Lineární algebra III – 5. přednáška 11.11.2013

Ortogonální matice a QR dekompozice

Důkaz věty z minula:

Alternativně chceme ukázat, že

$$\min\{\|\delta A\| : A+\delta A \text{ je singulární}\} = \frac{1}{\|A^{-1}\|}.$$

Minimum je alespoň $\frac{1}{\|A^{-1}\|}$: Nechť $\|\delta A\| < \frac{1}{\|A^{-1}\|}$, neboli platí

$1 > \|\delta A\|\cdot\|A^{-1}\| \geq \|A^{-1}\delta A\|$. z multiplikativity normy.

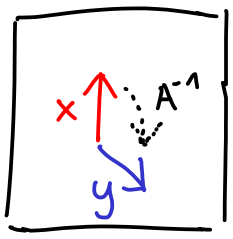
Platí lemma, že pro $\|X\|<1$ je $I-X$ regulární, kde $(I-X)^{-1} = \sum_{i=0}^{\infty} X^i$. Suma konverguje kvůli $\|X\|<1$.

Proto $I+A^{-1}\delta A$ je regulární, a tedy $A+\delta A$ je regulární.

Existuje δA, že $\|\delta A\| = \frac{1}{\|A^{-1}\|}$ a $A+\delta A$ je singulární:

Zkonstruujeme. Z definice $\exists x$, že $\|A^{-1}x\| = \|A^{-1}\|$ a $\|x\|=1$.

Položme $y = \frac{A^{-1}x}{\|A^{-1}x\|} = \frac{A^{-1}x}{\|A^{-1}\|}$, také platí $\|y\|=1$.



Tedy vezmeme vektor naplňující normu a jeho transformaci maticí A^{-1}, celkem logické.

Zkonstruujme $\delta A = \frac{-xy^T}{\|A^{-1}\|}$ a je snadné ověřit, že $\|\delta A\| = \frac{1}{\|A^{-1}\|}$ a že $A+\delta A$ je singulární, neboť $(A+\delta A)y = 0$. $\square$

Zmiňované dekompozice matic:

- $PA = LU$ (maticový zápis Gaussovy eliminace).
- $A = Q\Lambda Q^T$ spektrální dekompozice pro $A^*A = AA^*$.
- $A = SDS^{-1}$ / SJS^{-1} diagonalizace, Jordanova forma.
- $A = QUQ^T$ Schurova dekompozice.

Plán: Chceme vybudovat další dekompozici $A=QR$.

Motivace: Proč jsou tak zajímavé ortogonální matice?

Matice Q je ortogonální, když má kolmé sloupce, každý délky jedna. Algebraicky pak platí $Q^TQ = I_n$, tedy $Q^{-1} = Q^T$.

Geometricky jsou tyto transformace rotace a zrcadlení.

Zachovají normy a skalární součiny:

$$\|Qx\| = x^TQ^TQx = x^Tx = \|x\| \quad \text{a} \quad \langle Qx, Qy\rangle = x^TQ^TQy = \langle x|y\rangle.$$

Platí $\|Q\| = \|Q^{-1}\| = 1$, a tedy $k(Q) = 1$, mají numericky nejlepší možnou podmíněnost. Prakticky třeba 1,001.

Mimochodem tvoří grupu O_n ortogonálních matic, $Q_1, Q_2 \in O_n \Rightarrow Q_1Q_2 \in O_n$. Její podgrupa pouze rotací SO_n je také důležitá, řada aplikací v matematice.

Proč je QR dekompozice tak důležitá?

Ortogonální matice mají krásné vlastnosti, které jsme ilustrovali. Důležité ale je, že jsou hodně obecné, což ilustruje existence QR dekompozice libovolné A. Proto se používají ortogonální matice tak často.

QR dekompozice: Pro každou matici A existují ortogonální Q a horní trojúhelníková R, že $A = QR$.

Ukážeme si dva různé důkazy, pomocí dvou konstrukcí založených na různých myšlenkách.

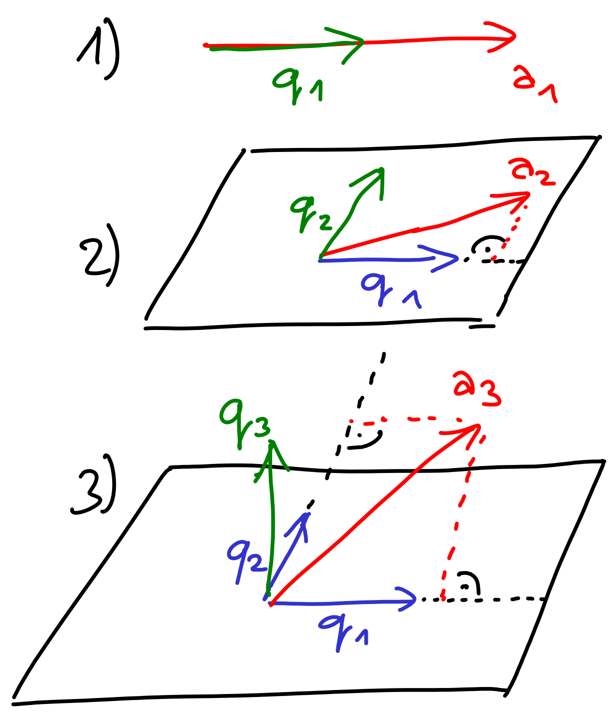
1. konstrukce: Gram-Schmidtova ortogonalizace.

Algoritmus, který $A \rightsquigarrow Q$. Podobně jako u LU, získáme R jako zápis provedených kroků.

Zopakujme si nejprve, jak algoritmus funguje.

Konstruujeme $Q = [q_1, \dots, q_n]$ z $A = [a_1, \dots a_n]$ postupně po sloupcích zleva doprava.

Příklad:



Od a_k odečteme ortogonální projekce na $q_1, \dots, q_{k-1}$ a výsledek normujeme.

$$\hat{q}_k := a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (a_k^T q_i) q_i \quad \text{a} \quad q_k := \frac{\hat{q}_k}{\|\hat{q}_k\|}.$$

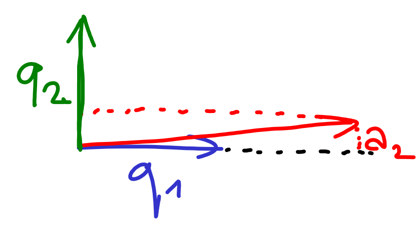
koeficient kolmé projekce

Každá úprava odpovídá násobení horní trojúhelníkovou maticí R_k zprava:

$$A R_1 R_2 \cdots R_n = Q, \quad \text{neboli} \quad A = QR. \leftarrow = R_n^{-1} R_{n-1}^{-1} \cdots R_1^{-1}$$

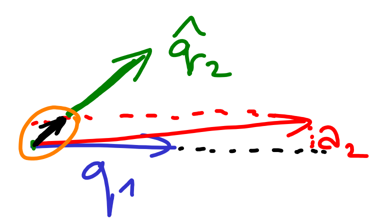
Problém je, že tato metoda výpočtu QR je numericky velice nepřesná, když sloupce A ukazují podobným směrem.

Exaktně:



Když úhel mezi $\langle q_1, \dots, q_{k-1} \rangle$ a a_k je malý, potom je norma $\hat{q}_k$ po odečtení malá. Proto i malá chyba se normováním zvětší!

Numericky:



Chyba před normováním se amplifikuje!

Z pohledu čísla podmíněnosti $\kappa(AB) \le \kappa(A) \cdot \kappa(B)$, ale může být blízko. Pokud $\kappa(R_i)$ je velké, potom $\kappa(R)$ může být obrovské, výrazně větší než $\kappa(A)$.

Můžeme však postupovat jinak, místo vyrábění Q sekvencí $R_1, \dots, R_n$ můžeme vyrobit R sekvencí $Q_1, \dots, Q_k$ s $\kappa(Q_i) = 1$.

2. konstrukce: Householderovy reflexe a Givensovy rotace

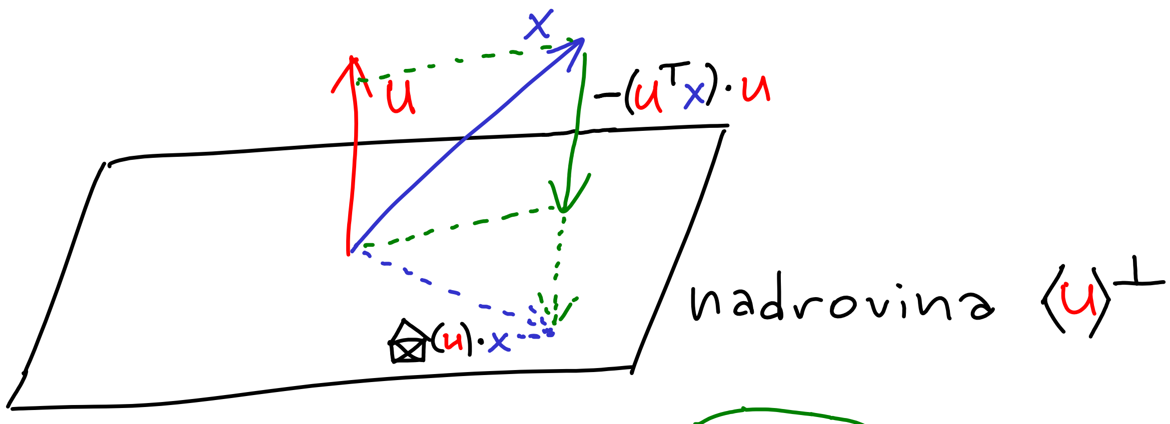
Speciální ortogonální matice, které $A \rightsquigarrow R$. Protože $\kappa(Q) \approx 1$, platí $\kappa(A) \approx \kappa(R)$, a lépe to udělat nejde.

Householderovy reflexe:

Reflexe kolem nadroviny určené normálou u.

Ortogonální matice

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



$$H(u)\cdot x = x - 2(u^Tx)\cdot u.$$

Nechť $A = [a_1, \dots, a_n]$ a $R = [r_1, \dots, r_n]$. Chceme najít u_1, že $H(u_1)\cdot a_1 = r_1$. Musí platit $\|a_1\| = \|r_1\|$ a $r_1 = \|a_1\|\cdot e_1 = \begin{pmatrix} \|a_1\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$.

Stačí zvolit $u_1 = \dfrac{a_1 - r_1}{\|a_1 - r_1\|}$ a dostaneme:

$$H(u_1)\cdot A = \left(\begin{array}{c|c} r_1 & \boxed{?} \\ 0 & \\ \vdots & \boxed{?} \\ 0 & \end{array}\right)$$

$$\left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \cdots 0 \\ \hline 0 & \\ \vdots & H(u_2) \\ 0 & \end{array}\right)\cdot H(u_1)\cdot A = \left(\begin{array}{ccc} r_1 & & \boxed{?} \\ 0 & r_2 & \\ \vdots & 0 & \\ \vdots & \vdots & \boxed{?} \\ 0 & 0 & \end{array}\right)$$

Získali jsme první sloupec a řádek R. Další transformace modifikují jen $\boxed{?}$. A tak dále, dokud nevyrobíme R.

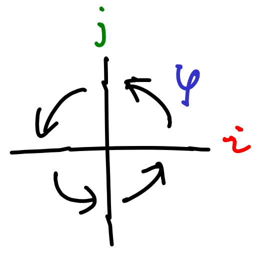
$$\boxed{Q_n \cdots Q_1 \cdot A = R \quad \Rightarrow \quad A = QR \quad \text{pro} \quad Q = Q_1^T Q_2^T \cdots Q_n^T.}$$

Givensovy rotace:

Jiné jednoduché matice, tentokrát nenulují sloupec, ale pouze jeden koeficient.

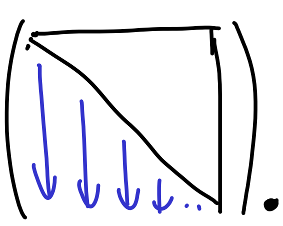
$$G(i,j,\varphi) = \begin{array}{c} \\ i \\ \\ j \\ \\ \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} & i & & j \end{array} \\ \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & \cos\varphi & & -\sin\varphi & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & \sin\varphi & & \cos\varphi & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}\end{array}$$

Rotace roviny $\langle e_i, e_j\rangle$ o úhel φ.

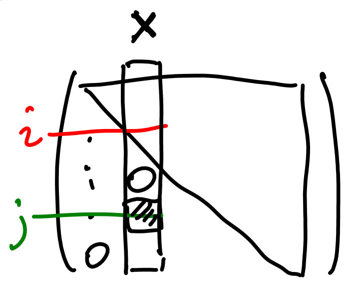


Výpočet QR:

A nulujeme



Jeden krok:



$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_j \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \xrightarrow[\text{s vhodným } \varphi]{G(i,j,\varphi)} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ \sqrt{x_i^2 + x_j^2} \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$