NUMERICKÉ METÓDY LINEÁRNEJ ALGEBRY

03. Ortogonálne vektory a matice, rozklad matice

Ing. Marek Macák, PhD.

Konzultácie: podľa potreby/dohody online

20. Február 2024

Ortogonálne matice a vektory

- Nech $x, y \in \mathbb{C}^n$ sú dva nenulové vektory a nech je na $\mathbb{C}^n$ definovaný skalárny súčin $(x, y) = y * x = \sum_{i=1}^{n} \bar{y}_i x_i$. Potom vektor x je ortogonálny na vektor y, ak $(x, y) = 0$. Hovoríme, že x je kolmý na $y : x \perp y$.
- Ak je k vektorov $x_1, x_2, ..., x_k$ navzájom ortogonálnych (t.j., každá dvojica je ortogonálna), potom sú lineárne nezávislé. Naopak to neplatí!
- Ak $x_1 \perp x_2$ a zároveň $||x_1|| = ||x_2|| = 1$, potom sa takéto vektory nazývajú ortonormálne.
- Matica $Q \in \mathbb{C}^{n \times n}$ je unitárna, ak $Q^\star Q = QQ^\star = I$, $Q^\star = (\bar{Q})^T$. Unitárna reálna matica sa nazýva ortogonálna. Ortogonálna matica, ktorej všetky stlpce majú jednotkovú normu, sa nazýva ortonormálna.
- Unitárne matice sú regulárne a ich inverzia je jednoduchá: $Q^{-1} = Q^\star$. Súčin dvoch unitárnych matíc je unitárna matica.

Klasická Grammova-Schmidtova ortogonalizácia (KGS)

- Nech je daných k lineárne nezávislých (LN) vektorov $x_1, x_2, \ldots, x_k \in \mathbb{R}^n$. Potom KGS je algoritmus, ktorý z týchto k LN vektorov vypočíta k vzájomne ortonormálnych vektorov $q_1, q_2, \ldots, q_k$.

$$
\boxed{
\begin{array}{l}
\textbf{for } j = 1, 2, \ldots, k \\
\quad \textbf{for } i = 1, 2, \ldots, j-1 \\
\qquad \alpha_{ij} = q_i^T x_j \\
\qquad qj = x_j - \sum_{i=1}^{j-1} \alpha_{ij} q_i \\
\qquad \beta = ||q_j|| \\
\qquad qj = qj/\beta \\
\quad \textbf{end} \\
\textbf{end}
\end{array}
}
$$

- KGS je numericky nestabilný: vypočítané vektory q_j nemusia byť presne ortonormálne.

Klasická Grammova-Schmidtova ortogonalizácia (KGS)

- Zoberme iba dva vektory $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^n$ a nech $||x_1|| = 1$, takže $q_1 = x_1$ (t.j. q_1 sa nevypočíta). Potom KGS sa redukuje na:
  $\tilde{\alpha}_{12} = fl(q_1^T x_2); \quad \tilde{q}_2 = fl(x_2 - fl(\tilde{\alpha}_{12} q_1))$ (neuvažujeme normalizáciu $\tilde{q}_2$).
- Dá sa ukázať, (Bjorck 1994) že:

$$||q_1^T \tilde{q}_2|| < 1.06(2n+3)||x_2||\mu. \tag{1}$$

- Takže pri KGS nemusí byť vypočítaný vektor $\tilde{q}_2 \perp q_1$ ak je napr. $||x_2|| \gg 1$.
- Z tohto príkladu je vidieť, že pre KGS môže byť kritickou prekážkou pre presný výpočet *veľký rozdiel v normách vstupných vektorov*.

Modifikovaná Grammova-Schmidtova ortogonalizácia (MGS)

- Nech je daných k LN vektorov $x_1, x_2, \ldots, x_k \in \mathbb{R}^n$. Potom MGS je algoritmus, ktorý z týchto k LN vektorov vypočíta k vzájomne ortonormálnych vektorov $q_1, q_2, \ldots, q_k$.

$$
\boxed{
\begin{array}{l}
\textbf{for } j = 1, 2, \ldots, k \\
\quad q_j = x_j \\
\quad \textbf{for } i = 1, 2, \ldots, j-1 \\
\quad\quad \alpha_{ij} = q_i^T q_j \\
\quad\quad qj = q_j - \alpha_{ij} q_i \\
\quad \textbf{end} \\
\quad \beta = ||q_j|| \\
\quad qj = qj/\beta \\
\textbf{end}
\end{array}
}
$$

- Táto modifikácia (použitie α_{ij} okamžite po výpočte) vedie k lepším numerickým vlastnostiam MGS oproti KGS.

Modifikovaná Grammova-Schmidtova ortogonalizácia (MGS)

- Podobnú analýzu chyb je možné vyponať aj v pripade MGS.
- Nech $\tilde{Q} = (\tilde{q}_1, \tilde{q}_2, ..., \tilde{q}_k)$ sú vypočítané vektory. Potom sa dá ukázať, že strata ortogonality závisí od čísla podmienenosti matice $X = (x_1, x_2, ..., x_k)$:

$$||I - \tilde{Q}^T \tilde{Q}|| \leq \frac{c_1 \kappa(X) \mu}{1 - c_2 \kappa(X) \mu}. \tag{2}$$

  kde c_1 a c_2 sú malé konštanty.
- Takže pre $\kappa(X) \gg 1$ môže byť strata ortogonality neprijateľná.
- Inými slovami, MGS môže tiež zlyhať (napr. ak vstupné vektory su takmer kolineárne (vtedy je $\kappa(X) \gg 1$).
- V praxi je tento prípad menej pravdepodobný ako výskyt vstupných vektorov s výrazne rozdielnymi normami.

Rozklad matice A

- Môžeme si ho predstaviť ako postupné nulovanie stĺpcov matice pod jej hlavnou diagonálou.
- To znamená, že potrebujeme nástroj, ktorý 'vyrobý' nuly na miestach nenulových prvkom matice A.
- Takýmto nástrojom sú napr. Householderová rotácia, Givensová rotácia, ...

Householderova transformácia (HT)

- Nech je daný vektor $u \in \mathbb{R}^n$, $u \neq 0$. Potom matica

$$H = I - \frac{2uu^T}{u^T u} \tag{3}$$

  sa nazýva Householderova matica (tiež elementárna reflexia). Pomenovaná podľa amerického numerika Alstona Householdera (1904 - 1993).
- Je to symetrická a ortogonálna matica: $H^T = H, \quad H^T H = HH^T = I.$
- Aplikácia H na vektor $x \in \mathbb{R}^n$:

$$y = Hx = x - \frac{2u^T x}{u^T u} u \tag{4}$$

  je reflexia vektora x v rovine kolmej na u a prechádzajúcej bodom 0. Pritom $||Hx||_2 = ||x||_2$ (nemení dĺžku vekt.).

Householderova transformácia (HT)

- Nech sú dané dva nenulové vektory $x, y \in \mathbb{R}^n$ s rovnakou Euklidovou normou: $||x||_2 = ||y||_2$. Nech $u = (x - y)/||x - y||_2$. Potom $H = I - 2uu^T$ je reflexia x na y a naopak: $Hx = y$, $Hy = x$.
- Pre nás bude dôležitá aplikácia HT na vektor x tak, aby nastala reflexia 'spravnym smerov', t.j. aby došlo k vynulovaniu požadovaných zložiek x.
- Nech je daných vektor $x = (x_1, x_2, ..., x_k)^T$. Potom hľadáme vektor u tak, aby Hx bol násobok vektora $e_1 = (1, 0, ..., 0)^T$.

$$u = x + sign(x_1)||x||_2 e_1; Hx = (-sign(x_1)||x||, 0, 0, ..., 0)^T. \tag{5}$$

Householderova transformácia (HT)

- Nech je daných vektor $x = (x_1, x_2, ..., x_k)^T$. Potom hľadáme vektor u taký, že $Hx = x - \frac{2u^T xu}{u^T u} = (\omega, 0, ..., 0)^T$.

$$
\boxed{
\begin{array}{l}
m = max(|x_i|), \quad i = 1, 2, ..., n \\
\textbf{for } i = 1, 2, ..., n \\
\quad u_i = x_i / m \\
\quad \textbf{end} \\
\omega = sign(u_1)\sqrt{\sum_{i=1}^{n} u_i^2} \\
u_1 = u_1 + \omega \\
\omega = -m\omega
\end{array}
}
$$

- Všimnime si, že H nieje explicitne formulovaná. Algoritmus počíta iba jej pôsobenie na x.

Householderova transformácia (HT)

- Pri násobení $B = HA$, kde $H \in \mathbb{R}^{m \times m}$ a $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, netreba sformovať H explicitne - stačí poznať vektor u.
- Označme matice po stĺpcoch: $A = (a_1, a_2, ..., a_k)$, $B = HA = (b_1, b_2, ..., b_n)$. Potom B vypočítame v cykle po stĺpcoch:

$$b_i = \left(I - \frac{2uu^T}{||u||^2} \right) a_i = a_i - \frac{2u^T a_i}{||u||^2} u, \quad i \leq i \leq n. \tag{6}$$

Takže v cykle stačí počítať skalárne súčiny $u^T a_i$.

Givensova transformácia (GT)

- Nech sú dané dve reálne čísla c, s, kde $c^2 + s^2 = 1$.
- Na základe tohoto vzťahu môžeme tieto čísla interpretovať ako $c = \cos\theta$, $s = \sin\theta$ pre nejaký uhol θ. Potom Givensova matica (podľa Wallacea Givensa (1910 - 1993)) $G(i,j,\theta) = (g_{kl})$ pre $i < j$ rádu n je matica, ktorá sa od identity I líši iba v prvkoch $g_{ii} = g_{jj} = c, g_{ij} = s, g_{ji} = -s$.
- Givensova matica nie je symetrická, ale je ortogonálna: $G(i,j,\theta)G(i,j,\theta)^T = G(i,j,\theta)^T G(i,j,\theta) = I$
- Operácia $G(i,j,\theta)$ x má vplyv iba na zložky x_i a x_j vektora x. Ostatné zložky zostanú nezmenené. Preto výsledný vektor $y = G(i,j,\theta)x$ má tvar: $y_i = cx_i + sx_j, \quad y_j = -sx_i + cx_j, \quad y_k = x_k$ pre $k \neq i,j$.

Givensova transformácia (GT)

- Nech $x = (x_1, x_2)^T$, $x2 \neq 0$. Potom $G(1,2,\theta)$ nuluje druhú zložku vektora x:

$$G(1,2,\theta)x = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \star \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{7}$$

kde $c = x_1/\sqrt{x_1^2 + x_2^2}, s = x_2/\sqrt{x_1^2 + x_2^2}$.

- Stabilný výpočet parametrov c a s

$$\boxed{\begin{array}{l} \textbf{if } (|x_2| \geq |x_1| \\ \quad t = x_1/x_2, \quad s = 1/\sqrt{1+t^2}, \quad c = st \\ \textbf{else if } (|x_2| < |x_1| \\ \quad t = x_2/x_1, \quad c = 1/\sqrt{1+t^2}, \quad s = ct \end{array}}$$

pre premennú t platí $|t| < 1$.

Givensova transformácia (GT)

- Násobenie $G(i,j,\theta)A$ mení iba riadky i a j matice $A = (a_{ij})$:

$$\boxed{\begin{array}{l} \textbf{for } k = 1, 2, \ldots, n \\ \quad a = a_{ik}, \quad b = a_{jk} \\ \quad a_{ik} = ac + bs, \quad a_{jk} = -as + bc \\ \textbf{end} \end{array}}$$

Matica $G(i,j,\theta)$ opäť nie je sformovaná explicitne!

Čiastočné zhrnutie

- Odlišnosť HT od GT vzhľadom na efektívnosť nulovania zložiek:
  - HT dokaze naraz vynulovat $n-1$ zložiek vektora resp. maticového stĺpca,
  - GT nuluje iba jednu zložku vektora resp. maticového stĺpca.
- HT sa prednostne používa v aplikáciach a GT sa skôr využíva na cielené nulovanie prvkov ktoré nieje velkoplošné.

QR rozklad A

- **Veta**: Nech $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, má lineárne nezávislé stĺpce (t.j. hodnosť A je n). Potom existuje práve jedna matica $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ s n ortonormálnymi stĺpcami a práve jedna horná trojuholníková matica s kladnými diagonálnymi prvkami tak, že

$$A = QR. \tag{8}$$

- To znamená, že dve QR faktorizácie takejto matice A, vypočítané dvomi rôznymi spôsobmi (napr. HT a GT), sa môžu líšiť v znamienkach riadkov R a príslušných stĺpcov Q.

QR rozklad A

- **Veta**: Nech $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$. Potom existuje ortogonálna matica $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ a jedna horná trojuholníková matica $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$tak, že

$$A = Q \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} = (Q_1, Q_2) \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} = Q_1 R, \tag{9}$$

  kde $0 \in \mathbb{R}^{(m-n) \times n}$ je nulový blok a Q_1 má iba n ON stĺpcov.

- Výpočet QR pomocou HT: Nech $s = min(m-1, n)$. Potom algoritmus počíta s vnorenými Householderovými maticami $\tilde{H}_1, \tilde{H}_2, ...\tilde{H}_s$ tak, aby:

$$\tilde{H}_s \tilde{H}_{s-1} ... \tilde{H}_2 \tilde{H}_1 A = Q^T A = (R^T, 0^T)^T. \tag{10}$$

QR rozklad A

- Matica $\tilde{H}_k$, $1 \leq k \leq s$, je vnorená HT:

$$\tilde{H}_k = \begin{pmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & H_k \end{pmatrix}, \tag{11}$$

  kde $H_k = I_{m-k+1} - 2u_{m-k+1}u_{m-k+1}^T/||u_{m-k+1}||^2$.

- Vnorenie zaručuje, že pri násobení $\tilde{H}_k A^{k-1}$ zostane prvých $k-1$ riadkov a prvých $k-1$ stĺpcov matice A bez zmeny.
- V praxi sa nikdy neformujú $\tilde{H}_k$ ani H_k explicitne - pracuje sa iba s vektormi u_{m-k+1}.
- Výpočtová zložitosť pre maticu $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$ je $n^2(m - n/3)$*flops* (floating point operations) bez explicitnej formácie Q.

Elementárne matice

- Elementárna matica je dolná trojuholníková matica E rádu n s jednotkami na diagonále, ktorej všetky nenulové mimodiagonálne prvky ležia práve v jednom stĺpci pod diagonálou.
- Ak je to napr. k-ty stĺpec, potom má tvar:
  $e_k + (0, 0, ..., 0, 0, m_{k+1,k}, m_{k+2,k}, ..., m_{n,k})^T = e_k + m_k$ kde e_k ma k-tu zložku 1, ostatné sú nuly.
- Nech $x = (x_1, x_2, ..., x_n)^T$, $x_1 \neq 0$. Potom existuje elementárna matica E taká, že Ex je násobok e_1 (t.j. Ex má nenulovú jedine prvú zložku, ostatné zložky sú nulové). E je daná prvým stlpcom $(1, -x_2/x_1, ..., -x_n/x_1)^T$. Čísla $-x_i/x_1, 2 \leq i \leq n$, sa nazývajú činitele.
- Elementárne matice nie sú ani symetrické ani ortogonálne.

LU rozklad A

- **Postup**: Nech je daná $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Potom konštruujeme elementárne matice $E_1, E_2, ..., E_{n-1}$ tak, aby: $E_{n-1}E_{n-2}...E_1A = U$ bola horná trojuholníková matica.
  - E_1 nuluje prvý stĺpec matice A pod a_{11}, vznikne $A^{(1)}$.
    Činitele sú:$m_{i1} = -a_{i1}/a_{11}, \quad 2 \leq\leq n$.
  - E_2 nuluje prvý stĺpec matice $A^{(1)}$ pod $a_{22}^{(1)}$, vznikne $A^{(2)}$.
    Činitele sú:$m_{i2} = -a_{i2}^{(1)}/a_{22}^{(1)}, \quad 3 \leq\leq n$.
  - ...
  - v kroku E_{n-1} nuluje prvý stĺpec matice $A^{(n-2)}$ pod $a_{n-1,n-1}^{(n-2)}$, vznikne $A^{(n-1)}$.
    Činitel je :$m_{m,n-1} = -a_{n,n-1}^{(n-2)}/a_{n-1,n-1}^{(n-2)}, \quad 2 \leq\leq n$.

LU rozklad A

- Matica $L_1 = E_{n-1}E_{n-2}...E_1$ je dolná trojuholníková s jednotkami na diagonále. Pritom platí: $L_1A = U$, takže $A = L_1^{-1}U = LU$, pričom L_1^{-1} je opäť dolná trojuholníková matica.
- Kedže $E_i = I + m_i e_i^T$, kde $m_i = (0, ..., 0, m_{i+1,i}, ..., m_{n,i})^T$. Inverzia elementárnej matice ma tvar $E_i^{-1} = I - m_i e_i^T$.
- **Veta**: Nech $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ má všetky vedúce hlavné minory nenulové. Potom A má jedinú LU faktorizáciu: $A = LU$, kde L je dolná trojuholníková matica s jednotkami na diagonále a U je horná trojuholníková matica.

LU rozklad A

- Algoritnus rozkladu môžeme napísať: nech sú dané matice $U = A$, $L = I$. Potom:

$$
\boxed{
\begin{array}{l}
\textbf{for } k = 0, 1, ..., n-1 \\
\quad \textbf{for } j = k+1, ..., n \\
\quad\quad l_{jk} = u_{jk} / u_{kk} \\
\quad\quad u_{j,k:n} = u_{j,k:n} - l_{jk} * u_{k,k:n} \\
\quad \textbf{end} \\
\textbf{end}
\end{array}
}
$$

- Maticu E_k sa neformuluje explicitne. Nenulové zložky vektra m_k za zapisujú s opačnym znamienkom pod diagonálu k-teho stĺpca L.
- Matice U a L (bez jednotiek na diagonále) možno ukladať do horného a dolného trojuholníka matice A. Teda maticu A nakoniec prepíšeme.
- Výpočtová zložitosť: $2n^3/3 + O(n^2)$ flops

Problém Gausovej eliminácie (GE) bez pivotizácie

- Algoritnus rozkladu môžeme zlyhat, t.j U, L budú nepresné.
- Majme maticu

$$A = \begin{pmatrix} 0.1 \times 10^{-3} & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \tag{12}$$

  v aritmetike s 3 číslicami v mantise bez ochrannej číslice spočítajte jej LU rozkad.

LU rozklad A, čiastočná pivotizácia

- Princíp čiastočnej pivotizácie: Pred výpočtom činiteľov v každom kroku nájsť v práve redukovanom stĺpci maximálny prvok (v absolútnej hodnote) a ten použiť ako pivot.
- V kroku k treba pivot dostať do pozície (k, k) treba zameniť riadky k a r_k , kde r_k je taký index, pre ktorý

$$|a_{r_k,k}^{(k-1)}| = max(|a_{i,k}^{(k-1)}|) \qquad (13)$$

  kde $k \leq i \leq n$. Výmena riadkov k a r_k je ekvivalentná násobeniu $P_k A^{(k-1)}$, kde P_k je permutačná matica, ktorá vznikne z identity I zámenou riadkov k a r_k.
- Permutačné matice P_k netreba explicitne počítať. Stačí do pomocného vektora ukladať za sebou indexy r_k , ktoré identifikujú výmenu riakov k a r_k v k-tom kroku algoritmu.

LU rozklad A, čiastočná pivotizácia

- Nech sú dané matice $U = A$, $L = I$ a pomocny vektor p. Potom:

```
for k = 0, 1, ..., n − 1
    Vyber i, k ≤ i ≤ n tak aby |u_ik| bolo maximálne
    u_{k,k:n} ↔ u_{i,k:n}
    p[k]=i;
    for j = k + 1, ..., n
        l_jk = u_jk / u_kk
        u_{j,k:n} = u_{j,k:n} − l_jk * u_{k,k:n}
    end
end
```

- Matice U a L (bez jednotiek na diagonále) možno ukladať do horného a dolného trojuholníka matice A. Teda maticu A nakoniec prepíšeme.
- Výpočtová zložitosť: $2n^3/3 + O(n^2)$ flops $+ O(n^2)$.

LU rozklad A, uplná pivotizácia

- Princíp uplnej pivotizácie: V kroku k sa pivot (t.j. prvok s najväčšou abs. hodnotou) hľadá v celej podmatici matice $A^{(k-1)}$ pod prvými $k-1$ riadkami. Ak je tento pivot $a_{rs}^{(k-1)}$, potom sa do pozície (k, k) dostane zámenou riadkov k a r a zámenou stlpcov k a s.
- Prechod $(k-1) \to k : A^{(k)} = E_k(P_k A^{(k-1)} Q_k)$,kde P_k je permutácia riadkov, Q_k je permutácia stĺpcov a E_k je elementárna matica, ktorá nuluje prvky v stĺpci k pod diagonálou.
- Výpočtová zložitosť: $2n^3/3 + O(n^2)$ flops $+ O(n^3)$.

LU rozklad A, stabilita

- Stabilita sa v tomto prípade 'meria' rastom prvkov v redukovaných maticiach $A^{(k)}$. Faktor rastu ρ je pomer najväčšieho prvku (v abs. hodnote) matíc $A, A^{(1)}, ..., A^{(n-1)}$ k najväčšiemu prvku (v abs. hodnote) matice A.
- Pre Gaussovu elimunáciu s úplnou pivotizáciou platí: $\rho \leq (n * 2^1 * 3^{1/2} * 4^{1/4} * ... * n^{1/(n-1)})^{1/2}$ a pre čiastočnú pivotizáciu je $\rho \leq 2^{n-1}$.
- V praxi sa GE s úplnou i čiastočnou pivotizáciou považuje za stabilný algoritmus.
- Pre Gaussovu elimináciu bez pivotizácie môže byť faktor rastu ľubovoľne veľký okrem špeciálnych prípadov.
- GE bez pivotizácie je pre všeobecnú maticu A nestabilný algoritmus. Používa sa napr. pre symetrické pozitívne definitné matice.