Přednáška 19 - QR faktorizace II.

opáčko - chceme algoritmus na výpočet $A = QR$, který bude stabilní & používá unitární transformace

$$\frac{\|A - \hat{Q}\hat{R}\|}{\|A\|} \le C \cdot \varepsilon_{mach}$$

$$\|I - \hat{Q}^T\hat{Q}\| \le C \cdot \varepsilon_{mach}$$

výpočet probíhá aplikací transf. matic $X^{(1)}, \dots, X^{(m)}$, tj. $X^{(m)} \cdots X^{(1)} \cdot A = R$

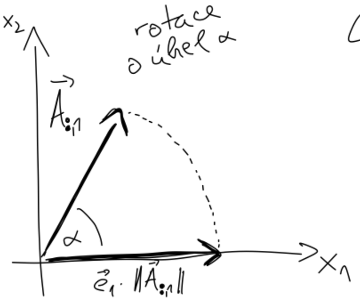
& $\|X^{(k)}\vec{v}\| = \|\vec{v}\| \ \forall k$

- obojí motivováno numerickou analýzou G.E./LU & & QR skrze Gram-Schmidt ortogonalizaci ani jedno nesplňuje.

Začneme v $\mathbb{R}^{2\times 2}$: $A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$ → chci najít unitární matici $U \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ t.ž. $UA = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} \\ 0 & r_{22} \end{bmatrix}$ pro nějaké $r_{ij} \in \mathbb{R}$ → pak $A = QR$ & $Q = U^T$, $R = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} \\ 0 & r_{22} \end{bmatrix}$

⇝ jak „vynulovat" vektor pod první složkou a nezměnit jeho normu?

rotace



$$U \cdot \vec{A}_{:,1} = \|\vec{A}_{:,1}\| \cdot \vec{e}_1$$

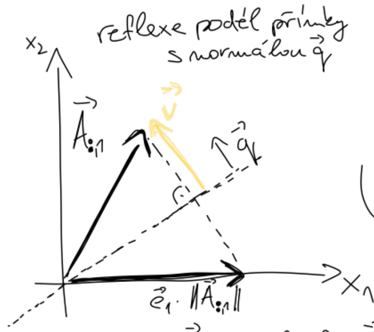
Lingebra1: $U = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & -\sin(\alpha) \\ \sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{bmatrix}$

Odvození: Hledejme $U = \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix}$. Pak

$$U\vec{A}_{:,1} = \begin{bmatrix} c \cdot a_{11} - s \cdot a_{12} \\ s \cdot a_{11} + c \cdot a_{12} \end{bmatrix} \overset{\text{chci}}{=} \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}^2 + a_{12}^2} \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad s = -c \cdot \frac{a_{12}}{a_{11}} \quad \& \quad c \cdot \left(a_{11} + \frac{a_{12}^2}{a_{11}}\right) = \sqrt{a_{11}^2 + a_{12}^2} \quad \Rightarrow \quad c = a_{11} / \sqrt{a_{11}^2 + a_{12}^2}, \quad s = -a_{12} / \sqrt{a_{11}^2 + a_{12}^2}$$

reflexe (≡ zrcadlení)



$$U \cdot \vec{A}_{:,1} = \|\vec{A}_{:,1}\| \cdot \vec{e}_1$$

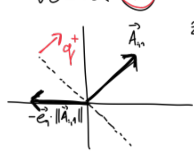
$\vec{e}_1 \cdot \|\vec{A}_{:,1}\| = \vec{A}_{:,1} - 2\vec{v}$ & $\vec{v}$ = projekce $\vec{A}_{:,1}$ na směr $\vec{q}$ (Lingebra1) $= \vec{q} \cdot \langle \vec{q}, \vec{A}_{:,1} \rangle = \vec{q} \cdot \vec{q}^T \vec{A}_{:,1}$

$$\Rightarrow U\vec{A}_{:,1} = \vec{A}_{:,1} - 2\vec{q}\vec{q}^T\vec{A}_{:,1} \Rightarrow U = I - 2\vec{q}\vec{q}^T$$

⇝ $\vec{q} = ?$ → $\vec{q} = \dfrac{\vec{A}_{:,1} \pm \vec{e}_1 \|\vec{A}_{:,1}\|}{\|\vec{A}_{:,1} \pm \vec{e}_1 \|\vec{A}_{:,1}\|\|}$

volba $-$ ⇝ odpovídá obrázku výše

volba $+$ ⇝ odpovídá zrcadlení podle osy, kolmé k té na obrázku



jak vybrat? chci stabilitu → tj. nechci dělit ≈ 0 ⇒ chci velkou $\|\cdot\|$ dole

$$\Rightarrow \vec{q} = \frac{\vec{A}_{:,1} + \mathrm{sgn}(a_{11}) \cdot \vec{e}_1 \cdot \|\vec{A}_{:,1}\|}{\|\vec{A}_{:,1} + \mathrm{sgn}(a_{11}) \cdot \vec{e}_1 \cdot \|\vec{A}_{:,1}\|\|}$$

Jak adaptovat pro $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$?

Givensovy rotace

Chceme $A = QR$, kde Q je unitární & R je horní-△.

Krok 1: převést unit. transf. $\vec{A}_{:,1}$ na $\vec{e}_1 \|\vec{A}_{:,1}\|$ → uděláme to souřadnici po souřadnici

$$\underbrace{\begin{bmatrix} c_1 & -s_1 & 0 & \cdots & 0 \\ s_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & & I_{n-2} & \\ 0 & 0 & & & \end{bmatrix}}_{G_1^{(1)}} \begin{bmatrix} \\ \vec{A}_{:,1} \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ 0 \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{n1}\end{bmatrix} \longrightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} c_2 & 0 & -s_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ s_2 & 0 & c_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & I_{n-3} & \\ 0 & 0 & 0 & & & \end{bmatrix}}_{G_1^{(2)}} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ 0 \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{n1}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_2 \\ 0 \\ 0 \\ a_{41} \\ \vdots \\ a_{n1}\end{bmatrix} \longrightarrow \ldots \longrightarrow$$

$G_1^{(1)}$ --- c_1, s_1 jako v $\mathbb{R}^2$ pro $\begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{12} \end{bmatrix}$

$G_1^{(2)}$ --- c_2, s_2 jako v $\mathbb{R}^2$ pro $\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ a_{31} \end{bmatrix}$

$$\longrightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} c_{n-1} & 0 & \cdots & 0 & -s_{n-1} \\ 0 & & & & 0 \\ \vdots & & I_{n-2} & & \vdots \\ 0 & & & & 0 \\ s_{n-1} & 0 & \cdots & 0 & c_{n-1} \end{bmatrix}}_{G_1^{(n-1)}} \begin{bmatrix} \alpha_{n-2} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ a_{n,1}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{n-1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0\end{bmatrix} \implies \underbrace{G_1^{(n-1)} \cdot \ldots \cdot G_1^{(1)}}_{=:G_1} \cdot A = \begin{bmatrix} \alpha_{n-1} & \beta_1 & \cdots & \beta_{n-1} \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{A} & \\ 0 & & & \end{bmatrix} \implies$$

$= \|\vec{A}_{:,1}\|$ protože G_1 nemění normu

$G_1^{(n-1)}$ --- c_{n-1}, s_{n-1} jako v $\mathbb{R}^2$ pro $\begin{bmatrix} \alpha_{n-2} \\ a_{n,1} \end{bmatrix}$

$$\implies A = G_1^T \cdot \begin{bmatrix} \alpha_{n-1} & \beta_1 & \cdots & \beta_{n-1} \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{A} & \\ 0 & & & \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

Krok 2: použijeme krok 1 na $\tilde{A}$ (a tedy nechceme měnit část) → dostaneme matice $G_2^{(1)}, \dots, G_2^{(n-2)}$ takové, že

$$\underbrace{G_2^{(n-2)} \cdot \ldots \cdot G_2^{(1)}}_{=:G_2} \cdot \tilde{A} = \begin{bmatrix} \tilde{\alpha}_{n-2} & \tilde{\beta}_1 & \cdots & \tilde{\beta}_{n-2} \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{\tilde{A}} & \\ 0 & & & \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$$

Pak

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \vec{0} \\ \vec{0} & G_2 \end{bmatrix}}_{\text{unitární}} \cdot \underbrace{G_1}_{\text{unitární}} \cdot A = \begin{bmatrix} \alpha_{n-1} & \beta_1 & \beta_2 & \cdots & \beta_{n-1} \\ 0 & \tilde{\alpha}_{n-2} & \tilde{\beta}_1 & \cdots & \tilde{\beta}_{n-2} \\ 0 & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & & \tilde{\tilde{A}} & \\ 0 & 0 & & & \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

Krok 3: použijeme krok 1 na $\tilde{\tilde{A}}$ & dostaneme $G_3 \cdot \tilde{\tilde{A}} = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\alpha}}_{n-3} & \tilde{\tilde{\beta}}_1 & \cdots & \tilde{\tilde{\beta}}_{n-3} \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{\tilde{\tilde{A}}} & \\ 0 & & & \end{bmatrix}$ &

$$\& \underbrace{\begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & G_3 \end{bmatrix}}_{\text{unitární}} \underbrace{\begin{bmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & G_2 \end{bmatrix}}_{\text{unitární}} \underbrace{G_1}_{\text{unitární}} \cdot A = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\alpha}}_{n-3} & \tilde{\tilde{\beta}}_1 & \cdots & \tilde{\tilde{\beta}}_{n-3} \\ 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{\tilde{\tilde{A}}} & \\ 0 & & & \end{bmatrix}$$

Krok n-1: použijeme krok 1 na $\tilde{\tilde{\tilde{A}}}$ & dostaneme $G_{n-1} \cdot \tilde{\tilde{\tilde{A}}} = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\tilde{\alpha}}}_1 & \tilde{\tilde{\tilde{\beta}}}_1 \\ 0 & \gamma \end{bmatrix}$

pak:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} I_{n-2} & 0 \\ 0 & G_{n-1} \end{bmatrix} \cdot \ldots \cdot \begin{bmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & G_2 \end{bmatrix} \cdot G_1}_{U} \cdot A = \underbrace{\begin{bmatrix} \ast & \cdots & \ast \\ 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots\ 0 & \ast \end{bmatrix}}_{R} \quad \ldots \quad A = \underset{\substack{\| \\ Q}}{U^T} R$$

Householderovy reflexe

Krok 1: převést unit. transf. $\vec{A}_{:1}$ na $\vec{e}_1 \cdot \|\vec{A}_{:1}\|$

položíme $\vec{q}_1 := \dfrac{\vec{A}_{:1} + \operatorname{sgn}(a_{11}) \cdot \vec{e}_1 \cdot \|\vec{A}_{:1}\|}{\|\vec{A}_{:1} + \operatorname{sgn}(a_{11}) \cdot \vec{e}_1 \cdot \|\vec{A}_{:1}\|\|}$ & $H_1 := I - 2\vec{q}_1\vec{q}_1^T$ ⇝ pak $\underbrace{H_1}_{\text{unitární}} A = \begin{bmatrix} \varphi_1 & \psi_1 \cdots \psi_{n-1} \\ 0 & \\ \vdots & \tilde{A} \\ 0 & \end{bmatrix}$

Krok 2: $\vec{q}_2 := \dfrac{\tilde{\vec{A}}_{:1} + \operatorname{sgn}(\tilde{a}_{11}) \cdot \vec{e}_1 \cdot \|\tilde{\vec{A}}_{:1}\|}{\|\tilde{\vec{A}}_{:1} + \operatorname{sgn}(\tilde{a}_{11}) \cdot \vec{e}_1 \cdot \|\tilde{\vec{A}}_{:1}\|\|}$ & $H_2 := I - 2\vec{q}_2\vec{q}_2^T$ ⇝ pak $\underbrace{H_2}_{\text{unitární}} \tilde{A} = \begin{bmatrix} \tilde{\varphi}_1 & \tilde{\psi}_1 \cdots \tilde{\psi}_{n-2} \\ 0 & \\ \vdots & \tilde{\tilde{A}} \\ 0 & \end{bmatrix}$

$$\Rightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix}}_{\text{unitární}} \cdot \underbrace{H_1}_{\text{unitární}} \cdot A = \begin{bmatrix} \varphi_1 & \psi_1 & \psi_2 \cdots \psi_{n-1} \\ 0 & \tilde{\varphi}_1 & \tilde{\psi}_1 \cdots \tilde{\psi}_{n-2} \\ 0 & 0 & \\ \vdots & \vdots & \tilde{\tilde{A}} \\ 0 & 0 & \end{bmatrix}$$

⋮

Krok n-1: $\vec{q}_{n-1} := \dfrac{\tilde{\tilde{\vec{A}}}_{:1} - \operatorname{sgn}(\tilde{\tilde{a}}_{11}) \cdot \vec{e}_1 \cdot \|\tilde{\tilde{\vec{A}}}_{:1}\|}{\|\tilde{\tilde{\vec{A}}}_{:1} - \operatorname{sgn}(\tilde{\tilde{a}}_{11}) \cdot \vec{e}_1 \cdot \|\tilde{\tilde{\vec{A}}}_{:1}\|\|}$ & $H_{n-1} := I - 2\vec{q}_{n-1}\vec{q}_{n-1}^T$ ⇝ pak $\underbrace{H_{n-1}}_{\text{unitární}} \tilde{A} = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{\varphi}}_1 & \tilde{\tilde{\psi}} \\ 0 & \theta \end{bmatrix}$

$$\underbrace{\underbrace{\begin{bmatrix} I_{n-2} & 0 \\ 0 & H_{n-1} \end{bmatrix}}_{\text{unitární}} \cdot \;\cdots\cdots\; \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix}}_{\text{unitární}} \cdot \underbrace{H_1}_{\text{unitární}}}_{=:\,U} A = \underbrace{\begin{bmatrix} * & \cdots & * \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & * \end{bmatrix}}_{R} \implies A = \underset{\overset{\|}{Q}}{U^T} R$$

Stabilita výpočtu: pro Householder-QR i Givens-QR platí ☺

- $\|A - \hat{Q}\hat{R}\| \le C \cdot \varepsilon_{mach} \cdot \|A\|$
- $\|I - \hat{Q}^T\hat{Q}\| \le C \cdot \varepsilon_{mach}$

Porovnání ceny výpočtu: pokud $a_{ij} \neq 0 \ \forall ij$ $\begin{cases} \text{Householder} \sim \frac{2}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2) \\ \text{Givens} \sim 2n^3 + \mathcal{O}(n^2) \end{cases}$

⇝ ale pokud máme A řídkou (nebo aspoň její spodní-△ část), pak Givensovy rotace nemusí dělat všechny operace ⇝ lze počítat pouze pro ≠0 prvky – u Householdera nikoliv, tam vždy počítáme stejně.

Aplikace na řešení $A\vec{x} = \vec{b}$:

- samostatně spočítáme $A = QR$ a poté řešíme $R\vec{x} = Q^T\vec{b}$
- při výpočtu $A = QR$ aplikujeme matice G_i nebo H_i zároveň i na příslušnou část pravé strany $\vec{b}$ ⇝ to vlastně odpovídá aplikaci G_i nebo H_i na $[A \mid \vec{b}]$ ⟶ dostaneme $[R, \vec{c}]$ a vyřešíme $R\vec{x} = \vec{c}$.

Analogické výpočtu LU-faktorizace vs. Gaussově eliminaci coby aplikaci LU.