \parallel q} + \underbrace{(x - qq^T x)}_{=: (x - x_q) \perp q} \Rightarrow$

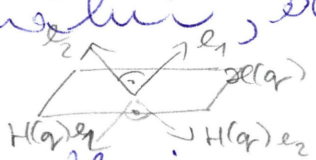


$$\Rightarrow y = (x - x_q) - x_q = x - 2x_q = (I - 2qq^T)x$$

def: Nechť $q \in \mathbb{R}^n$, $\|q\| = 1$. Pak matici $H(q) = (I - 2qq^T) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ nazveme maticí Householderovy reflexe (zrcadlení) vzhledem k $\mathcal{H}(q)$.

vlastnosti:

- $H(q)$ je ortonormální, symetrická
- $\det(H(q)) = -1$



zrcadlí souřadný systém!

- $H(q)^{-1} = H(q)$ … reflexi $\underline{y}$ na $\underline{x}$ realizuje stejná nadrovina

použití k nulování prvků x:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \xrightarrow{H(q)} y = \begin{bmatrix} \mp\|x\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \oplus \ominus \quad q := \frac{x \pm \|x\| e_1}{\| \quad \|}$$

pozn: je-li $\|x\| \sim x_1$ a $x_1 > 0$, pak výpočet $(x - \|x\| e_1)$ může vést k cancelaci (rušení) platných cifer

$\Rightarrow$ volíme: $\boxed{q := \dfrac{x + \operatorname{sign}(x_1)\cdot\|x\|}{\|\quad\|}}$

vlastnosti: • paměť – ukládáme jen q, $H(q)$ nekonstruujeme

• výp. nákl. – násobení efektivně jen s q

$$H(q)x = x - 2q\underbrace{q^T x}_{\text{číslo}} \quad \dots \quad O(n)$$

zobecnění OG transf. do $\mathbb{C}^n$: lze, ale není zcela přímočaré

2.3 Zpětná stabilita (čtení navíc)

$\to$ analýza je těžká (Wilkinson, Turing)

$\to$ lze dok., že násobení unit. maticemi je zpětně stabilní

Věta: Nechť $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ a $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je matice elem. Giv. rot. nebo Hous.-refl. Pak $\exists\, E \in \mathbb{C}^{n\times n}$: $\overset{\text{výsledek v FPA}}{fl(UA)} = U\cdot(A+\overset{\text{perturbace}}{E})$, kde

$$\frac{\|E\|}{\|A\|} \leq \underset{\text{konstanta}}{\gamma}\cdot n^2\cdot \underset{\text{strojová přesnost}}{\varepsilon^{mach}} + O\left((\varepsilon^{mach})^2\right).$$

zjednodušeně: $\|E\| \approx \|A\|\cdot\varepsilon^{mach}$ … chyba v FPA je úměrná $\|A\|\cdot\varepsilon^{mach}$

$\Rightarrow$ vyřešili jsme úlohu blízkou původní

2.4 OG transformace a rozklady matic

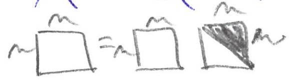
→ rozklady realizované OG transf. lze počítat zpětně stabilně ⇒ nezhoršují numerické vlastnosti matic (úloh)

QR rozklad:

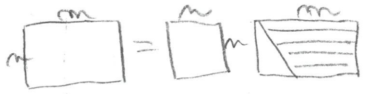
def: Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$. Pak QR rozklad A je rozklad tvaru $A = Q.R$, kde $Q \in \mathbb{C}^{n \times n}$ unitární a $R \in \mathbb{C}^{n \times m}$ horní △-ová.

tvary:

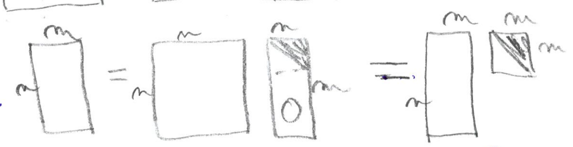
• $n = m$: $A = QR$, $\operatorname{hodn}(A) = \operatorname{hodn}(R)$



• $n < m$:



• $n > m$:



$$A = QR = \hat{Q}\hat{R}, \quad \hat{Q} \text{ - ON sloupce}$$

plný → QR, ekonomický → $\hat{Q}\hat{R}$

tvrz:

• QR rozklad není jednoznačný

př: $A = QR = (QD^*)(DR) = \hat{Q}\hat{R}$ pro $D^*D = I$

• pokud $\operatorname{hodn}(A) = m$, pak $\exists!\, \hat{R} \in \mathbb{C}^{m \times m}$: $A = \hat{Q}\hat{R}$ (ekon. rozklad) a diagonální prvky $\hat{R}$ jsou kladné

výpočet pomocí OG transformací: BÚNO: $n \geq m$

$$A = n\left\{\begin{bmatrix} | & & | \\ a_1 & \dots & a_m \\ | & & | \end{bmatrix}\right. \xrightarrow[\substack{\text{NEBO} \\ H_1 \in \mathbb{C}^{n \times n} \\ \text{reflektující} \\ a_1 \text{ na } \|a_1\| e_1}]{\substack{\Gamma_1 \in \mathbb{C}^{n \times n} \\ \text{rotující } a_1 \\ \text{na } \|a_1\| e_1 \in \mathbb{C}^n}} \Gamma_1 A = A^{(1)} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} \|a_1\| & \times & \dots & \times \\ 0 & | & & | \\ \vdots & a_2^{(1)} & \dots & a_m^{(1)} \\ 0 & | & & | \end{bmatrix} \begin{matrix} \}1 \\ \\ \}n-1 \\ \\ \end{matrix} \\ \underbrace{\quad}_{1} \; \underbrace{\qquad\qquad}_{m-1} \end{array}$$

$$\xrightarrow[\substack{\text{NEBO} \\ H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \dots 0 \\ 0 & \tilde{H}_2 \\ 0 & \end{bmatrix} \}n-1 \\ m-1}]{\substack{\Gamma_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \dots 0 \\ 0 & \tilde{\Gamma}_2 \\ 0 & \end{bmatrix}, \text{ kde} \\ \tilde{\Gamma}_2 \text{ rotující } a_2^{(1)} \text{ na} \\ \|a_2^{(1)}\| e_1 \in \mathbb{C}^{n-1}}}$$

$$\to \Gamma_1\Gamma_2 A \equiv A^{(2)} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} \|a_1\| & \times & \times \cdots \times \\ 0 & \|a_2^{(1)}\| & \times \cdots \times \\ 0 & 0 & \\ \vdots & \vdots & \square \\ 0 & 0 & \end{bmatrix} \begin{array}{l} \}\,2 \\ \\ \}\,n-2 \end{array} \\ \underbrace{\qquad\qquad}_{2}\ \underbrace{\qquad\qquad}_{m-2} \end{array} \to \ldots \to$$

$$\to \underbrace{\Gamma_m \cdots \Gamma_1}_{!!\; Q^* \in \mathbb{C}^{n\times n}} A \equiv A^{(m)} = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} =: R \in \mathbb{C}^{n\times m} \quad \ldots \text{ plný QR rozklad}$$

NEBO: $\underbrace{H_m \cdots H_1}_{=: Q_m^* \in \mathbb{C}^{n\times n}} A = R \in \mathbb{C}^{n\times m}$

vlastnosti: • výp. náklady – při efektivním násobení stojí transformace A na R (bez sestavení matice Q) cca

pro $n=m$

Hous.	$4/3\, n^3$
Giv.	$2\, n^3$

• paměť – efektivní ukládání Γ_i, H_i

využití k řešení soustav rnic:

úloha: $\| Ax = b,\ A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $A = QR \Rightarrow Rx = Q^* b$

1, $[A \,|\, b] \xrightarrow[\text{zleva}]{\text{OG transf.}} [R \,|\, Q^* b]$ vznikne implicitně, bez sestavení Q

2, zpětná substituce: $Rx = Q^* b$

→ nesestavujeme Q, jen transformujeme

→ oproti GE je zpětně stabilní

→ výp. náklady jsou 2x větší než u GE $\qquad$ GE.. $\frac{2}{3}n^3$ $\qquad$ QR .. $\frac{4}{3}n^3$

využití k řešení lin. aproximačních úloh: všude v následujících kapitolech

QR rozklad a Gramm-Schmidtova OG:

BÚNO: $n \geq m$, $\text{hodn}(A) = m$

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_m \end{bmatrix} \xrightarrow[\text{OG}]{\text{G.-S.}} Q = \underbrace{\begin{bmatrix} q_1 & \cdots & q_m \end{bmatrix}}_{\text{ON sloupce}}$$

$\text{span}\{a_1, \dots, a_k\} = \text{span}\{q_1, \dots, q_k\}$, $k = 1, \dots, m$

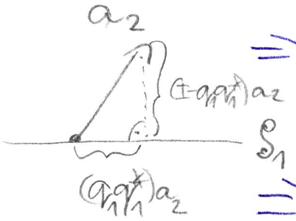
Ozn: $Q_k := [q_1, \dots, q_k]$, $S_k := \text{span}\{q_1, \dots, q_k\}$

$\boxed{\text{CGS}}$ - klasický G.-S. OG proces:

$$[a_1] \xrightarrow{\text{normuj}} \Big[\underbrace{\tfrac{a_1}{\|a_1\|}}_{=q_1}\Big] \xrightarrow[\text{vektor}]{\text{přidej}} \overset{\text{OG}}{[q_1, a_2]} \xrightarrow{\text{normuj}} \Big[q_1, \underbrace{\tfrac{\tilde{q}_2}{\|\tilde{q}_2\|}}_{=q_2}\Big]$$

k=1: $q_1 := a_1 / r_{11}$, $r_{11} := \|a_1\|$

k=2: $\tilde{q}_2 := a_2 - \underbrace{\overset{\text{OG koeficient}}{(q_1^* a_2)}}_{=: r_{12} \in \mathbb{C}} q_1 = a_2 - \underbrace{(q_1 \cdot q_1^*)}_{\in \mathbb{C}^{n \times n}} a_2 = (I - q_1 q_1^*) a_2$



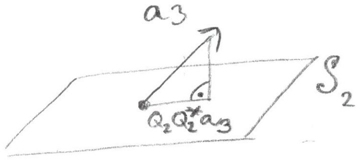
$\Rightarrow$ $(q_1 q_1^*)$ je matice realizující OG projekci vektoru a_2 na $\text{span}\{q_1\} = S_1$

$\Rightarrow$ $(I - q_1 q_1^*)$ je matice realizující OG projekci vektoru a_2 na $S_1^\perp$

$q_2 := \tilde{q}_2 / r_{22}$, $r_{22} := \|\tilde{q}_2\|$

obecně: $k \in \{2, \dots, m\}$

$$\| \; \tilde{q}_k := a_k - \sum_{i=1}^{k-1} \underbrace{(q_i^* a_k)}_{=: r_{ik}} q_i = a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (q_i q_i^*) a_k =$$



$$= a_k - Q_{k-1} Q_{k-1}^* a_k = (I - Q_{k-1} Q_{k-1}^*) a_k$$

$\Rightarrow$ $Q_{k-1} Q_{k-1}^*$ je matice realizující OG projekci vektoru na S_{k-1}

$\Rightarrow$ $(I - Q_{k-1} Q_{k-1}^*)$ — || — na $S_{k-1}^\perp$

výsledek: $A = QR$, $Q = [q_1, \dots, q_m] \in \mathbb{C}^{n\times m}$

EKONOMICKÝ QR

$$R = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1m} \\ & \ddots & & \vdots \\ 0 & & & r_{mm} \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{m\times m}$$

normalizační koeficienty

OG koeficienty

lemma: Nechť $Q_k \in \mathbb{C}^{n\times k}$ má ON sloupce. Pak OG projektor $(I - Q_k Q_k^*)$ splňuje

$$I - Q_k Q_k^* = (I - q_k q_k^*)(I - q_{k-1} q_{k-1}^*) \dots (I - q_1 q_1^*).$$

D: Triv. roznásobením OG projektory na span$\{q_i\}^\perp$ □

důsledek: $\tilde{q}_k = (I - q_{k-1} q_{k-1}^*) \dots (I - q_1 q_1^*) a_k$

... sekvenční ortogonalizace vždy proti jednomu vektoru ... modifikovaný G.-S. OG proces $\boxed{\text{MGS}}$

algoritmus (CGS): vstup: $A = [a_1, \dots, a_m]$
výstup: Q, R – ekon. QR rozklad

```
q_1 = a_1 / r_11 ,  r_11 = ||a_1||
for k = 2, ..., m do
    z := a_k
    for i = 1, ..., k-1 do
        r_ik = q_i^* z
    end
    for i = 1, ..., k-1 do
        z := z - r_ik q_i
    end
    r_kk := ||z||
    q_k := z / r_kk
end
```

MGS – toto pryč

CGS: spočti koeficienty, pak ortogonalizuj

MGS: spočti 1. koef, ortogonalizuj, spočti 2. koef, ortogonalizuj, ...

srovnání:

- CGS a MGS jsou matematicky ekvivalentní (různé algoritmizace téže metody) — neplatí v FPA
- stejné výp. náklady — $2n^3$ pro $n=m$
- CGS lze paralelizovat, MGS ne
- oproti Giv. a Hous. QR výpočetně výhodné, pokud $m \ll n$ a chci ON bázi
- nehodí se pro řeš. soustav (konstruuje Q, nepoužívá unit. transf. $[A|b]$)

num. stabilita QR rozkladu: (čtení navíc)

zachování ON sloupců Q: OG na ε^{mach}

	$\|I - fl(Q)^* fl(Q)\|$
Hous	ε
Giv.	ε
CGS	$\kappa(A)^2 \cdot \varepsilon$
MGS	$\kappa(A) \cdot \varepsilon$
ICGS	ε

$\varepsilon = \varepsilon^{mach}$

ICGS .. 2x iterovaný CGS „twice is enough"

→ MGS zachovává OG lépe než CGS

Věta (o zpětné stabilitě QR rozkladu):
Nechť $fl(Q)$, $fl(R)$ jsou faktory spočtené CGS, MGS, ICGS, Giv. nebo Hous. refl. v FPA s přesností ε^{mach}. Pak

$$\|A - \underbrace{fl(Q) \cdot fl(R)}_{=: \hat{A}}\| \approx \varepsilon^{mach} \cdot \|A\|.$$

→ máme QR rozklad matice $\hat{A}$, kde $\frac{\|A - \hat{A}\|}{\|A\|} \approx \varepsilon^{mach}$ ⇒ vyřešili jsme úlohu blízkou původní