

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

1. előadás

Ortogonalis transzformációk

Ortogonalis mátrixok, ortogonalis transzformációk

Ortogonalis mátrixok

Definíció. A $Q \in R^{n \times n}$ mátrix ortogonalis, ha

$$QQ^T = I.$$

Példa. Az alábbi mátrixok ortogonalisak.

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ortogonalis mátrixok

- Csak **reguláris** mátrix lehet ortogonalis.
(Következik a determinánsok szorzástételéből.)
- Ortogonalis mátrix **inverze** megegyezik a **transzponáltjával**.

$$Q^{-1} = Q^T$$

Ortogonalis mátrixok

- Ortogonalis mátrix oszlopvektorai **ortonormált** vektorrendszeret alkotnak.

$$q_i^T q_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{ha } i = j \\ 0, & \text{ha } i \neq j \end{cases}$$

- Komplex mátrixok esetén a H-ortogonalis mellett használatos az ***unitér*** elnevezés is.

Ortogonalis transzformáció

Definíció. A $Q \in R^{n \times n}$ *ortogonalis mátrixszal* megadott

$$\begin{aligned} R^n &\rightarrow R^n \\ x &\mapsto Qx \end{aligned}$$

leképezést, ortogonalis transzformációnak nevezzük.

Az ortogonalis transzformációknak számos gyakorlati alkalmazásuk van.

Ortogonalis transzformáció

Ortogonalis mátrixok távolságtartó transzformációt indukálnak.

Tétel. A $Q \in R^{n \times n}$ *ortogonalis mátrixra* és $x \in R^n$ *vektorra*

$$\|Qx\|_2 = \|x\|_2.$$

Bizonyítás.

$$\|Qx\|_2^2 = (Qx)^T (Qx) = x^T Q^T Qx = x^T (Q^T Q)x = x^T x = \|x\|_2^2.$$

Megjegyzés. A tétel megfordítása is igaz, vagyis ha minden $x \in R^n$ vektorra $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$, akkor Q ortogonalis.

Ortogonalis transzformáció

Hasonló „hosszmegőrző” tulajdonság teljesül akkor is, ha mátrixok ortogonalis transzformációját tekintjük, a 2-es és a Frobenius normában.

Tétel. *Tetszőleges $A \in R^{n \times n}$ mátrixra és $Q \in R^{n \times n}$ ortogonalis mátrixra*

$$a) \quad \|QA\|_2 = \|A\|_2$$

$$b) \quad \|QA\|_F = \|A\|_F.$$

Bizonyítás

a)

$$\begin{aligned}\|QA\|_2^2 &= \rho((QA)^T (QA)) = \rho(A^T (Q^T Q)A) = \\ &= \rho(A^T I A) = \rho(A^T A) = \|A\|_2^2\end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned}\|QA\|_F^2 &= \sum_{j=1}^n \|(QA)e_j\|_2^2 = \sum_{j=1}^n \|Q(Ae_j)\|_2^2 = \\ &= \sum_{j=1}^n \|Ae_j\|_2^2 = \|A\|_F^2\end{aligned}$$

Megjegyzések

- Mivel tetszőleges $B \in R^{n \times n}$ mátrix esetén mindkét vizsgált normára teljesül $\|B\| = \|B^T\|$, így azt is igazoltuk, hogy

$$\|AQ\|_2 = \|A\|_2$$

$$\|AQ\|_F = \|A\|_F.$$

- Tetszőleges ortogonális hasonlósági transzformáció esetén

$$\|Q^T A Q\|_2 = \|A\|_2$$

$$\|Q^T A Q\|_F = \|A\|_F.$$

Következmény

- Tetszőleges $A \in R^{n \times n}$ mátrixra és $Q \in R^{n \times n}$ ortogonális mátrixra mind a 2-es, mind a Frobenius normához tartozó kondíciószámokra

$$\text{cond}(QA) = \text{cond}(A)$$

$$\text{cond}(Q^T A Q) = \text{cond}(A).$$

Megjegyzés

- A „hosszmegőrző” tulajdonságból következik, hogy minden Q valós ortogonális mátrix sajátértékeinek abszolút értéke 1. (De ettől még lehetnek komplex sajátértékei is a mátrixnak.)

Példa.

$$Q = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ortogonális mátrix sajátértékei

$$\lambda_1 = -1, \lambda_2 = i, \lambda_3 = -i.$$

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Ortogonalis-triangularis felbontás

Definíció. Az $A \in R^{n \times n}$ mátrix ortogonalis-triangularis felbontásán, A -nak egy

$$A = QR$$

alakú dekompozícióját értjük, ahol Q ortogonalis, R felső triangularis mátrix.

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Legyen $A \in R^{n \times n}$ tetszőleges reguláris mátrix.

Az $A=QR$ egyenlőséget oszlopokra bontva

így is megadhatjuk:

$$(a_1 a_2 \dots a_k \dots a_n) = (q_1 q_2 \dots q_k \dots q_n) \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1k} & \dots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \dots & r_{2k} & \dots & r_{2n} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & r_{kk} & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \ddots & \ddots & r_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & r_{nn} \end{pmatrix}$$

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Az A mátrix lineárisan független oszlopvektoraí az alábbi lineáris kombinációkkal fejezhetők ki a Q ortogonális mátrix ortonormált oszlopvektorrendszerével:

$$a_1 = r_{11}q_1$$

$$a_2 = r_{12}q_1 + r_{22}q_2$$

$$\vdots$$

$$a_k = r_{1k}q_1 + r_{2k}q_2 + \dots + r_{kk}q_k$$

$$\vdots$$

$$a_n = r_{1n}q_1 + r_{2n}q_2 + \dots + r_{nn}q_n.$$

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Az első

$$a_1 = r_{11}q_1$$

egyenlőségből

$$a_1^T a_1 = r_{11}^2 q_1^T q_1 = r_{11}^2$$

következik, így választható

$$r_{11} = +\sqrt{a_1^T a_1} \quad \text{és} \quad q_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{r_{11}} a_1.$$

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Feltéve, hogy $j=1,2,\dots,k-1$ -ig adott q_j és r_{ij} ($1 \leq i \leq j$), az $i=1,2,\dots,k-1$ értékekre a_k -t balról beszorozva q_i^T -tal:

$$q_i^T a_k = r_{1k} \underbrace{q_i^T q_1}_0 + r_{2k} \underbrace{q_i^T q_2}_0 + \dots + r_{ik} \underbrace{q_i^T q_i}_1 + \dots + r_{kk} \underbrace{q_i^T q_k}_0$$

Innen

$$r_{ik} = q_i^T a_k \quad i = 1, 2, \dots, k-1$$

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Meghatározva a

$$b_k \stackrel{def}{=} a_k - (r_{1k}q_1 + r_{2k}q_2 + \dots + r_{k-1,k}q_{k-1})$$

vektort, a $b_k = r_{kk}q_k$ összefüggést felhasználva adódik

$$r_{kk} = +\sqrt{b_k^T b_k} \quad \text{és} \quad q_k \stackrel{def}{=} \frac{1}{r_{kk}} b_k.$$

Az algoritmus műveletigénye

- n darab négyzetgyökvonás,
- az aritmetikai műveletek száma

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n (2n(k-1) + 2n + 2n(k-1)) &= \\ &= 2n \sum_{k=1}^n (2k-1) = O(n^3) \end{aligned}$$

- A gyakorlatban a módosított Gram-Schmidt eljárást használják.

Maple kód a QR-felbontás meghatározására a Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció alapján

```
3 GramSchmidt-QR:= proc( A :: 'Matrix'(shape=square))
4 local Q, R, b, i, j, k, l, n;           # lokális változók
5 #option trace;
6 use      LinearAlgebra in              # felhasználjuk a LinearAlgebra
csomagot
7     n := RowDimension(A);              # az A mátrix sorainak a száma
8     Q := Matrix(n);
9     R := Matrix(n, shape=triangular[upper]);
10    b := Vector(n);
```

```

11     for j from 1 to n do
12         for i from 1 to j-1 do          # az R mátrix j. oszlopának
kiszámítása
13             R[i,j] := DotProduct(Q[1..n,i],A[1..n,j]);
14         end do;
15         b := Vector(A[1..n,j]);
16         for k from 1 to j-1 do
17             b := b - R[k,j]*Q[1..n,k];
18         end do;
19         R[j,j] := sqrt(DotProduct(b,b));
20         for i from 1 to n do
21             Q[i,j] := 1/R[j,j]*b[i];
22         end do;
23     end do;
24     return Q,R;                        # visszaadjuk a Q és R mátrixot
25 end use;
26 end proc:                             # az eljárás vége

```

Megjegyzés

Ha a kiindulási mátrix oszlopvektoraik lineárisan függetlenek, az előbbi eljárás kiterjeszthető az $A \in R^{n \times m}$ és $n \geq m$ esetre is.

Ha az $A \in R^{n \times m}$ oszlopreguláris (s így szükségképpen $n \geq m$), akkor egyértelműen megadhatók olyan $Q \in R^{n \times m}$ és $R \in R^{m \times m}$ mátrixok, hogy $A = QR$, és

- (i) Q oszlopvektoraik ortonormált rendszert alkotnak,
- (ii) R olyan felső trianguláris mátrix, amelyben $r_{ii} > 0$ minden $i = 1, \dots, m$ -re.

Elemi tükröző mátrixok

Elemi tükröző mátrixok

Definíció. A Q kvadratikus mátrixot elemi tükröző mátrix-
nak mondjuk, ha $Q=I$ vagy felírható

$$Q = I - 2qq^T$$

alakban, ahol q olyan vektor, amelyre

$$q^T q = \|q\|_2^2 = 1.$$

Az elemi tükröző mátrixokat Householder-mátrixoknak is nevezik.

Elemi tükröző mátrixok

Az elnevezés onnan adódik, hogy $Q \neq I$ esetben, az $x \rightarrow Qx$ transzformáció az n -dimenziós euklideszi térnek egy q normálvektorral megadott, origón átmenő hiper-síkra való tükrözését adja, ahol

$$Q = I - 2qq^T.$$

Példa

Írjuk fel a $\left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^T$ normálvektorral megadott, origón átmenő egyenesre való tükrözést szolgáltató elemi tükröző mátrixot, és számoljuk ki a segítségével az $(5,3)$ koordinátájú pontnak az előbbi egyenesre való tükörképének a koordinátáit.

Megoldás

$$\begin{aligned} Q = I - 2qq^T &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - 2 \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

A megadott pont tükörképének koordinátái:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \end{pmatrix}.$$

Elemi tükröző mátrixok

Tétel. *Minden elemi tükröző mátrix szimmetrikus és ortogonális.*

Bizonyítás.

Legyen Q elemi tükröző mátrix.

a) Q szimmetrikus, mert

$$Q^T = (I - 2qq^T)^T = I^T - 2(q^T)^T q^T = I - 2qq^T = Q.$$

Elemi tükröző mátrixok

b) Q ortogonális, mert

$$\begin{aligned} Q^T Q &= Q Q = (I - 2qq^T)(I - 2qq^T) = \\ &= I - 2qq^T - 2qq^T + 4qq^T qq^T = \\ &= I - 4qq^T + 4q(q^T q)q^T = I \end{aligned}$$

felhasználva, hogy Q szimmetrikus és

$$q^T q = 1.$$

Elemi tükröző mátrixok

Tétel. *Legyenek x és y azonos hosszúságú de különböző vektorok az R^n euklideszi térben. Ekkor a*

$$q = \frac{x - y}{\|x - y\|_2}$$

és

$$Q = I - 2qq^T$$

formulákkal megadott elemi tükrözés x -et y -ba viszi.

Elemi tükröző mátrixok

Bizonyítás. Könnyen látható, hogy

$$\|q\|_2^2 = q^T q = 1.$$

Határozzuk meg a Qx vektort!

$$\begin{aligned} Qx &= \left(I - 2 \frac{x-y}{\|x-y\|_2} \left(\frac{x-y}{\|x-y\|_2} \right)^T \right) x = \\ &= x - 2(x-y) \frac{(x-y)^T x}{\|x-y\|_2^2} = \end{aligned}$$

A bizonyítás folytatása

$$= x - 2(x - y) \frac{x^T x - y^T x}{(x - y)^T (x - y)} =$$

$$= x - 2(x - y) \frac{x^T x - y^T x}{x^T x - y^T x - x^T y + y^T y} =$$

Használjuk fel, hogy

$$x^T x = y^T y \quad \text{és} \quad x^T y = y^T x.$$

A bizonyítás vége

$$\begin{aligned} &= x - 2(x - y) \frac{x^T x - y^T x}{x^T x - y^T x - x^T y + y^T y} = \\ &= x - (x - y) \frac{2(x^T x - y^T x)}{2(x^T x - y^T x)} = y. \end{aligned}$$

Ezzel igazoltuk, hogy

$$Qx = y.$$

Megjegyzés

- A későbbiekben többször használni fogjuk az előző transzformációt az $y = \|x\|_2 e_1$ speciális esetben, amikor a tükrözés célja a x vektor (elsőtől különböző) komponenseinek kinullázása. Ekkor a

$$q = \frac{x - y}{\|x - y\|_2}$$

vektor által definiált transzformációt alkalmazzuk.

Megjegyzés

- Tetszőleges Q elemi tükröző mátrix, A mátrix és x vektor esetén a Qx (illetve $x^T Q$) transzformált vektor $O(n)$ művelettel, a QA (illetve $A^T Q$) transzformált mátrix $O(n^2)$ művelettel meghatározhatók.

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Hány olyan 3×3 -as Q ortogonális mátrix van, amelynek minden komponense 0, 1 vagy -1?
- Igazolja, hogy az egységmátrixtól különböző n -ed rendű elemi tükröző mátrixnak a +1 szám $(n-1)$ -szeres, a -1 pedig egyszeres multiplicitású sajátértéke.

Gyakorló feladatok

- Határozza meg az alábbi mátrix QR felbontását a Gram-Schmidt-féle ortogonalizációs eljárás segítségével.

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 & -2 \\ 2 & -1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & -2 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.