M5960 Vybrané partie z aplikované matematiky – seminář

QR-
-ROZKLAD

Petr Zemánek petr.zemanek@mail.muni.cz

Obsah

1. Trocha historie ... 2
2. Motivace ... 3
3. QR-rozklad ... 4
4. Konstrukce QR-rozkladu ... 5
    - 4.1 QR-rozklad pomocí Gram-Schmidtova algoritmu ... 5
    - 4.2 Householderova matice zrcadlení ... 7
    - 4.3 QR-rozklad pomocí Householderovy matice ... 10
    - 4.4 Givensova matice rovinné rotace ... 14
    - 4.5 QR-rozklad pomocí Givensovy matice ... 19
    - 4.6 Srovnání algoritmů ... 20
5. Aplikace QR-rozkladu ... 22
    - 5.1 Řešení systémů rovnic pomocí QR-rozkladu ... 22
    - 5.2 QR-rozklad a Moore-Penroseova zobecněná inverse ... 23
    - 5.3 QR-rozklad a vlastní čísla matice $\mathbf{A}$ – QR-algoritmus ... 24

Seznam použité literatury ... 26

1. Trocha historie

RUTISHAUSER, H.: Solution of Eigenvalue Problems with the LR-transformation. Nat. Bur. Standards Appl. Math. Ser., No. **49**, str. 47-81, 1958.

FRANCIS, J.G.F.: The QR Transformation: a Unitary Analogue to the LR Transformation I. The Computer Journal, **4**, str. 265-271, 1961/1962.

KUBLANOVSKAYA, V.N.: On Some Algorithms for the Solution of the Complete Eigenvalue Problem. U.S.S.R. Comput. Math. and Math. Phys., **3**, str. 637-657, 1961.

FRANCIS, J.G.F.: The QR Transformation: a Unitary Analogue to the LR Transformation II. The Computer Journal, **4**, str. 332-345, 1961/1962.

PARLETT, B.: The Development and Use of Methods of LR Type. SIAM Review, Vol. **6**(3), str. 275-295, 1964.

PARLETT, B.: Convergence of the QR Algorithm. Numerische Mathematik, **7**, str. 187-193, 1965.

TOP 10

DONGARRA, J. and SULLIVAN, F.: The top ten algorithms. Computing in Science and Engineering, 2000:

- Algoritmus *Metropolis* pro Monte Carlo.
- *Simplexová metoda* pro lineární programování.
- Iterace *Krylovových podprostorů*.
- Dekompenzační přístup k maticovým výpočtům – *Choleského metoda*, *QR-rozklad*, *LU-rozklad s pivotem*, *spektrální rozklad*, *Schurův rozklad*, *singulární rozklad*.
- Optimalizační kompilátor *Fortranu*.
- *QR-algoritmus* pro výpočet vlastních hodnot.
- *Quick sort*.
- *FFT* – rychlá Fourierova transformace.
- *Integer relation detection*.
- *FMM* – rychlá multipólová metoda.

2. Motivace

Řešení rovnic pomocí *Gaussovy eliminace* se dá zapsat jako rozklad na součin dvou matic $\mathbf{LU}$, kde $\mathbf{L}$ je dolní trojúhleníková matice a $\mathbf{U}$ je ve schodovitém tvaru, tzn. nulové řádky jsou až na konci a každý nenulový řádek začíná větším počtem nul než ten předchozí, např. $\begin{pmatrix} 2&2&3&4\\ 0&1&0&3\\ 0&0&0&1\\ 0&0&0&0 \end{pmatrix}$ – spec. pro regulární matice je $\mathbf{U}$ horní trojúhelníková, přičemž $\mathbf{L}$ lze chápat jako součin (řádkových) elementárních matic $I^{(i,\,j)}$ – což popisuje právě kroky v Gaussově eliminaci.
Podmíněnost soustavy (matice):

$$c(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|.$$

Řekneme, že matice $\mathbf{A}$ je *dobře podmíněná*, pokud $c(\mathbf{A}) \approx 1$, a že je *špatně podmíněná*, pokud $c(\mathbf{A}) \gg 1$.
Ovšem při Gaussově eliminaci platí pro podmíněnost $c(\mathbf{A}) \leq c(\mathbf{L})c(\mathbf{U})$, takže se celková podmíněnost ještě zhorší (výjimku tvoří pozitivně definitní matice, kde $\|\mathbf{A}\|_2 = \|\mathbf{L}\|_2^2$ a $c_2(\mathbf{A}) = c_2^2(\mathbf{L})$). Tomuto se můžeme vyhnout, pokud matici $\mathbf{A}$ rozložíme na součin ortogonální a horní trojúhelníkové matice, tedy na tzv. *QR-rozklad*.
Potom při řešení soustavy rovnic $\mathbf{A}x = \mathbf{QR}x = b \Rightarrow \mathbf{R}x = \mathbf{Q}^T b \Rightarrow x = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}^T b$. Neboť ortogonální transformace zachovává velikost euklidovské normy, bude $\|\mathbf{Q}\|_2 = 1$ a $c_2(\mathbf{Q}) = 1$, takže $\|\mathbf{A}\|_2 = \|\mathbf{R}\|_2$ a $c_2(\mathbf{A}) = c_2(\mathbf{R})$. Tedy nezhoršuje se podmíněnost dvou přechodných soustav $\mathbf{R}x = y$ a $\mathbf{Q}y = b$ ani nedochází k růstu prvků.

3. QR-rozklad

Definice 1. Dvojici matic $\mathbf{Q}$ a $\mathbf{R}$ nazveme *QR-rozkladem* matice $\mathbf{A}$, pokud platí, že

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR},$$

přičemž $\mathbf{Q}$ je ortogonální matice a $\mathbf{R}$ je horní trojúhelníková matice.

Věta 1. O existenci QR-rozkladu. *K libovolné reálné matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, kde $m \geq n$, existuje ortogonální matice $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ a horní trojúhelníková matice $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ tak, že platí $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$.*

Věta 2. O jednoznačnosti QR-rozkladu. *Jsou-li sloupce matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$, lineárně nezávislé, potom v QR-rozkladu jsou matice $\mathbf{R}$ a prvních n sloupců matice $\mathbf{Q}$ určeny až na znaménko jednoznačně.*

Důkaz: QR-rozklad existuje vždy, a jak později uvidíme, lze jej získat různými algoritmy. To ovšem nic nemění na tom, že pokud má matice $\mathbf{A}$ lineárně nezávislé sloupce, pak až na znaménka existuje právě jeden QR-rozklad.
Mějme dva takové QR-rozklady matice $\mathbf{A}$, tj. nechť

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}_1\mathbf{R}_1 = \mathbf{Q}_2\mathbf{R}_2.$$

Neboť platí

$$\mathbf{Q}_1\mathbf{R}_1 = \mathbf{Q}_2\mathbf{R}_2,$$

dostaneme

$$\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2^{-1} = \mathbf{Q}_1^{-1}\mathbf{Q}_2 = \mathbf{Q}_1^T\mathbf{Q}_2.$$

Dále také platí, že

$$(\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2^{-1})^{-1} = (\mathbf{Q}_1^T\mathbf{Q}_2)^{-1} = \mathbf{Q}_2^{-1}(\mathbf{Q}_1^T)^{-1} = \mathbf{Q}_2^T\mathbf{Q}_1 = (\mathbf{Q}_1^T\mathbf{Q}_2)^T = (\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2^{-1})^T,$$

tedy matice $\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2^{-1}$ je ortogonální a diagonální. Taková je však pouze matice $|\mathbf{E}|$. Takže

$$|\mathbf{R}_1\mathbf{R}_2^{-1}| = |\mathbf{E}|,$$

což znamená, že $|\mathbf{R}_1| = |\mathbf{R}_2|$, tedy i $|\mathbf{Q}_1| = |\mathbf{Q}_2|$. ■

4. Konstrukce QR-rozkladu

4.1 QR-rozklad pomocí Gram-Schmidtova algoritmu

Věta 3. **Gram-Schmidtův** QR**-rozklad.** *K libovolné reálné matici* $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$*, kde* $m \geq n$*, existuje ortogonální matice* $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ *a horní trojúhelníková matice* $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ *s nezápornými prvky na diagonále tak, že platí* $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$*. V případě lineárně nezávislých sloupců matice* $\mathbf{A}$ *jsou prvky na diagonále kladné.*

Základní myšlenka důkazu: Máme-li matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, pak aplikací zobecněného *Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu* na sloupce matice $\mathbf{A}$ (ty mohou být lineárně závislé i nezávislé) a doplněním těchto vektorů na bázi v $\mathbb{R}^m$ získáme sloupce matice $\mathbf{Q}$.
Uvažujme matici $\mathbf{A} = (a_1| \dots |a_n)$ složenou ze sloupcových vektorů. Pak

$$
\begin{aligned}
u_1 &= a_1, \quad \mathrm{e}_1 = \frac{u_1}{\|u_1\|}, \\
u_2 &= a_2 - \operatorname{proj}_{\mathrm{e}_1} a_2, \quad \mathrm{e}_2 = \frac{u_2}{\|u_2\|}, \\
u_3 &= a_3 - \operatorname{proj}_{\mathrm{e}_1} a_3 - \operatorname{proj}_{\mathrm{e}_2} a_3, \quad \mathrm{e}_3 = \frac{u_3}{\|u_3\|}, \\
&\vdots \\
u_k &= a_k - \sum_{j=1}^{k-1} \operatorname{proj}_{\mathrm{e}_j} a_k, \quad \mathrm{e}_k = \frac{u_k}{\|u_k\|},
\end{aligned}
$$

kde $\operatorname{proj}_u v = \frac{<v,\, u>}{<v,\, v>} u$. Po úpravě obdržíme vzorce pro vektory a_i

$$
\begin{aligned}
a_1 &= \mathrm{e}_1 \|u_1\|, \\
a_2 &= \operatorname{proj}_{\mathrm{e}_1} a_2 + \mathrm{e}_2 \|u_2\|, \\
a_3 &= \operatorname{proj}_{\mathrm{e}_1} a_3 + \operatorname{proj}_{\mathrm{e}_2} a_3 + \mathrm{e}_3 \|u_3\|, \\
&\vdots \\
a_k &= \sum_{j=1}^{k-1} \operatorname{proj}_{\mathrm{e}_j} a_k + \mathrm{e}_k \|u_k\|.
\end{aligned}
$$

Označme $\mathbf{Q} = (\mathrm{e}_1 \,|\, \dots \,|\, \mathrm{e}_n)$. Nyní máme

$$
\mathbf{R} = \mathbf{Q}^T \mathbf{A} = \begin{pmatrix}
< \mathrm{e}_1,\, a_1 > & < \mathrm{e}_1,\, a_2 > & < \mathrm{e}_1,\, a_3 > & \cdots & < \mathrm{e}_1,\, a_n > \\
0 & < \mathrm{e}_2,\, a_2 > & < \mathrm{e}_2,\, a_3 > & \cdots & < \mathrm{e}_2,\, a_n > \\
0 & 0 & < \mathrm{e}_3,\, a_3 > & \cdots & < \mathrm{e}_3,\, a_n > \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \dots & < \mathrm{e}_n,\, a_n >
\end{pmatrix},
$$

neboť $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{E}$ a $< \mathrm{e}_j,\, a_j >= \|u_j\|$, $< \mathrm{e}_j,\, a_k >= 0$ pro $j > k$.

Příklad 1. Proveďme QR-rozklad matice $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 12 & -51 & 4 \\ 6 & 167 & -68 \\ -4 & 24 & -41 \end{pmatrix}$. Gram-Schmidtovým procesem dostaneme

$$\mathbf{U} = (u_1 \mid u_2 \mid u_3) = \begin{pmatrix} 12 & -69 & -58 \\ 6 & 158 & 6 \\ -4 & 30 & -165 \end{pmatrix}.$$

Matici $\mathbf{Q}$ potom získáme jako

$$\mathbf{Q} = \left(\frac{u_1}{\|u_1\|} \;\middle|\; \frac{u_2}{\|u_2\|} \;\middle|\; \frac{u_3}{\|u_3\|} \right) = \begin{pmatrix} 6/7 & -69/175 & -58/175 \\ 3/7 & 158/175 & 6/175 \\ -2/7 & 6/35 & -33/35 \end{pmatrix}.$$

Pak $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$, takže

$$\mathbf{R} = \mathbf{Q}^T\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 14 & 21 & -14 \\ 0 & 175 & -70 \\ 0 & 0 & 35 \end{pmatrix}.$$

Algoritmus?

Mějme matici $\mathbf{A}$. Položme

$$r_{11} = \|a_1\|, \quad q_1 = \frac{a_1}{r_{11}},$$

pro $k = 2, \ldots, n$ spočítejme:

$$\begin{aligned} r_{jk} &= < q_j,\ a_k > \quad \text{pro } j = 1, \ldots, k-1, \\ z_k &= a_k - \sum_{j=1}^{k-1} r_{jk} q_j, \\ r_{kn}^2 &= < z_k,\ z_n > \\ q_k &= \frac{z_k}{r_{kk}}. \end{aligned}$$

Metodu lze také upravit tak, že zaměníme pořadí oprací. Tedy položme

$$\mathbf{A}^{\mathbf{0}} \equiv \mathbf{A}.$$

Pak pro $k = 2, \ldots, n$ spočtěme

$$\begin{aligned} r_{kk} &= \left\| a_k^{(k-1)} \right\|_2, \quad q_k = \frac{a_k^{(k-1)}}{r_{kk}}, \\ r_{ki} &= q_k^T a_i^{(k-1)} \quad \text{pro } i = k+1, \ldots, n, \\ \mathbf{A}^{(k)} &= \mathbf{A}^{(k-1)} - q_k r_k^T. \end{aligned}$$

Z formálního hlediska jde o změnu pořadí operací, ovšem z numerického hlediska obdržíme kvalitativně různé výsledky.

4.2 Householderova matice zrcadlení

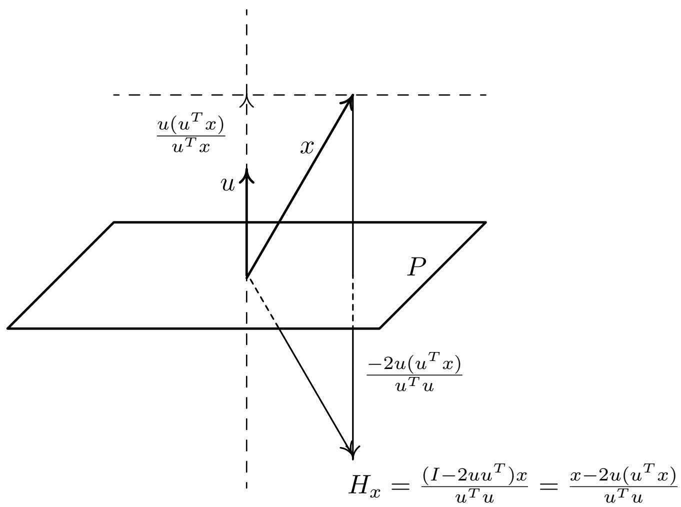
Definice 2. Matice tvaru

$$\mathbf{H}(u) := \mathbf{E} - \frac{2uu^T}{u^Tu} = \mathbf{E} - \frac{2uu^T}{\|u\|^2}$$

se nazývá *Householderova matice* (někdy též *elementární zrcadlení* (odraz), *Householderova transformace*).

Vlastnosti:

- označení *matice zrcadlení* se používá proto, že aplikujeme-li matici $\mathbf{H}(u)$ pro nějaké u na vektor $x \in \mathbb{R}^n$, pak je vektor $\mathbf{H}(u)x$ souměrný s vektorem x podle nadroviny ortogonální k vektoru v;



Obrázek 1: Householderova transformace – geometrický význam.

- matice $\mathbf{E}$ bývá považována za speciální případ Householderovy transformace – pro $u = 0$ je $\mathbf{H}(0) = \mathbf{E}$;
- $\|\mathbf{H}x\|_2 = \|x\|_2$ pro každé $x \in \mathbb{R}^n$, tj. zrcadlení tedy nemění délku vektoru;
- $\mathbf{H}y = y$ pro každé $y \in P = \{v \in \mathbb{R}^n \mid v^Tu = 0\}$.
- $\mathbf{H}$ má jednoduchou vlastní hodnotu -1 a $(n-1)$-násobnou vlastní hodnotu 1;

Důkaz: Neboť $y \in P = \{v \in \mathbb{R}^n \mid v^Tu = 0\}$ má $n-1$ lineárně nezávislých vektorů $y_1, \ldots, y_{n-1}$ a $\mathbf{H}y_i = y_i$ pro $i = 1, 2, \ldots, n-1$. Takže 1 je $(n-1)$-násobná vlastní hodnota. $\mathbf{H}$ také zrcadlí u na $-u$, tj. $\mathbf{H}u = -u$. Takže -1 je vlastní hodnota matice $\mathbf{H}$, která musí být jednoduchá, neboť $\mathbf{H}$ má pouze n vlastních hodnot. ∎

- z věty o spektrálním rozkladu plyne

$$\det(\mathbf{H}) = (-1)1 \cdots 1 = -1;$$

- Matice $\mathbf{H}$ je ortogonální a symetrická;

  Důkaz: Symetrie plyne z

  $$\mathbf{H}^T(u) = \mathbf{E}^T - 2\Big(\frac{uu^T}{u^T u}\Big)^T = \mathbf{E} - \frac{2uu^T}{\|u\|} = \mathbf{H}(u).$$

  Neboť platí

  $$\mathbf{H}^2(u) = \left(\mathbf{E} - \frac{2uu^T}{u^T u}\right)\left(\mathbf{E} - \frac{2uu^T}{u^T u}\right) = \mathbf{E}^2 - 4\frac{uu^T}{\|u\|^2} + 4\frac{uu^T uu^T}{\|u\|^4} = \mathbf{E},$$

  je matice $\mathbf{H}(u)$ ortogonální. ■

Historická poznámka 1. Poslední tvrzení, které má velmi široký význam především v aplikacích, dokázal v článku *Unitary Triangularization of a Nonsymmetric Matrix* z roku 1958 *Alston S. Householder* (1904-1993), americký matematik, který se zabýval numerickou analýzou.

Věta 4. *Pro každé dva vektory $y,\ z \in \mathbb{R}^n$ takové, že $y \neq z$ a $\|y\|_2 = \|z\|_2$, platí*

$$y = \mathbf{H}(y-z)z.$$

Jinými slovy, každé dva různé vektory o stejné normě lze převést jeden na druhý Householderovou transformací.

Důkaz: Platí

$$\begin{aligned}\mathbf{H}(y-z)z &= \Big(\mathbf{E} - \frac{2(y-z)(y-z)^T}{\|y-z\|_2^2}\Big)z = z - 2\frac{y^T z - \|z\|_2^2}{\|y-z\|_2^2}(y-z) = \\ &= z + \frac{\|y\|_2^2 + \|z\|_2^2 - 2y^T z}{\|y-z\|_2^2}(y-z) = z + \frac{\|y-z\|_2^2}{\|y-z\|_2^2}(y-z) = y.\end{aligned}$$

■

Důsledek 1. *Jsou-li $y,\ z$ dva vektory o stejné normě, potom existuje ortogonální matice $\mathbf{Q}$ taková, že $y = \mathbf{Q}z$.*

Důkaz: Pro $y \neq z$ stačí vzít $\mathbf{Q} = \mathbf{H}(y-z)$, jinak $\mathbf{Q} = \mathbf{E}$. ■

Věta 5. *Pro každé $x \in \mathbb{R}^n$ je*

$$\mathbf{H} = \begin{cases}\mathbf{H}(x + \operatorname{sgn}(x_1)\|x\|_2\, \mathrm{e}_1) & \textit{pro } x_1 \neq \|x\|_2, \\ \mathbf{E} & \textit{pro } x_1 = \|x\|_2\end{cases}$$

ortogonální matice s vlastností

$$\mathbf{H}x = \|x\|_2\, \mathrm{e}_1\,.$$

Neboli, aplikujeme-li vhodnou matici $\mathbf{H}$ na vektor x, dostaneme vektor, který má všechny složky až na první nulové.

Důkaz: Je-li $x_1 = \|x\|_2$, potom z $x_1^2 = x_1^2 + \cdots + x_n^2$ plyne, že $x_2 = \cdots = x_n = 0$. Tedy $x = x_1\,\mathrm{e}_1 = \|x\|^2\,\mathrm{e}_1 = \mathbf{E}x = \mathbf{H}x$.
Je-li $x_1 \neq \|x\|_2$, potom $x + \operatorname{sgn}(x_1)\|x\|_2\,\mathrm{e}_1 \neq 0$, takže vektory $y = \operatorname{sgn}(x_1)\|x\|_2\,\mathrm{e}_1$ a $z = x$ jsou různé a platí pro ně $\|y\|_2 = \|x\|_2 = \|z\|_2$, a odsud podle Věty 4 je

$$y = \operatorname{sgn}(x_1)\|x\|_2\,\mathrm{e}_1 = \mathbf{H}(y - z)z = \mathbf{H}(-x - \operatorname{sgn}(x_1)\|x\|_2\,\mathrm{e}_1)x.$$

■

Poznámka 1. Pro vektor určující Householderovu matici lze volit buď $+\|x\|_2\,\mathrm{e}_1$ nebo $-\|x\|_2\,\mathrm{e}_1$. Z důvodu minimalizace numerických chyb volíme stejné znaménko jako u první složky vektoru x.

Věta 6. *Pro každé x takové, že $\|x\|_2 = 1$, je*

$$\mathbf{H} = \begin{cases} \mathbf{H}(x + \operatorname{sgn}(x_1)\,\mathrm{e}_1) & \textit{pro } x \neq \mathrm{e}_1, \\ \mathbf{E} & \textit{pro } x = \mathrm{e}_1 \end{cases}$$

ortogonální matice, jejímž prvním sloupcem je vektor x.

Důkaz: Pro $x = \mathrm{e}_1$ je zřejmý.
Nechť tedy $x \neq \mathrm{e}_1$. Protože $\|x\|_2 = 1 = \|\mathrm{e}_1\|_2$, je podle Věty 5

$$x = \mathbf{H}(x + \operatorname{sgn}(x_1)\,\mathrm{e}_1) = \mathbf{H}e_1 = \mathbf{H}_{\bullet 1},$$

což je tvrzením věty. ■

Díky těmto větám tedy umíme najít vektor u tak, že daný nenulový vektor x se transformuje na vektor, který má nenulovou pouze první složku.

Příklad 2. Lze

$$x = (-1,\ -2,\ 7)^T \xrightarrow{\mathbf{H}(u)} (\alpha,\ 0,\ 0)^T?$$

Protože $\|x\|_2 = 3\sqrt{6}$, položíme $u = x - \|x\|_2\,\mathrm{e}_1 = (-1 - 3\sqrt{6},\ -2,\ 7)^T$ a $\|u\|_2 = 6(18 + \sqrt{6}\,)$. Dále

$$uu^T = \begin{pmatrix} -1 - 3\sqrt{6} \\ -2 \\ 7 \end{pmatrix} (-1 - 3\sqrt{6},\ -2,\ 7) = \begin{pmatrix} 55 + 6\sqrt{6} & 2 + 6\sqrt{6} & -7 - 21\sqrt{6} \\ 2 + 6\sqrt{6} & 4 & -14 \\ -7 - 21\sqrt{6} & -14 & 49 \end{pmatrix},$$

takže

$$\mathbf{H}(u) = \frac{1}{3(18 + \sqrt{6}\,)} \begin{pmatrix} -1 - 3\sqrt{6} & -2 - 6\sqrt{6} & 7 + 21\sqrt{6} \\ -2 - 6\sqrt{6} & 50 + 3\sqrt{6} & 14 \\ 7 + 21\sqrt{6} & 14 & 5 + 3\sqrt{6} \end{pmatrix}.$$

Snadno lze ověřit, že

$$\mathbf{H}(u)x = (3\sqrt{6},\ 0,\ 0)^T.$$

4.3 QR-rozklad pomocí Householderovy matice

Věta 7. Householderův QR-rozklad. *Každou matici* $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ *lze pomocí* $s = \min\{n,\ m-1\}$ *Householderových matic rozložit na součin* $\mathbf{QR}$*, a to tak, že platí*

$$\mathbf{H}_s \cdots \mathbf{H}_2\mathbf{H}_1\mathbf{A} = \mathbf{Q}^T\mathbf{A} = \begin{cases} \left(\begin{smallmatrix}\mathbf{R}_1\\ 0\end{smallmatrix}\right) & m > n,\\ (\mathbf{R}_1,\ 0) & m < n,\\ \mathbf{R} & m = n.\end{cases}$$

Mějme reálnou matici $\mathbf{A}$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{m1} & \cdots & a_{mn}\end{pmatrix}.$$

Krok 1.: Zkonstruujme Householderovu matici $\mathbf{H}_1$ tak, aby $\mathbf{H}_1\mathbf{A}$ měla v prvním sloupci pouze samé 0 s výjimkou pozice $(1,\ 1)$, tj. aby

$$\mathbf{H}_1\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \boxplus & \cdots\\ 0 & \cdots\\ \vdots & \vdots\\ 0 & \cdots\end{pmatrix}.$$

K tomu stačí získat vektor u_n (dle předchozího) tak, že pro

$$\mathbf{H}_1 = \mathbf{E} - 2\frac{u_n u_n^T}{u_n^T u_n}$$

platí

$$\mathbf{H}_1 \begin{pmatrix} a_{11}\\ a_{21}\\ \vdots\\ a_{m1}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}.$$

Označme $\mathbf{A}^{(1)} := \mathbf{H}_1\mathbf{A}$. Ta je tvaru

$$\mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots\\ 0 & \cdots\\ \vdots & \vdots\\ 0 & \cdots\end{pmatrix}.$$

Krok 2.: Zkonstruujme Householderovu matici $\mathbf{H}_2$ tak, že $\mathbf{H}_2\mathbf{A}^{(1)}$ má ve druhém sloupci 0 „pod pozicí $(2,\ 2)$" při zachování požadavku prvního kroku, tj.

$$\mathbf{A}^{(2)} := \mathbf{H}_2\mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} \boxplus & \square & \cdots\\ 0 & \boxplus & \cdots\\ 0 & 0 & \\ \vdots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots\end{pmatrix}.$$

Matici $\mathbf{H}_2$ získáme takto: Nejdříve zkonstruujeme Householderovu matici o rozměru $(m-1)\times(n-1)$

$$\widehat{\mathbf{H}}_2 := \mathbf{E}_{n-1} - 2\frac{u_{n-1}u_{n-1}^T}{u_{n-1}^T u_{n-1}}$$

takovou, že

$$\widehat{\mathbf{H}}_2 \begin{pmatrix} a_{22} \\ a_{32} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

a definujme

$$\mathbf{H}_2 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \widehat{\mathbf{H}}_2 & \\ 0 & & & \end{pmatrix}.$$

Tím získáme matici $\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{H}_2\mathbf{A}^{(1)}$.
Analogicky pokračujeme dále.

Pro $k \leq s$.
Krok k-tý: Obecně vytváříme Householderovu matici

$$\widehat{\mathbf{H}}_k := \mathbf{E}_{n-k+1} - 2\frac{u_{n-k+1}u_{n-k+1}^T}{u_{n-k+1}^T u_{n-k+1}}$$

o rozměru $(m-k+1)\times(n-k+1)$ takovou, že

$$\widehat{\mathbf{H}}_k \begin{pmatrix} a_{kk} \\ \vdots \\ a_{mk} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Definujeme

$$\mathbf{H}_k := \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{k-1} & 0 \\ 0 & \widehat{\mathbf{H}}_k \end{pmatrix},$$

čili můžeme spočítat $\mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{H}_k\mathbf{A}^{(k-1)}$.

Tímto způsobem po s krocích obdržíme matici $\mathbf{A}^{(s)}$, která bude v horním trojúhelníkovém tvaru a bude právě maticí $\mathbf{R}$.
Protože

$$\mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{H}_k\mathbf{A}^{(k-1)} \quad k = 2, \ldots, s,$$

máme

$$\mathbf{R} = \mathbf{A}^{(s)} = \mathbf{H}_s\mathbf{A}^{(s-1)} = \mathbf{H}_s\mathbf{H}_{s-1}\mathbf{A}^{(s-2)} = \cdots = \mathbf{H}_s\mathbf{H}_{s-1}\cdots\mathbf{H}_2\mathbf{H}_1\mathbf{A}.$$

Položme

$$\mathbf{Q}^T = \mathbf{H}_s\mathbf{H}_{s-1}\cdots\mathbf{H}_2\mathbf{H}_1.$$

Máme naši hledanou ortogonální matici (neboť každá z $\mathbf{H}_i$ je ortogonální). Celkem

$$\mathbf{R} = \mathbf{Q}^T \mathbf{A},$$

tj.

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR}.$$

(Uvědomme si, že $\mathbf{Q} = \mathbf{H}_1^T \mathbf{H}_2^T \cdots \mathbf{H}_s^T = \mathbf{H}_1 \mathbf{H}_2 \cdots \mathbf{H}_s$.)

Příklad 3. Uvažme matici

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Krok 1.: Konstrukce $\mathbf{H}_1$.

$$\mathbf{H}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Potom tedy dle Příkladu 2 spočteme

$$u_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

takže

$$\mathbf{H}_1 = \mathbf{E}_3 - 2\frac{u_3 u_3^T}{u_3^T u_3} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Určeme

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{H}_1 \mathbf{A} = \begin{pmatrix} -\sqrt{2} & -\frac{3\sqrt{2}}{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & -\frac{1-\sqrt{2}}{2} & -\frac{2-\sqrt{2}}{2} \\ 0 & -\frac{1+\sqrt{2}}{2} & -\frac{2+\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}.$$

Krok 2.: Zkonstruujeme

$$\widehat{\mathbf{H}}_2 = \begin{pmatrix} -0,2071 \\ -1,2071 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$u_2 = \begin{pmatrix} -0,2071 \\ -1,2071 \end{pmatrix} - 1,2247 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1,4318 \\ -1,2071 \end{pmatrix},$$

$$\widehat{\mathbf{H}}_2 = \begin{pmatrix} -0,1691 & -0,9856 \\ -0,9856 & 0,1691 \end{pmatrix},$$

tzn.

$$\mathbf{H}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0,1691 & -0,9856 \\ 0 & -0,9856 & 0,1691 \end{pmatrix},$$

a spočítáme

$$\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{H}_2 \mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{H}_2 \mathbf{H}_1 \mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1,4142 & -2,1213 & -2,8284 \\ 0 & 1,2247 & 1,6330 \\ 0 & 0 & -0,5774 \end{pmatrix} = \mathbf{R}$$

Pro $\mathbf{Q}$ nyní platí

$$\mathbf{Q} = \mathbf{H}_2\mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0,8165 & 0,5774 \\ -0,7071 & 0,4082 & -0,5774 \\ -0,7071 & -0,4082 & 0,5774 \end{pmatrix}.$$

Celkem tedy

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0,8165 & 0,5774 \\ -0,7071 & 0,4082 & -0,5774 \\ -0,7071 & -0,4082 & 0,5774 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1,4142 & -2,1213 & -2,8284 \\ 0 & 1,2247 & 1,6330 \\ 0 & 0 & -0,5774 \end{pmatrix} = \mathbf{QR}.$$

Příklad 4. Uvažme nyní obdélníkovou matici

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0,0001 & 0 \\ 0 & 0,0001 \end{pmatrix}.$$

Platí $s = \min\{2,\ 2\}$.
Krok 1.: Konstrukce $\mathbf{H}_1$.

$$u_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0,0001 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{1 + 0,0001^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0,0001 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_1 = \mathbf{E}_3 - 2\frac{u_2 u_2^T}{u_2^T u_2} = \begin{pmatrix} -1 & -0,0001 & 0 \\ -0,0001 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{H}_1\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & -0,0001 \\ 0 & 0,0001 \end{pmatrix}.$$

Krok 2.: Zkonstruujeme $\widehat{\mathbf{H}}_2$.

$$u_1 = \begin{pmatrix} -0,0001 \\ 0,0001 \end{pmatrix} - \sqrt{(-0,0001)^2 + 0,0001^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 10^{-4} \begin{pmatrix} -2,4141 \\ 0,1000 \end{pmatrix},$$

$$\widehat{\mathbf{H}}_2 = \begin{pmatrix} -0,7071 & 0,7071 \\ 0,7071 & 0,7071 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0,7071 & 0,7071 \\ 0 & 0,7071 & 0,7071 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{H}_2\mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 0,0001 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{H}_2\mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0,0001 & -0,0001 \\ -0,0001 & -0,7071 & 0,7071 \\ 0 & 0,7071 & 0,7071 \end{pmatrix}$$

a

$$\mathbf{R}_1 = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 0,0001 \end{pmatrix}.$$

Celkem tedy

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0,0001 & 0 \\ 0 & 0,0001 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0,0001 & -0,0001 \\ -0,0001 & -0,7071 & 0,7071 \\ 0 & 0,7071 & 0,7071 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 0,0001 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{QR}.$$

Poznámka 2. Pokud matice **A** nemá zaručenu plnou hodnost, je vhodné upravit výpočet tak, abychom případné nulové (resp. „malé“) diagonální prvky r_{kk} dostali až na závěr výpočtu. Můžeme modifikovat QR-rozklad výběrem největšího sloupce v normě – tzv. *QR-rozklad s pivotem.*
Znamená to, že QR-rozklad matice $\mathbf{AP} = \mathbf{QR}$, kde $\mathbf{P} = \mathbf{P}_1\mathbf{P}_2 \cdots \mathbf{P}_s$ a $\mathbf{P}_k$ je permutační matice výměny k-tého a j_0-tého sloupce v k-tém kroku metody (v případě, že řešíme soustavu rovnic, je třeba učinit příslušné permutace i složek vektoru řešení). V této modifikaci bude pro matici **R** platit

$$r_{kk}^2 \geq \sum_{i=k}^{j} |r_{ij}|^2, \quad j = k+1, \ \ldots, \ n,$$

tedy také $|r_{11}| > \cdots > |r_{nn}|$. Nulové, resp. „téměř lineárně závislé“ sloupce se takto přesunou na „konec“ matice a snadno se budou moci v případě potřeby oddělit. Později uvidíme výhody této modifikace. Stejné výsledky obdržíme i v *modifikovaném Gram-Schmidtově postupu s výběrem pivota*, pokud ještě před k-tým krokem najdeme index i_0 tak, že $\|a_{i_0}\|_2 = \max \|a_i^{(k-1)}\|_2$ a vyměníme i_0-tý a k-tý sloupec matice $\mathbf{A}^{(k-1)}$.

4.4 Givensova matice rovinné rotace

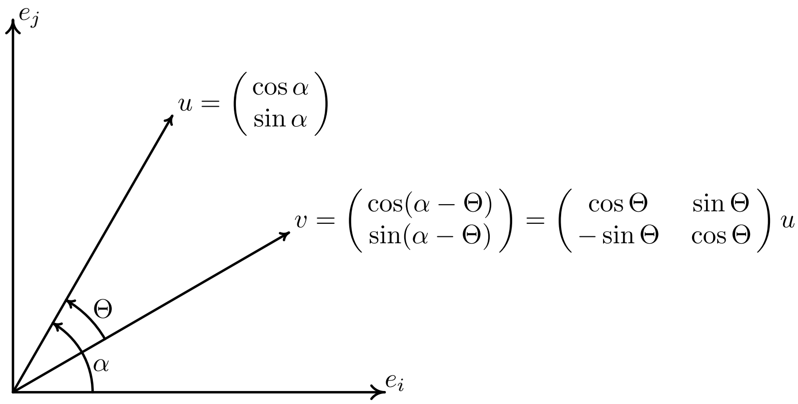
Definice 3. Matice tvaru

$$\mathbf{G}(i,\ j,\ c,\ s) := \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & c & \cdots & s & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & -s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{E} + (c-1)(\mathrm{e}_i\, \mathrm{e}_i^T + \mathrm{e}_j\, e_j^T) + s(\mathrm{e}_i\, \mathrm{e}_i^T - \mathrm{e}_j\, e_j^T),$$

kde $c^2 + s^2 = 1$, se nazývá *Givensova matice.*

Historická poznámka 2. Matice nese jméno amerického matematika *Wallace Givense* (1910-1993), který se zabýval především numerickou analýzou.

Můžeme volit $c = \cos\Theta$ a $s = \sin\Theta$ pro nějaké Θ. Pak značíme Givensovu matici jako $\mathbf{G}(i,\ j,\ \Theta)$. Geometricky můžeme matici $\mathbf{G}(i,\ j,\ \Theta)$ chápat jako rotaci (otočení) R^n kolem počátku o úhel Θ v rovině $(\mathrm{e}_i,\ \mathrm{e}_j)$. To je také důvod, proč se matice nazývá i *Givensova matice rotace* nebo *Givensova matice rovinné rotace v* $(\mathrm{e}_i,\ \mathrm{e}_j)$ *rovině.*



Obrázek 2: Givensova transformace – geometrický význam.

Givensova matice je ortogonální, neboť z $c^2 + s^2 = 1$ plyne

$$\mathbf{G}^T(i,\ j,\ \Theta)\mathbf{G}(i,\ j,\ \Theta) = \mathbf{G}(i,\ j,\ \Theta)\mathbf{G}^T(i,\ j,\ \Theta) = \mathbf{E}.$$

Vzhledem k tvaru matice $\mathbf{G}$ platí, že pokud jí vynásobíme nějaký vektor

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix},$$

tak se změní pouze i-tá a j-tá komponenta vektoru x, ostatní se nezmění.
Pokud máme vektor $x = \left(\begin{smallmatrix} x_1 \\ x_2 \end{smallmatrix}\right)$, pak lze snadno ověřit, že při volbě

$$c = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}, \qquad s = \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \tag{1}$$

(pak totiž platí $-x_1 \sin\Theta + x_2 \cos\Theta = 0$) bude pro

$$\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta) = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$$

platit

$$\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus \\ 0 \end{pmatrix},$$

tedy „vynulujeme" druhou složku vektoru x.
Chceme-li „vynulovat" první složku vektoru x, položíme

$$c = -\frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}, \qquad s = \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}.$$

Příklad 5. Nechť

$$x = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

Položme (dle vztahu (1)) $c = \frac{3}{5}$ a $s = \frac{4}{5}$. Transformací Givensovou maticí dostaneme

$$\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta)x = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Při násobení vektoru x^T zprava obdržíme

$$x^T \mathbf{G}^T(1,\ 2,\ \Theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Při volbě $c = -\frac{4}{5}$ a $s = \frac{3}{5}$ dostaneme

$$\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta)x = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

a

$$x^T \mathbf{G}^T(1,\ 2,\ \Theta) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

„Nulování“ na specifických pozicích

Givensova rotace je zvláště užitečná, pokud chceme „vytvořit“ nulu na určité pozici ve vektoru. Nechť

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

a požadujme pouze nulu na pozici x_k. Můžeme sestrojit rotaci $\mathbf{G}(i,\ k,\ \Theta)$ $(i < k)$ tak, že $\mathbf{G}(i,\ k,\ \Theta) \cdot x$ bude mít nulu na k-té pozici.

Konstrukce: Nejdříve sestavíme 2×2 Givensovu matici $\mathbf{G}(i,\ k,\ \Theta) = \left(\begin{smallmatrix} c & s \\ -s & c \end{smallmatrix}\right)$, tak aby

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ x_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Tvar matice $\mathbf{G}(i,\ k,\ \Theta)$ získáme tak, že na pozice $(i,\ i)$ a $(k,\ k)$ vložíme „c“, na pozici $(i,\ k)$ vložíme „s“ a na pozici $(k,\ i)$ vložíme „$-s$“, zbytek doplníme na identickou matici.

Příklad 6. Buď

$$x = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Sestavme Givensovu matici tak, aby „vytvořila“ nulu na třetí pozici, tj. $k = 3$.
Zvolme $i = 3$.
Krok 1.:

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus \\ 0 \end{pmatrix},$$

kde $c = -\frac{1}{\sqrt{10}}$, $s = \frac{3}{\sqrt{10}}$.
Krok 2.:

$$\mathbf{G}(2,\ 3,\ \Theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \\ 0 & -\frac{3}{\sqrt{10}} & -\frac{1}{\sqrt{10}} \end{pmatrix}.$$

Pak

$$\mathbf{G}(2,\ 3,\ \Theta)x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \\ 0 & -\frac{3}{\sqrt{10}} & -\frac{1}{\sqrt{10}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{10} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Nulování všech prvků ve vektoru pod pozicí $(1,\ 1)$

Mějme n-vektor x. Jestliže požadujeme nulu na všech pozicích v x s výjimkou první, musíme sestrojit

$$\begin{aligned} &\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta), \\ x^{(1)} &= \mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta)x, \\ x^{(2)} &= \mathbf{G}(1,\ 3,\ \Theta)x^{(1)}, \\ x^{(3)} &= \mathbf{G}(1,\ 4,\ \Theta)x^{(2)}, \\ &\vdots \\ x^{(n)} &= \mathbf{G}(1,\ n,\ \Theta)x^{(n-1)}. \end{aligned}$$

Pak pro matici

$$\mathbf{P} := \mathbf{G}(1,\ n,\ \Theta) \cdots \mathbf{G}(1,\ 3,\ \Theta)\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta)$$

platí, že $\mathbf{P}x$ je násobek vektoru e_1. Protože každá rotace je orotgonální, je ortogonální i matice $\mathbf{P}$.

Příklad 7. Buď

$$x = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Nyní

$$\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

$$x^{(1)} = \mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta)x = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{G}(1,\ 3,\ \Theta) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{6}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{2}{\sqrt{6}} & 0 & \sqrt{\frac{2}{6}} \end{pmatrix}.$$

Dále

$$\mathbf{G}(1,\ 3,\ \Theta)x^{(1)} = \begin{pmatrix} \sqrt{6} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Tedy

$$\mathbf{P} = \mathbf{G}(1,\ 3,\ \Theta)\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\sqrt{\frac{2}{6}} & \sqrt{\frac{2}{6}} & \sqrt{\frac{2}{6}} \end{pmatrix}$$

a

$$\mathbf{P}x = \begin{pmatrix} \sqrt{6} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Vytváření nul v maticích

Myšlenku nulování určitého prvku ve vektoru lze triviálně převést na vytváření nul na specifických pozicích matice.
Pokud chceme vytvořit nulu na pozici $(j,\ i)$, $j > i$, můžeme to udělat tak, že zkonstruujeme Givensovu matici $\mathbf{G}(i,\ j,\ \Theta)$ působící pouze na i-tý a j-tý řádek tak, že $\mathbf{G}(i,\ j,\ \Theta)A$ bude mít nulu na pozici $(j,\ i)$.

Příklad 8. V matici

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 3 & 4 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix}$$

vytvořme nulu na pozici $(2,\ 1)$ s pomocí matice $\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta)$.
Krok 1.: Najdeme c a s tak, aby platilo

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{ii} \\ a_{ji} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Takže

$$c = \frac{1}{\sqrt{10}}, \quad s = \frac{3}{\sqrt{10}}.$$

Krok 2.: Sestavení $\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta)$. Je

$$\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} & 0 \\ -\frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{10}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

pak

$$\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta)\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{10}{\sqrt{10}} & \frac{11}{\sqrt{10}} & \frac{15}{\sqrt{10}} \\ 0 & -\frac{3}{\sqrt{10}} & -\frac{5}{\sqrt{10}} \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix}.$$

4.5 QR-rozklad pomocí Givensovy matice

Opět chceme setrojit matice $\mathbf{Q}_1$, $\mathbf{Q}_2$, …, $\mathbf{Q}_s$ tentokrát však pomocí Givensových matic tak, aby $\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{Q}_1\mathbf{A}$ měla nuly pod prvkem $(1,\ 1)$ v prvním sloupci, matice $\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{Q}_2\mathbf{A}^{(1)}$ měla nuly pod $(2,\ 2)$ ve druhém sloupci, atd. Každou z matic $\mathbf{Q}_i$ lze sestrojit jako součin Givensových matic – ten je možné sestrojit takto:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{Q}_1 : &= \mathbf{G}(1,\ m,\ \Theta)\mathbf{G}(1,\ m-1,\ \Theta)\cdots\mathbf{G}(1,\ 3,\ \Theta)\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta)\\
\mathbf{Q}_2 : &= \mathbf{G}(2,\ m,\ \Theta)\mathbf{G}(2,\ m-1,\ \Theta)\cdots\mathbf{G}(2,\ 3,\ \Theta)\\
&\vdots
\end{aligned}
$$

Buď $s = \min\{m-1,\ n\}$. Pak

$$\mathbf{R} = \mathbf{A}^{(s)} = \mathbf{Q}_s\mathbf{A}^{(s-1)} = \cdots = \mathbf{Q}_s\mathbf{Q}_{s-1}\cdots\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_1\mathbf{A} = \mathbf{Q}^T\mathbf{A}.$$

Nyní máme $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$, kde $\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}_s\cdots\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_1$. To lze zformulovat do následující věty.

Věta 8. Givensův QR-rozklad. *Buď $\mathbf{A}$ matice $m\times n$ a nechť $s = \min\{m-1,\ n\}$. Existuje s ortogonálních matic $\mathbf{Q}_1$, …, $\mathbf{Q}_s$ definovaných jako*

$$\mathbf{Q}_i := \mathbf{G}(i,\ m,\ \Theta)\mathbf{G}(i,\ m-1,\ \Theta)\cdots\mathbf{G}(i,\ i+1,\ \Theta),$$

že pro

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_1^T\mathbf{Q}_2^T\cdots\mathbf{Q}_s^T$$

platí

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R},$$

kde $\mathbf{R}$ je matice $m\times n$ s nulami pod hlavní diagonálou.

Znázorněme si schématicky Givensovu metodu redukce matice $\mathbf{A}\in \mathrm{R}^{3\times 3}$ na horní trojúhelníkový tvar (symbol $\bullet$ značí prvky, které se transformací nezměnily, a $\pm$ značí prvky, které se změnily):

$$
\mathbf{A} = \begin{pmatrix}\bullet & \bullet & \bullet\\ \bullet & \bullet & \bullet\\ \bullet & \bullet & \bullet\end{pmatrix}
\xrightarrow{\mathbf{G}(1,\,2,\,\Theta)}
\begin{pmatrix}\pm & \pm & \pm\\ 0 & \pm & \pm\\ \bullet & \bullet & \bullet\end{pmatrix}
\xrightarrow{\mathbf{G}(1,\,3,\,\Theta)}
$$

$$
\xrightarrow{\mathbf{G}(1,\,3,\,\Theta)}
\begin{pmatrix}\pm & \pm & \pm\\ 0 & \bullet & \bullet\\ 0 & \pm & \pm\end{pmatrix}
\xrightarrow{\mathbf{G}(2,\,3,\,\Theta)}
\begin{pmatrix}\bullet & \bullet & \bullet\\ 0 & \pm & \pm\\ 0 & 0 & \pm\end{pmatrix} = \mathbf{R}.
$$

Příklad 9. Nechť

$$A = \begin{pmatrix}0 & 1 & 1\\ 1 & 2 & 3\\ 1 & 1 & 1\end{pmatrix}.$$

Krok 1.: Najděme c a s tak, aby

$$\begin{pmatrix}c & s\\ -s & c\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_{11}\\ a_{21}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\boxplus\\ 0\end{pmatrix}.$$

Neboť $a_{11} = 0$ a $a_{21} = 1$, musí být $c = 0$ a $s = 1$, tedy

$$\mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Pak dostneme

$$\widetilde{\mathbf{A}} = \mathbf{G}(1,\ 2,\ \Theta)\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Nyní najděme c a s tak, aby

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widetilde{a}_{11} \\ \widetilde{a}_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Neboť $\widetilde{a}_{11} = 1$ a $\widetilde{a}_{31} = 1$, bude $c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ a $s = \frac{1}{\sqrt{2}}$, tedy

$$\mathbf{G}(1,\ 3,\ \Theta) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Celkem

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{G}(1,\ 3,\ \Theta)\widetilde{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \frac{3}{\sqrt{2}} & 2\sqrt{2} \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Krok 2.: Určeme c a s tak, aby

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{22}^{(1)} \\ a_{32}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxplus \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Neboť $a_{22}^{(1)} = -1$ a $a_{32}^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}}$, bude $c = -\sqrt{\frac{2}{3}}$ a $s = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, tedy

$$\mathbf{G}(1,\ 3,\ \Theta)\mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \frac{3}{\sqrt{2}} & 2\sqrt{2} \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \frac{3}{\sqrt{2}} & 2\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 2\sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} = R.$$

Což je tentýž výsledek jako v Příkladě 3.

4.6 Srovnání algoritmů

Při výpočtu QR-rozkladu pomocí Householderovy matice je počet provedených operací roven číslu

$$n^2(3 - \frac{n}{3}).$$

K explicitnímu vyjádření matice $\mathbf{Q}$ je navíc potřeba

$$2(m^2n - mn^2 + \frac{1}{3}n^3)$$

operací, tedy celkem

$$2m^2n - mn^2 + \frac{1}{3}n^3.$$

Zatímco pro QR-rozklad pomocí Givensovy matice je tento počet dvojnásobný, tj.

$$2n^2(3 - \frac{n}{3}).$$

Ovšem pokud v metodě s Givensovou maticí nahradíme matici rotace $\left(\begin{smallmatrix} c & s \\ -s & c \end{smallmatrix}\right)$ a matice odrazu $\left(\begin{smallmatrix} c & s \\ s & -c \end{smallmatrix}\right)$ maticemi $\left(\begin{smallmatrix} 1 & a \\ -a & 1 \end{smallmatrix}\right)$ a $\left(\begin{smallmatrix} a & 1 \\ 1 & -a \end{smallmatrix}\right)$ s ortogonálními sloupci, pak se nám podaří snížit počet operací na úroveň metody využívající Householderovy matice – jedná se o tzv. *matice rychlé Givensovy transformace.*

Householderova matice má však tu nevýhodu, že v matici, kterou ji násobíme, nám změní všechny prvky (zatímco Givensova matice jen i-tý a k-tý řádek), takže nám například může z řídké matice vytvořit matici plnou.

V modifikované metodě s Gram-Schmidtovým algoritmem je počet operací

$$mn^2.$$

5. Aplikace QR-rozkladu

5.1 Řešení systémů rovnic pomocí QR-rozkladu

Při řešení soustavy $\mathbf{A}x = b$ pomocí Gaussovy eliminace (tj. pomocí LU-rozkladu) je nutné provést $\frac{mn^2}{2} - \frac{n^3}{6}$ operací. Tedy méně než při QR-rozkladu. Ovšem na rozdíl od LU-rozkladu existuje QR-rozklad vždy, je jednoznačný, numericky stabilnější a nezvyšuje podmíněnost soustavy.
Mějme tedy soustavu

$$\mathbf{A}x = b$$

s regulární $n \times n$ maticí $\mathbf{A}$ a její rozklad, tj. nechť $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$. Pak můžeme soustavu přepsat

$$\mathbf{QR} = b,$$

tedy

$$\mathbf{R}x = \mathbf{Q}^T b = b^{'},$$

kde $\mathbf{R}$ je horní trojúhelníková matice, a její řešení lze nalézt pomocí zpětné substituce.

Příklad 10. Nechť

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Z Příkladu 3 víme, že

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} -1,4142 & -2,1213 & -2,8284 \\ 0 & 1,2247 & 1,6330 \\ 0 & 0 & -0,5770 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0,7071 & -0,7071 \\ -0,7071 & 0,5 & -0,5 \\ -0,7071 & -0,5 & 0,5 \end{pmatrix}$$

a

$$\mathbf{H}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0,1691 & -0,9856 \\ 0 & -0,9856 & 0,1691 \end{pmatrix}.$$

Vypočítejme $b^{'}$. Dostáváme

$$y_1 = b = \begin{pmatrix} 2 \\ 6 \\ 3 \end{pmatrix},$$

$$y_2 = \mathbf{H}_1 y_1 = \begin{pmatrix} -6,3640 \\ 0,0858 \\ -2,9145 \end{pmatrix},$$

a tedy

$$b^{'} = y_3 = \mathbf{H}_2 y_2 = \begin{pmatrix} -6,3640 \\ 2,8577 \\ -0,5774 \end{pmatrix}.$$

Vektor $b^{'}$ lze spočítat bez explicitního vyjádření matice $\mathbf{Q}$ – proto je výhodnější použití QR-rozkladu pomocí Householderových matic.
Vyřešme

$$\mathbf{R}x = b^{'}.$$

$$\begin{pmatrix} -1,4142 & -2,1213 & -2,8284 \\ 0 & 1,2247 & 1,6330 \\ 0 & 0 & -0,5770 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -6,3640 \\ 2,8577 \\ -0,5774 \end{pmatrix},$$

což dává řešení

$$x = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

5.2 QR-rozklad a Moore-Penroseova zobecněná inverse

Definice 4. Matici $\mathbf{A}^{\dagger} \in \mathrm{R}^{n \times m}$ nazveme *pseudoinversní maticí* k matici $\mathbf{A} \in \mathrm{R}^{m \times n}$, jestliže pro ni platí

- $\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{A}\mathbf{A}^{\dagger} = \mathbf{A}^{\dagger}$,
- $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{A} = \mathbf{A}$,
- $(\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{A})^T = \mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{A}$,
- $(\mathbf{A}\mathbf{A}^{\dagger})^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^{\dagger}$.

Přičemž lze dokázat, že matice $\mathbf{A}^{\dagger}$ je určena jednoznačně.

Věta 9. *Má-li matice $\mathbf{A}$ lineárně nezávislé sloupce, je matice $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ regulární a platí*

$$\mathbf{A}^{\dagger} = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T.$$

Důkaz: I. Předpokládejme, že $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ není regulární. Pak existuje nenulový vektor y tak, že $\mathbf{A}^T\mathbf{A}y =$ $= 0$. Potom však

$$0 = y^T\mathbf{A}^T\mathbf{A}y = < \mathbf{A}y,\ \mathbf{A}y >,$$

tedy $\mathbf{A}y = 0$, což je spor s tím, že sloupce matice $\mathbf{A}$ jsou lineárně nezávislé.
II. Stačí ověřit, že matice $(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T$ splňuje podmínky definice pseudoinversní matice. ■

Pro matici s lineárně nezávislými sloupci lze použít QR-rozklad i na výpočet pseudoinversní matice.

Věta 10. *Nechť matice $\mathbf{A}$ má lineárně nezávislé sloupce a nechť $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ je její QR-rozklad. Potom pro pseudoinversní matici $\mathbf{A}^{\dagger}$ platí*

$$\mathbf{A}^{\dagger} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}^T.$$

Důkaz: Nechť $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$. Podle předchozí věty platí, že $\mathbf{A}^{\dagger} = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T$, takže

$$\mathbf{A}^{\dagger} = (\mathbf{R}^T\mathbf{Q}^T\mathbf{QR})^{-1}\mathbf{R}^T\mathbf{Q}^T = \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{R}^T)^{-1}\mathbf{R}^T\mathbf{Q}^T = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}^T.$$

■

5.3 QR-rozklad a vlastní čísla matice $\mathbf{A}$ – QR-algoritmus

Základní *QR-algoritmus*: Mějme matici $\mathbf{A}$. Sestrojme její QR-rozklad, tj.

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 = \mathbf{Q}_0\mathbf{R}_0,$$

určeme

$$\mathbf{A}_1 := \mathbf{R}_0\mathbf{Q}_0.$$

Nyní sestrojme QR-rozklad matice $\mathbf{A}_1$, tj.

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{Q}_1\mathbf{R}_1,$$

a spočtěme

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{R}_1\mathbf{Q}_1.$$

Takto pokračujme analogicky dále.
Jistě platí

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{R}_k\mathbf{Q}_k = \mathbf{Q}_k^T\mathbf{A}_k\mathbf{Q}_k = \mathbf{Q}_k^T\mathbf{R}_{k-1}\mathbf{Q}_{k-1}\mathbf{Q}_k = \\ = \mathbf{Q}_k^T\mathbf{Q}_{k-1}^T\mathbf{A}_{k-1}\mathbf{Q}_{k-1}\mathbf{Q}_k = \cdots = (\mathbf{Q}_0\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_k)^T\mathbf{A}(\mathbf{Q}_0\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_k).\end{aligned}$$

Tedy matice $\mathbf{A}_0$, $\mathbf{A}_1$, ... jsou *kongruentní* (tj. $\mathbf{A} \equiv \mathbf{B} \iff \mathbf{A} = \mathbf{P}^T\mathbf{B}\mathbf{P}$). Navíc díky ortogonálnosti matic $\mathbf{Q}_0$, $\mathbf{Q}_1$, ... jsou matice $\mathbf{A}_0$, $\mathbf{A}_1$, ... také *podobné* (tj. $\mathbf{A} \sim \mathbf{B}$ (též $\mathbf{A} \approx \mathbf{B}$) $\iff \mathbf{A} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{P}$). Tyto matice mají díky podobnosti stejná vlastní čísla jako matice $\mathbf{A}$. Posloupnost těchto matic konverguje za určitých předpokladů k horní trojúhelníkové (resp. horní blokově trojúhelníkové) matici, která má vlastní čísla na diagonále (resp. diagonální bloky mají vlastní čísla se stejnou absolutní hodnotou) seřazena podle velikosti počínaje největším vlastním čísel. „Poddiagonální prvky“ (resp. „poddiagonální bloky“) konvergují k nule. Ovšem důkazy konvergence existují jen pro některé speciální typy matic. Například má-li matice $\mathbf{A}$ kladná vlastní čísla, pak $\mathbf{Q}_k$ konverguje k jednotkové matici a posloupnost matic $\mathbf{A}_k$ k horní troúhelníkové matici, přičemž diagonální prvky této matice jsou vlastní čísla matice $\mathbf{A}$.

Příklad 11. Určeme vlastní čísla matice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & \frac{1}{3} & 1 \\ 3 & -\frac{5}{3} & 1 \\ 0 & \frac{11}{9} & \frac{5}{3} \end{pmatrix}.$$

Lze snadno ověřit, že vlastní čísla matice $\mathbf{A}$ jsou $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = -2$ a $\lambda_3 = 3$. Výsledky získané QR-algoritmem:

k	$a_{11}^{(k)}$	$a_{22}^{(k)}$	$a_{33}^{(k)}$
1	2,0	-1,6666667	1,6666667
5	3,1781374	-2,2260322	1,0478949
10	2,9486278	-1,9471270	0,9984996
15	3,0003596	-2,0064061	1,0000468
20	2,9991547	-1,9991527	0,9999984
25	3,0001104	-2,0001098	0,9999999

Ke zrychlení konvergence lze využít tzv. *posunutí* a počítat nikoli rozklad matice $\mathbf{A}_k = \mathbf{Q}_k\mathbf{R}_k$, nýbrž matice

$$\mathbf{A}_k - \sigma_k\mathbf{E} = \widetilde{\mathbf{Q}}_k\widetilde{\mathbf{R}}_k.$$

Původní spektrum matice $\mathbf{A}$ se tímto posune o σ_k (je výhodné volit jej jako nějakou aproximaci vlastního čísla; matice $\mathbf{A}_k - \sigma_k\mathbf{E}$ má vlastní čísla $\lambda_j - \sigma_k$, jsou-li λ_j vlastní čísla matice $\mathbf{A}_k$). Zaznamenáváme-li velikosti posunití σ_k, snadno ze znalosti spektra matice $\mathbf{A}_k$ najdeme spektrum matice $\mathbf{A}$. Protože ještě (v metodě bez posunutí)

$$\mathbf{A}_k = (\mathbf{Q}_0\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_{k-1})^T\mathbf{A}(\mathbf{Q}_0\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_{k-1}),$$

je

$$\mathbf{A} = (\mathbf{Q}_0\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_{k-1})^T\mathbf{A}_k(\mathbf{Q}_0\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_{k-1}).$$

Vlastní vektory y matice $\mathbf{A}$ dostaneme z vlastních vektorů matice $\mathbf{A}_k$ podle vzorce

$$y = \mathbf{Q}_0\mathbf{Q}_1\cdots\mathbf{Q}_{k-1}z.$$

Týž vzorec (s maticemi $\widetilde{\mathbf{Q}}_j$) zůstává v platnosti i pro metodu s posunutími, protože při posunutí se vlastní vektory nemění.
Volí-li se posunutí speciálně, dostáváme v některých důležitých případech i kubickou konvergenci (tzn. zhruba řečeno, počet platných míst se v každém kroku přibližně ztrojnásobí).

Poznámka 3. Nejvýhodnější se jeví upravit nejdříve matici $\mathbf{A}$ do tzv. *Hessenbergova tvaru* (tj. $a_{ij} = 0$ pro $j < i-1$, $i, j = 1, \ldots, n$) pomocí Gaussovy eliminace a pak na tuto upravenou matici použít QR-rozklad. Konvergence je potom rychlejší (obzvláště použijeme-li metodu posunu, kde za σ_k volíme tzv. *Rayleighův podíl* $\frac{\mathrm{e}_k^T\mathbf{H}\mathrm{e}_k}{\mathrm{e}_k^T\mathrm{e}_k}$, kde $\mathbf{H}$ je právě matice $\mathbf{A}$ v Hessenbergově tvaru). Navíc platí, že je-li matice $\mathbf{A}$ v Hessenbergově tvaru, pak každá z matic $\mathbf{H}_k$ je také v Hessenbergově tvaru, a to i při metodě posunutí.

Seznam použité literatury

[1] Miroslav Fiedler: *Numerické metody lineární algebry.* SNTL Praha, 1978. Str. 200-213, 242-249.

[2] Biswa Nath Datta: *Numerical linear algebra and applications.* Brooks and Cole Publishing Company, Pacific Grove, California, 1995. Str. 133-183, 215-217, 236, 237.

[3] Anthony Rahlston: *Základy numerické matematiky.* Academia Praha, 1978. Str. 551-564, 576-577.

[4] Kubíček Milan, Dubcová Miroslava, Janovská Drahoslava: *Numerické metody a algoritmy.* VŠCHT Praha, 2005. Str. 167-170.