

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

2. előadás

Mátrixok ortogonális-triangularis felbontása

A Householder-algorithmus

Partícionált elemi tükröző mátrixok

Tétel. *Legyen $Q \in R^{n \times n}$ egy elemi tükröző mátrix. Ekkor az alábbi partícionált formában megadott mátrix is elemi tükröző mátrix.*

$$T = \begin{pmatrix} I & O \\ O^T & Q \end{pmatrix} \in R^{m \times m}$$

$$O \in R^{(m-n) \times n}$$

Bizonyítás

Ha Q egységmátrix, akkor

$$T = \begin{pmatrix} I & O \\ O^T & Q = I \end{pmatrix} \in R^{m \times m}$$

is egységmátrix, így az állítás ekkor igaz.

Ha $Q = I - 2qq^T$, ahol q egységnyi hosszúságú, akkor vezessük be a

$$q'^T = (0, 0, \dots, 0, q_1, q_2, \dots, q_n)$$

m -komponensű vektort.

Bizonyítás

Könnyen látható, hogy q' hossza is egységnyi és

$$T = I - 2q'q'^T,$$

tehát T is elemi tükröző mátrix.

Megjegyzés. Analóg módon, az alábbi partícionált mátrix is elemi tükröző mátrix, ha $Q \in R^{n \times n}$ elemi tükröző mátrix.

$$T = \begin{pmatrix} Q & O \\ O^T & I \end{pmatrix} \in R^{m \times m}$$

Householder-algoritmus

Tétel Minden A n -edrendű, valós, kvadratikus mátrixhoz megadhatók olyan $Q_1, Q_2, \dots, Q_{n-1}$ elemi tükröző mátrixok, hogy az

$$A_0 = A$$
$$A_j = Q_j A_{j-1},$$

rekurzióval számított A_j mátrix $1, 2, \dots, j$ -dik oszlopában minden főátló alatti elem 0.

Speciálisan így A_{n-1} felső trianguláris alakú.

Householder-algoritmus

Bizonyítás.

A bizonyítást j szerinti indukcióval végezzük.

A $j=1$ esetben használjuk fel azt a tételt, amely elemi tükröző mátrix segítségével kinullázza egy vektornak a második komponensétől kezdve az elemeit úgy, hogy közben a vektor hossza nem változik. A korábbi tételbeli jelöléseket használva legyen

$$x = Ae_1 = a \qquad y = \|a\|_2 e_1.$$

Így a $Q_1 A_0$ szorzás elvégzése után kapott mátrix első oszlopában a második elemtől kezdve minden érték 0.

Householder-algoritmus

Bizonyítás (folyt.)

Tegyük fel, hogy az állítás teljesül az első j esetre! Az A_j mátrixot írjuk fel

$$A_j = \begin{pmatrix} U_j & B_j \\ O_j^T & C_j \end{pmatrix}$$

partícionált alakban, ahol

$$\begin{aligned} U_j &\in R^{j \times j}, & B_j &\in R^{j \times (n-j)}, \\ O_j^T &\in R^{(n-j) \times j}, & C_j &\in R^{(n-j) \times (n-j)}. \end{aligned}$$

Householder-algoritmus

Bizonyítás (folyt.)

Ismét felhasználva az előbb már alkalmazott tételt, van olyan $S_j \in R^{(n-j) \times (n-j)}$ elemi tükröző mátrix, amellyel szorozva az $S_j C_j$ mátrix első oszlopában a másodiktól kezdve minden elem 0.

A partícionált elemi tükröző mátrixokra vonatkozó tétel szerint

$$Q_{j+1} = \begin{pmatrix} I_j & O_j \\ O_j^T & S_j \end{pmatrix}$$

szintén elemi tükröző mátrix.

Householder-algoritmus

Bizonyítás (befejezés).

Tehát az

$$A_{j+1} = Q_{j+1} A_j = \begin{pmatrix} I_j & O_j \\ O_j^T & S_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_j & B_j \\ O_j^T & C_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_j & B_j \\ O_j^T & S_j C_j \end{pmatrix}$$

mátrix már a $j+1$ -dik oszlopában is olyan tulajdonságú lesz, hogy az A_{j+1} főátló alatti elemei rendre 0 értékűek.

Ortogonalis-triangularis felbontás

A fenti tétel bizonyításában szereplő eljárás valóban dekompozíciót ad, hiszen így

$$A_{n-1} = Q_{n-1}Q_{n-2}\cdots Q_1 A,$$

ahol $R = A_{n-1}$ felső triangularis mátrix, $Q_{n-1}Q_{n-2}\cdots Q_1$ ortogonalis mátrix, aminek Q inverze (vagyis az előbbi szorzatmátrix transzponáltja) is ortogonalis, így

$$A=QR.$$

Példa

Határozzuk meg a Householder-algoritmussal az alábbi mátrix ortogonális-triangularis felbontását.

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$$

Megoldás

Most csak egy elemi tükröző mátrixra van szükség, arra, amely az első oszlop második elemét kinullázza. Legyen

$$x = (3,4)^T \quad \text{és} \quad y = (5,0)^T.$$

Így

$$q = \left(-\frac{1}{\sqrt{5}}, \frac{2}{\sqrt{5}} \right)^T \quad \text{és} \quad Q = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix}.$$

Megoldás

$$R = QA = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & -\frac{7}{5} \end{pmatrix}$$

Tehát a QR dekompozíció:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & -\frac{7}{5} \end{pmatrix}.$$

```

1 # Az A=Q.R ortogonális trianguláris felbontást
2 # tükröző mátrixokkal előállító eljárás
3
4 QR_HOUSEHOLDER := proc(A::'Matrix'(shape=square))
5 local Q, A1, n, j, a_j, h_j, Hhat_j;
6 #option trace;
7 use LinearAlgebra in
8     n := RowDimension(A);
9     A1 := evalf(Copy(A));          #lemásoljuk az A mátrixot
10    Q := Matrix(IdentityMatrix(n));
11    for j from 1 to n-1 do
12        a_j := Vector(A1[j..n,j]);
13        h_j := a_j - sign(a_j[1])*VectorNorm(a_j,2)*UnitVector(1,n+1-j);
14        Hhat_j := HouseholderMatrix(h_j);
15        A1[j..n,j..n] := Hhat_j.A1[j..n,j..n];
16        Q[j..n,j..n] := Q[j..n,j..n].Hhat_j;
17        if j > 1 then
18            Q[1..j-1,j..n] := Q[1..j-1,j..n].Hhat_j;
19        end if;
20    end do;
21    return Q,A1;
22 end use;
23 end proc:

```

Felső Hessenberg mátrix

Definíció: *A H felső Hessenberg mátrix, ha*

*$h_{ij} = 0$
bármely $j+1 < i$ -re.*

Példa:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 4 \\ 2 & 3 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Felső Hessenberg alakra transzformálás

Megjegyzés. Tetszőleges $A \in R^{n \times n}$ mátrix véges sok elemi tükröző mátrixszal végzett ortogonális hasonlósági transzformáció segítségével felső Hessenberg alakra transzformálható, vagyis megadhatók olyan $Q_1, Q_2, \dots, Q_{n-2}$ elemi tükröző mátrixok, hogy az

$$A_0 = A \quad A_j = Q_j A_{j-1} Q_j,$$

rekurzióval számított $1, 2, \dots, j$ -dik oszlopában már felső Hessenberg alakú. Speciálisan az A_{n-2} mátrix felső Hessenberg alakú mátrix lesz.

Reguláris mátrixok QR-felbontása a Cholesky-féle dekompozícióval

Eljárás

Ha A reguláris, akkor a $B = A^T A$ mátrix pozitív definit, tehát létezik B -nek kanonikus Cholesky-felbontása.

Legyen $Q = AR^{-1}$. Ekkor az $A=QR$ ortogonális trianguláris felbontás, hiszen R felső trianguláris mátrix, másrészt Q ortogonális.

Q ortogonalitásának bizonyítása

$$\begin{aligned} Q^T Q &= \left(A R^{-1} \right)^T \left(A R^{-1} \right) = \left(R^{-1} \right)^T A^T A R^{-1} = \\ &= \left(R^{-1} \right)^T B R^{-1} = \left(R^{-1} \right)^T \left(R^T R \right) R^{-1} = \\ &= \left(\left(R^T \right)^{-1} R^T \right) \left(R R^{-1} \right) = I I = I \end{aligned}$$

A Cholesky-féle felbontáson alapuló QR-felbontás numerikusan instabil.

Példa

Határozzuk meg a Cholesky-felbontáson alapuló eljárással az alábbi reguláris mátrix ortogonális-triangularis felbontását

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}.$$

Megoldás

$$B = A^T A = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 2 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 25 & 26 \\ 26 & 29 \end{pmatrix}$$

B Cholesky-felbontása:

$$B = R^T R = \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ \frac{26}{5} & \frac{7}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix}$$

Megoldás

Így

$$Q = AR^{-1} = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & -\frac{26}{35} \\ 0 & \frac{5}{7} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix}$$

Tehát a QR-dekompozíció:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix}.$$

Összehasonlítás

Hasonlítsuk össze a Householder-algoritmus és a Cholesky-féle felbontáson alapuló eljárás eredményeit.

Householder-algoritmus:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & -\frac{7}{5} \end{pmatrix}.$$

Cholesky-féle felbontáson alapuló eljárás:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix}.$$

A felbontás unicitásáról

Tétel. *Reguláris A mátrix ortogonális triangularizációja Q oszlopainak és R sorainak előjelétől eltekintve egyértelmű.*

Bizonyítás.

Tekintsük A két felbontását.

$$A = Q_1 R_1 = Q_2 R_2$$

Bizonyítás (folytatás)

Mivel A reguláris, így a determinánsok szorzástétele miatt, a felbontásban szereplő minden mátrix reguláris, ezért

$$Q_2^T Q_1 = R_2 R_1^{-1}.$$

Itt a baloldalon ortogonális mátrix áll, a jobb oldalon viszont felső trianguláris mátrix, ami csak úgy lehet, ha mindkét oldal egy V diagonális mátrixszal azonos.

Bizonyítás (befejezés)

Mivel V egyszerre diagonális és ortogonális mátrix is, így a főátlójában csak $+1$ és -1 állhat, valamint

$$Q_2 = Q_1 V \quad R_2 = V R_1$$

ami a tétel bizonyítását jelenti.

Elemi forgatómátrixok

Elemi forgatómátrixok

Definíció. Tetszőleges $1 \leq p < q \leq n$ és $0 \leq \theta \leq 2\pi$ esetén az

$$S(p, q, \theta) =$$

$$I + (\cos \theta - 1)(e_p e_p^T + e_q e_q^T) + \sin \theta (e_p e_q^T - e_q e_p^T)$$

alakban megadható mátrixokat elemi forgatómátrixoknak nevezzük.

(Másik szokásos elnevezésük: *Givens-mátrixok*.)

$$S(p, q, \theta)$$

$$\begin{pmatrix}
 1 & & & & & \\
 & \ddots & & & & \\
 & & 1 & & & \\
 & & & \cos \theta & \sin \theta & \\
 & & & & \ddots & \\
 & & & -\sin \theta & \cos \theta & \\
 & & & & & 1 & \ddots & \\
 & & & & & & & 1
 \end{pmatrix}
 \begin{matrix}
 \\
 \\
 \\
 \leftarrow (p) \\
 \\
 \leftarrow (q) \\
 \\
 \\
 \\
 \end{matrix}$$

$\uparrow$
 (p)

$\uparrow$
 (q)

Tulajdonságok

Tetszőleges $S(p,q,\theta)$ elemi forgatómátrix és A mátrix esetén

- a) az $S(p,q,\theta)$ mátrix ortogonális,
- b) az $A'=AS(p,q,\theta)$ mátrix oszlopvektorai tetszőleges $1 \leq m \leq n$ -re A oszlopvektoraiból az alábbi képlettel számolhatóak

$$a'_m = \begin{cases} a_m & , \text{ ha } m \neq p \text{ és } m \neq q \\ \cos \theta a_p - \sin \theta a_q, & \text{ ha } m = p \\ \sin \theta a_p + \cos \theta a_q, & \text{ ha } m = q \end{cases}$$

QR-felbontás, felső Hessenberg- alakra transzformálás

- Tetszőleges valós, kvadratikus mátrix ortogonális trianguláris felbontása előállítható elemi forgató mátrixokkal $O(n^3)$ művelettel.
- Tetszőleges valós, kvadratikus mátrix $O(n^2)$ elemi forgatómátrixszal végzett ortogonális hasonlósági transzformáció segítségével $O(n^3)$ művelettel felső Hessenberg-alakra transzformálható.

QR-felbontás

Példa. Határozzuk meg az alábbi mátrix QR-felbontását elemi forgató mátrixokkal

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}.$$

Megoldás.

$$\cos \alpha = \frac{3}{\sqrt{3^2 + 4^2}} = \frac{3}{5} \quad \sin \alpha = \frac{4}{\sqrt{3^2 + 4^2}} = \frac{4}{5}$$

$$SA = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix}$$

Miért 'forgató' mátrix?

- Ha az (x,y) koordinátájú pont β szöget zár be az x -tengellyel és azt az origó körül $-\alpha$ szöggel elforgatjuk, akkor az így kapott pont (x',y') koordinátái

$$(z \cos(\beta - \alpha), z \sin(\beta - \alpha))$$

ahol $z = \sqrt{x^2 + y^2} = \sqrt{x'^2 + y'^2}$. Így

$$x' = z(\cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) = z(\cos \alpha \frac{x}{z} + \sin \alpha \frac{y}{z}) =$$

$$= x \cos \alpha + y \sin \alpha$$

$$y' = z(\sin \beta \cos \alpha - \cos \beta \sin \alpha) = z(\frac{y}{z} \cos \alpha - \frac{x}{z} \sin \alpha) =$$

$$= y \cos \alpha - x \sin \alpha$$

Megjegyzés

- Ha ismert az $A=QR$ dekompozíció, könnyen megkapható $|\det A|$ is. Ehhez elég meggondolni, hogy egy ortogonális mátrix determinánsa csak +1 vagy -1 lehet. Ekkor viszont

$$|\det A| = \prod_{i=1}^n |r_{ii}|.$$

- Ha ismert az $Ax=a$ lineáris egyenletrendszer együtthatómátrixának $A=QR$ felbontása, akkor tekintve a

$$Qy=a$$

$$Rx=y$$

egyenletrendszereket y könnyen meghatározható, kihasználva Q ortogonalitását ($y = Q^T a$), majd a szokásos visszahelyettesítéssel x is megkapható.

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Létezik-e olyan elemi tükrözés, amely az egységkört az egységnégyszetre képezi le?

Gyakorló feladatok

- Lehet-e egy mátrix egyszerre elemi tükröző és elemi forgató mátrix is?

Gyakorló feladatok

- Határozza meg az alábbi mátrix QR felbontását a Householder-algoritmussal.

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

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.