MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
ÚSTAV MATEMATIKY A STATISTIKY

Diplomová práce

BRNO 2018

JAKUB CÍCHA

MASARYKOVA UNIVERZITA
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
ÚSTAV MATEMATIKY A STATISTIKY

Maticové rozklady a jejich použití

Diplomová práce

Jakub Cícha

Vedoucí práce: Mgr. Jiří Zelinka, Dr. **Brno 2018**

Bibliografický záznam

Autor:	Bc. Jakub Cícha Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita Ústav matematiky a statistiky
Název práce:	Maticové rozklady a jejich použití
Studijní program:	Matematika
Studijní obor:	Matematické modelování a numerické metody
Vedoucí práce:	Mgr. Jiří Zelinka, Dr.
Akademický rok:	2017/2018
Počet stran:	ix + 40
Klíčová slova:	Matice; rozklad; maticový rozklad; QR rozklad; Givensova rotace; Householderova transformace; LU rozklad; vlastní čísla

Bibliographic Entry

Author:	Bc. Jakub Cícha Faculty of Science, Masaryk University Department of mathematics and statistics
Title of Thesis:	Matrix decompositions and their applications
Degree Programme:	Mathematics
Field of Study:	Mathematical modelling and numeric methods
Supervisor:	Mgr. Jiří Zelinka, Dr.
Academic Year:	2017/2018
Number of Pages:	ix + 40
Keywords:	Matrix; Decomposition; Matrix decomposition; QR decomposition; Givens rotation; Householders transformation; LU decomposition; Eigenvalues

Abstrakt

V této diplomové práci se věnujeme třem typům maticových rozkladů, singulárnímu rozkladu, LU rozkladu a QR rozkladu. Pomocí nich řešíme systémy lineárních rovnic nebo hledáme vlastní čísla matic. Uvedeny jsou řešené příklady a také algoritmus, který pomocí QR rozkladu najde všechna vlastní čísla libovolné reálné čtvercové matice.

Abstract

In this thesis we study three types of matrix decompositions, singular value decompostiton, LU and QR decomposition. We use them for solving linear systems or finding eigenvalues. Solved examples are given. And there is also algorhitm based on QR decomposition, which finds all the eigenvalues of any real square matrix.

MASARYKOVA UNIVERZITA
Přírodovědecká fakulta

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

Akademický rok: 2015/2016

Ústav: Ústav matematiky a statistiky

Student: Bc. Jakub Cicha

Program: Matematika

Obor: Matematické modelování a numerické metody

Ředitel *Ústavu matematiky a statistiky* PřF MU Vám ve smyslu Studijního a zkušebního řádu MU určuje diplomovou práci s tématem:

Téma práce: Maticové rozklady a jejich použití

Téma práce anglicky: Matrix decompositions and their applications

Oficiální zadání:
V práci se zaměřte na různé typy maticových rozkladů, jejich teoretické využití, praktické aplikace i algoritmy pro jejich výpočet. Součástí práce může být realizace vybraných algoritmů ve vhodném softwaru.

Literatura:

WATKINS, David S. *Fundamentals of Matrix Computations*. 2002.

ABADIR, Karim M. a Jan R. MAGNUS. *Matrix Algebra*. , 2005.

GOLUB, Gene H. a Charles F. VAN LOAN. *Matrix computations*. 3rd ed. Baltimore, Md.: Johns Hopkins University Press, 1996. xxvii, 694. ISBN 0-8018-5414-8.

HOUSEHOLDER, Alston Scott. *The Theory of Matrices in Numerical Analysis*. 1986. ISBN 978-0-486-61781-7.

RALSTON, Anthony. *Základy numerické matematiky [Ralston, 1978]*. 2. české vyd. Praha: Academia, 1978. 635 s.

Jazyk závěrečné práce:

Vedoucí práce: Mgr. Jiří Zelinka, Dr.

Datum zadání práce: 25. 9. 2015

V Brně dne: 26. 10. 2015

Souhlasím se zadáním (podpis, datum):

Bc. Jakub Cicha **student**	Mgr. Jiří Zelinka, Dr. **vedoucí práce**	v.z. prof. RNDr. Jan Slovák, DrSc. **ředitel Ústavu matematiky a statistiky**

Poděkování

Chtěl bych poděkovat Mgr. Jiřímu Zelinkovi, Dr., který moji práci vedl a poskytl mi cenné rady i čas, bez nichž by tato práce nemohla vzniknout.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svoji diplomovou práci vypracoval samostatně s využitím informačních zdrojů, které jsou v práci citovány.

Brno 4. ledna 2018 . . . . . .

Jakub Cícha

Obsah

Úvod ..... **viii**

Přehled použitého značení ..... **ix**

Kapitola 1. Základní pojmy **1**

Kapitola 2. Singulární rozklad **5**

Kapitola 3. LU rozklad **8**
3.1 Řešení systémů lineárních rovnic LU rozkladem 10
3.2 Výpočet vlastních čísel pomocí LU rozkladu 11

Kapitola 4. QR rozklad **17**
4.1 Householderova transformace 17
4.2 Givensova rotace 24
4.3 Jednoznačnost QR rozkladu 27
4.4 Výpočet vlastních čísel pomocí QR rozkladu 32

Závěr **38**

Příloha **39**

Seznam použité literatury **40**

Úvod

Cílem diplomové práce zabývající se maticovými rozklady je podání ucelených informací o několika vybraných typech maticových rozkladů, tedy rozkladů, kdy se daná matice přepíše do tvaru součinu několika matic. Motivací rozkladů je to, že rozložené matice mají jednodušší tvar, se kterým se pak lépe počítá a který má také většinou jisté specifické vlastnosti. Těch lze při počítání využívat, čímž se výpočet zjednoduší. Každý z rozkladů je teoreticky popsán, na popis navazuje praktická ukázka spočívající ve vyřešení zadaného příkladu. Ta ukazuje, jak mnohdy složité teoretické formulace vedou k značnému zjednodušení výpočtu.

V první kapitole se seznámíme se základními pojmy, které budeme v dalších kapitolách využívat. Poté už přejdeme k jednotlivým typům rozkladů. Budeme se zabývat nejprve singulárním rozkladem, poté popíšeme LU rozklad a nakonec dva způsoby, kterými lze zkonstruovat QR rozklad. Jde o Householderovu transformaci a Givensovu rotaci. V poslední podkapitole se budeme věnovat výpočtům vlastních čísel různých matic pomocí QR rozkladu. Obecně ovšem nelze pomocí QR rozkladu vypočítat vlastní hodnoty libovolné čtvercové matice. Jedním z cílů práce proto je sestrojení algoritmu, který bude aproximovat vlastní hodnoty libovolné čtvercové matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Vlastní čísla takových matic mohou nabývat reálných i komplexních hodnot.

Maticové rozklady se nejčastěji používají k zjednodušení výpočtů velkých soustav lineárních rovnic, lze je využít také k výpočtu vlastních čísel. LU rozklad lze například využít k numerickému řešení parciálních diferenciálních rovnic, kde výpočet vede na třídiagonální matici, na kterou je LU rozklad aplikován.

Diplomová práce je doplněna o soubory s příponou `.m`, tedy soubory spustitelné jako funkce v programu `MATLAB`, pomocí nichž lze některé typy příkladů řešit s využitím počítače.

Přehled použitého značení

Pro snažší orientaci v textu zde čtenáři předkládáme přehled základního značení, které se v celé práci vyskytuje.

$\mathbb{C}$	množina všech komplexních čísel
$\mathbb{R}$	množina všech reálných čísel
$\mathbf{I}$	jednotková matice
$\mathbf{e}_i$	nulový vektor, který má na i-té pozici jedničku
$\mathbb{R}^{n\times n}$	prostor reálných matic typu $n \times n$
$\mathbb{C}^{n\times n}$	prostor komplexních matic typu $n \times n$
$\|\mathbf{A}\|$	norma matice $\mathbf{A}$
$\overline{\mathbf{A}}$	komplexně sdružená matice k matici $\mathbf{A}$
$\mathbf{A}^{-1}$	inverzní matice k matici $\mathbf{A}$
$\mathbf{A}^{T}$	transponovaná matice k matici $\mathbf{A}$
$\mathbf{A}^{\star}$	hermitovsky sdružená matice k matici $\mathbf{A}$
$(\mathbf{u}, \mathbf{v})$	skalární součin vektoru $\mathbf{u}$ a vektoru $\mathbf{v}$
$\rho(\mathbf{A})$	spektrální poloměr matice $\mathbf{A}$

Kapitola 1

Základní pojmy

V první kapitole se seznámíme se základními pojmy, které budeme v dalších kapitolách využívat. Pokud neuvedeme jinak, budeme obecně pracovat s komplexními maticemi, avšak například v kapitole týkající se QR rozkladu budeme pracovat zejména s reálnými maticemi. Předpokládáme dále, že čtenář má základní znalosti matic a ví, co se rozumí například komplexní, transponovanou nebo hermitovskou maticí, další méně používané pojmy nyní definujme.

Definice 1.1. Matice $\mathbf{A} = \left(a_{ij}\right)$ typu $n \times n$ se nazývá symetrická, jestliže pro každý její prvek a_{ij} platí

$$a_{ij} = a_{ji}, \quad i, j = 1, \ldots, n.$$

Definice 1.2. Matice $\mathbf{A} = \left(a_{ij}\right)$ typu $n \times n$ se nazývá hermitovská, jestliže platí

$$a_{ij} = \bar{a}_{ji},$$

kde $\bar{a}_{ji}$ je číslo komplexně sdružené k číslu a_{ji}.

Definice 1.3. Čtvercová matice $\mathbf{A}$ se nazývá ortogonální, jestliže platí

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{I}.$$

Poznamenejme, že pro ortogonální matici $\mathbf{A}$ platí $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$, tedy i $\mathbf{A}\mathbf{A}^T = \mathbf{I}$.

Definice 1.4. Čtvercová matice $\mathbf{A}$ se nazývá unitární, jestliže platí

$$\mathbf{A}^\star\mathbf{A} = \mathbf{I}.$$

Definice 1.5. Čtvercovou matici $\mathbf{A} = \left(a_{ij}\right)$ typu $n \times n$ nazveme pozitivně definitní, jestliže pro každý sloupcový vektor $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ platí

$$\mathbf{x}^\star\mathbf{A}\mathbf{x} > 0.$$

Věta 1.1. *Hermitovská matice $\mathbf{A} = \left(a_{ij}\right)$ typu $n \times n$ je pozitivně definitní, jestliže všechny její hlavní minory D_i jsou kladné. Tj. $D_1, D_2, \ldots, D_n > 0$, kde*

$$D_i = det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1i} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2i} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \ldots & a_{ii} \end{pmatrix}.$$

Matice $\mathbf{A}$ se nazývá pozitivně semidefinitní, jsou-li nerovnosti neostré.

Definice 1.6. Čtvercová matice $\mathbf{A} = (a_{ij})$ typu $n \times n$ se nazývá horní resp. dolní trojúhelníková matice, jestliže $a_{ij} = 0$ pro každé $i, j = 1, 2, \ldots, n : i > j$, resp. $i < j$.

Definice 1.7. Mějme čtvercovou matici $\mathbf{A} = (a_{ij})$ typu $n \times n$. Prvky

$$a_{i+1,i}, \quad i = 1, \ldots, n-1,$$

ležící pod hlavní diagonálou, nazveme dolní subdiagonálou matice $\mathbf{A}$. Analogicky definujeme horní subdiagonálu.

Definice 1.8. Řekneme, že matice $\mathbf{H}$ je v Hessenbergově tvaru, jestliže prvky pod dolní subdiagonálou jsou rovny nule.

Definice 1.9. Čtvercová matice $\mathbf{T}$ se nazývá třídiagonální, jestliže

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} b_1 & a_1 & & 0 \\ c_1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & a_{n-1} \\ 0 & & c_{n-1} & b_n \end{pmatrix},$$

tedy $t_{ij} = 0$ pro $|i - j| > 1$. To znamená, že nenulové prvky obsahuje pouze hlavní diagonála a horní i dolní subdiagonála.

Definice 1.10. Nechť V je vektorový prostor nad $\mathbb{C}$. Skalárním součinem nazveme funkci $(\cdot,\cdot) : V \times V \to \mathbb{C}$, jestliže pro každé $\mathbf{u},\mathbf{v},\mathbf{w} \in V$ a pro každé $a, b \in \mathbb{C}$ platí:

1. $(\mathbf{u},\mathbf{u}) \geq 0, (\mathbf{u},\mathbf{u}) = 0 \Leftrightarrow u = \mathbf{0}$,
2. $(\mathbf{u},\mathbf{v}) = \overline{(\mathbf{v},\mathbf{u})}$,
3.
   - $(a\mathbf{u} + b\mathbf{v}, \mathbf{w}) = a(\mathbf{u},\mathbf{v}) + b(\mathbf{v},\mathbf{w})$,
   - $(\mathbf{u}, a\mathbf{v} + b\mathbf{w}) = \overline{a}(\mathbf{u},\mathbf{v}) + \overline{b}(\mathbf{u},\mathbf{w})$.

Standardní skalární součin $(\mathbf{u},\mathbf{v})$ pro komplexní sloupcové vektory řádu n je tvaru

$$(\mathbf{u},\mathbf{v}) = \sum_{k=1}^{n} u_k \bar{v}_k = \mathbf{v}^\star \mathbf{u},$$

kde $\mathbf{v}^\star$ je hermitovsky sdružený vektor k vektoru $\mathbf{v}$.

Definice 1.11. Vektor $\mathbf{v} \neq 0$ se nazývá vlastní vektor čtvercové matice $\mathbf{A}$, jestliže existuje $\lambda \in \mathbb{C}$ takové, že $\mathbf{A}\lambda = \lambda\mathbf{v}$. Číslo λ se nazývá vlastní číslo matice $\mathbf{A}$ příslušné k vlastnímu vektoru $\mathbf{v}$.

Nyní bez důkazu uvedeme větu, kterou využijeme k důkazu věty 1.4.

Věta 1.2. *Vlastní vektory příslušné různým vlastním číslům jsou lineárně nezávislé.*

Věta 1.3. *Nechť $\mathbf{A} \in \mathbf{C}^{n\times n}$ je hermitovská, pak platí:*

1. *Všechna vlastní čísla matice $\mathbf{A}$ jsou reálná.*

2. *Vlastní vektory příslušné různým vlastním číslům jsou navzájem kolmé.*
3. *Je-li* $\mathbf{A}$ *pozitivně definitní, resp. semidefinitní, pak jsou všechna vlastní čísla matice* $\mathbf{A}$ *kladná, resp. nezáporná.*

Důkaz. Lze nalézt například v publikaci [8]. □

Definice 1.12. Nechť $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ jsou reálné vektory délky n. Norma vektoru je funkce $\| \cdot \|$: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ s následujícími vlastnostmi:

1. $\| \mathbf{x} \| > 0$ pro nenulový $\mathbf{x}$; $\| \mathbf{x} \| = 0$ pro $\mathbf{x} = \mathbf{0}$,
2. $\| k\mathbf{x} \| = |k| \, \| \mathbf{x} \|$, k je libovlný skalár,
3. $\| \mathbf{x} + \mathbf{y} \| \leq \| \mathbf{x} \| + \| \mathbf{y} \|$,

Poznámka 1.1. Skalární součin definuje normu vektoru

$$\| \mathbf{x} \| = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}.$$

Definice 1.13. Nechť $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ jsou reálné čtvercové matice typu $n \times n$. Norma matic je funkce $\| \cdot \|$: $\mathbb{R}^{n \times n} \to \mathbb{R}$ s následujícími vlastnostmi

1. $\| \mathbf{A} \| > 0$ pro nenulovou $\mathbf{A}$; $\| \mathbf{A} \| = 0$ pro $\mathbf{A} = \mathbf{0}$,
2. $\| \alpha \mathbf{A} \| = |\alpha| \, \| \mathbf{A} \|$, α je komplexní konstanta,
3. $\| \mathbf{A} + \mathbf{B} \| \leq \| \mathbf{A} \| + \| \mathbf{B} \|$,
4. $\| \mathbf{AB} \| \leq \| \mathbf{A} \| \| \mathbf{B} \|$.

Definice 1.14. Nechť $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_k$ jsou vlastní čísla matice $\mathbf{A}$, pak spektrální poloměr matice $\mathbf{A}$ definujeme jako číslo

$$\rho(\mathbf{A}) = \max_{i=1,\ldots,n} |\lambda_i|.$$

Primárně se budeme zabývat komplexními maticemi a budeme-li počítat s normou matice $\mathbf{A}$, budeme předpokládat, že se jedná o spektrální normu, která má tvar

$$\| \mathbf{A} \| = \sqrt{\rho(\mathbf{A}\mathbf{A}^\star)}.$$

Věta 1.4. *Nechť* $\boldsymbol{A}$ *je libovolná komplexní čtvercová matice, jejíž vlastní čísla jsou navzájem různá. Potom existuje podobnostní transformace* $\boldsymbol{P}$ *taková, že* $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ *je diagonální matice, jejíž prvky na diagonále jsou rovny vlastním číslům matice* $\boldsymbol{A}$.

Důkaz. Matici $\mathbf{P}$ vytvoříme tak, že za její sloupce vezmene vlastní vektory matice $\mathbf{A}$. Pro tuto matici platí

$$\mathbf{AP} = \mathbf{PD}$$

a $\mathbf{D}$ je diagonální matice s vlastními čísly matice $\mathbf{A}$ na diagonále. Protože vlastní vektory matice $\mathbf{A}$ jsou lineárně nezávislé, existuje inverzní matice $\mathbf{P}^{-1}$ a platí

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{AP} = \mathbf{D}.$$

Tím je věta dokázána. □

V obecném případě sice není možné matici **A** diagonalizovat, nicméně pro hermitovské matice lze diagonalizaci provést, navíc s unitární maticí **Q**. Uveďme tedy následující větu.

Věta 1.5. *Je-li matice* $\boldsymbol{A}$ *hermitovská, pak existuje unitární matice* $\boldsymbol{Q}$ *tak, že matice*

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{Q}^{\star}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}$$

je diagonální matice s vlastními čísly matice $\boldsymbol{A}$ *na diagonále.*

Nyní uvedeme ještě zobecněnou definici inverzní matice, tzv. pseudoinverzní (Mooreovu - Penroseovu) matici.

Definice 1.15. Matici $\mathbf{A}^{\dagger} \in \mathbb{C}^{m\times n}$ nazveme pseudoinverzní maticí nebo také Mooreovou-Penroseovou zobecněnou inverzní maticí, jestliže platí

- $\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{A}\mathbf{A}^{\dagger} = \mathbf{A}^{\dagger}$,
- $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{A} = \mathbf{A}$,
- $\left(\mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{A}\right)^{\star} = \mathbf{A}^{\dagger}\mathbf{A}$,
- $\left(\mathbf{A}\mathbf{A}^{\dagger}\right)^{\star} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{\dagger}$.

Přitom lze ukázat, že tato matice je určena jednoznačně.

Věta 1.6. *Jsou-li sloupce matice* $\boldsymbol{A}$ *lineárně nezávislé, potom je matice* $\boldsymbol{A}^{\star}\boldsymbol{A}$ *regulární a platí*

$$\boldsymbol{A}^{\dagger} = (\boldsymbol{A}^{\star}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\star}.$$

Důkaz. Viz [7]. □

Kapitola 2

Singulární rozklad

Věta 2.1. *Nechť* $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$*, pak existují unitární matice* $\boldsymbol{U} \in \mathbb{C}^{m\times m}$ *a* $\boldsymbol{V} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *tak, že*

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\Sigma\boldsymbol{V}^\star,$$

kde

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \boldsymbol{S} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \end{pmatrix},$$

kde $\boldsymbol{S}$*=diag*$(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_k)$ *a* $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_k > 0$*. Matice* $\boldsymbol{S}$ *je řádu* $k = h(\boldsymbol{A}^\star\boldsymbol{A})$*.*

Důkaz. Bez újmy na obecnosti lze předpokládat, že $m \leq n$, v opačném případě přejdeme k matici $\mathbf{A}^\star$. Víme, že matice $\mathbf{A}^\star\mathbf{A}$ je hermitovská a pozitivně semidefinitní, z čehož podle věty 1.3 plyne, že její vlastní čísla jsou reálná a nezáporná. Lze je tedy uspořádat

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n.$$

Označme vlastní čísla matice $\mathbf{A}^\star\mathbf{A}$ $\sigma_1^2 = \lambda_1, \sigma_2^2 = \lambda_2, \ldots, \sigma_n^2 = \lambda_n$ a jim odpovídající vlastní vektory $v_1, v_2, \ldots, v_n$. Díky uspořádání víme, že všechna nulová vlastní čísla mají indexy $k+1, k+2, \ldots, n$. Dále existuje unitární matice $\mathbf{V} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_n)$ řádu n taková, že

$$\mathbf{V}^\star\mathbf{A}^\star\mathbf{A}\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & & & \\ & \sigma_2^2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_n^2 \end{pmatrix}. \tag{2.1}$$

Můžeme tedy psát

$$v_i^\star\mathbf{A}^\star\mathbf{A}v_j = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ \sigma_j^2 & i = j. \end{cases}$$

Mějme matici $\mathbf{U}_1 = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k)$, kde

$$\mathbf{u}_i = \frac{1}{\sigma_i}\mathbf{A}\mathbf{v}_i, \quad i = 1, 2, \ldots, k,$$

a matici $\mathbf{U}_0 = (\mathbf{u}_{k+1}, \mathbf{u}_{k+2}, \ldots, \mathbf{u}_m)$, která je tvořena ortonormální bází jádra matice $\mathbf{A}^\star$, takže platí

$$\mathbf{A}^\star \mathbf{u}_j = \mathbf{0} \quad j = k+1, k+2, \ldots, m.$$

Z toho plyne, že $\mathbf{A}^\star \mathbf{U}_0 = \mathbf{0}$ a také $\mathbf{U}_0^\star \mathbf{A} = \mathbf{0}$. Položme $\mathbf{U} = (\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_0) = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_m)$. Nyní ukážeme, že matice

$$\mathbf{U} = (\mathbf{U}_1 \mathbf{U}_0)$$

je unitární, takže sloupce této matice tvoří ortonormální bázi prostoru $\mathbb{C}^m$.

Uvažujme matici

$$\mathbf{U}^\star \mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1^\star \\ \mathbf{U}_0^\star \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1 & \mathbf{U}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1^\star \mathbf{U}_1 & \mathbf{U}_1^\star \mathbf{U}_0 \\ \mathbf{U}_0^\star \mathbf{U}_1 & \mathbf{U}_0^\star \mathbf{U}_0 \end{pmatrix},$$

která je tvořena skalárními součiny jednotlivých sloupců matic $\mathbf{U}_1$ a $\mathbf{U}_0$.

1. Matice $\mathbf{U}_1^\star \mathbf{U}_1$ obsahuje prvky

$$u_i^\star u_j = \frac{1}{\sigma_i} v_i^\star \mathbf{A}^\star \frac{1}{\sigma_j} \mathbf{A} v_j = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} v_i^\star \mathbf{A}^\star \mathbf{A} v_j = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ \dfrac{1}{\sigma_i \sigma_j} \sigma_j^2 = 1 & i = j. \end{cases}$$

2. Matice $\mathbf{U}_1^\star \mathbf{U}_0$ obsahuje prvky

$$u_i^\star u_j = \frac{1}{\sigma_i} v_i^\star \mathbf{A}^\star u_j = 0$$

   pro $i \in \{1, \ldots, k\}$, $j > k$.

3. Dále můžeme psát

$$\mathbf{U}_0^\star \mathbf{U}_1 = (\mathbf{U}_1^\star \mathbf{U}_0)^\star = 0.$$

4. A nakonec

$$\mathbf{U}_0^\star \mathbf{U}_0 = \begin{pmatrix} u_{k+1}^\star \\ \vdots \\ u_m^\star \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{k+1} & \ldots & u_n \end{pmatrix} = \mathbf{I},$$

   protože u_{k+1}, …, u_m jsou ortonormální.

Tím jsme dokázali, že matice $\mathbf{U}$ je unitární, potom tedy

$$\mathbf{U}^\star \mathbf{A} \mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1^\star \\ \mathbf{U}_0^\star \end{pmatrix} \mathbf{A} \mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1^\star \mathbf{A} \mathbf{V} \\ \mathbf{U}_0^\star \mathbf{A} \mathbf{V} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1^\star \mathbf{A} \mathbf{V} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

Dále pro matici $\mathbf{U}_1^\star$ platí

$$\mathbf{U}_1^\star \mathbf{A} \mathbf{V} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} \mathbf{v}_1^\star \mathbf{A}^\star \\ \vdots \\ \frac{1}{\sigma_k} \mathbf{v}_k^\star \mathbf{A}^\star \end{pmatrix} \mathbf{A} \left(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, v_n \right) = \frac{1}{\sigma_i} \mathbf{v}_i^\star \mathbf{A}^\star \mathbf{A} \mathbf{v}_j$$

pro $i = 1,2,\ldots,k$ a $j = 1,2,\ldots,n$. Přičemž výraz $\mathbf{v}_i^\star \mathbf{A}^\star \mathbf{A}\mathbf{v}_j$ je roven prvním k řádkům matice (2.1). To znamená, že

$$\mathbf{U}^\star \mathbf{A}\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & & & & \\ & \sigma_2 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & \sigma_k & & & \\ & & & & 0 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 0 \end{pmatrix} = \Sigma,$$

tedy $\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\star$. Tím je věta dokázána. □

Definice 2.1. Rozklad matice $\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\star$ popsaný v předchozí větě se nazývá singulární rozklad matice $\mathbf{A}$. Čísla $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_k$ se nazývají singulární čísla.

Důsledek 2.1. Matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^\star$ a matice $\mathbf{A}^\star\mathbf{A}$ mají stejná nenulová vlastní čísla.

Důkaz. Platí

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^\star = \mathbf{U}\begin{pmatrix} \mathbf{S} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\mathbf{V}^\star\mathbf{V}\begin{pmatrix} \mathbf{S}^\star & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\mathbf{U}^\star = \mathbf{U}\begin{pmatrix} \mathbf{S} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{S}^\star & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\mathbf{U}^\star = \mathbf{U}\begin{pmatrix} \mathbf{S} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^2\mathbf{U}^\star$$

a zároveň

$$\mathbf{A}^\star\mathbf{A} = \mathbf{V}\begin{pmatrix} \mathbf{S}^\star & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\mathbf{U}^\star\mathbf{U}\begin{pmatrix} \mathbf{S} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\mathbf{V}^\star = \mathbf{V}\begin{pmatrix} \mathbf{S}^\star & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{S} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\mathbf{V}^\star = \mathbf{V}\begin{pmatrix} \mathbf{S} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^2\mathbf{V}^\star.$$

Jak je vidět, nenulová vlastní čísla těchto matic jsou vždy diagonální prvky matice $\mathbf{S}^2$. Tím je věta dokázána. □

Věta 2.2. *Je-li matice $\mathbf{A}$ pozitivně semidefinitní, pak jsou její singulární čísla rovna jejím vlastním číslům.*

Důkaz. Protože matice $\mathbf{A}$ je pozitivně semidefinitní, jsou její vlastní čísla $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ nezáporná. Zároveň je $\mathbf{A}$ hermitovská, tedy $\mathbf{A}^\star = \mathbf{A}$. Proto platí

$$\mathbf{A}^\star\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A} = \mathbf{A}^2.$$

Matice $\mathbf{A}^2$ má vlastní čísla $\lambda_1^2, \lambda_2^2, \ldots, \lambda_n^2$, která jsou nezáporná. Také ale víme, že matice $\mathbf{A}^\star\mathbf{A}$ má vlastní čísla $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \ldots, \sigma_n^2$. Protože $\lambda_i \geq 0$, platí

$$\lambda_i = \sigma_i,$$

tím je věta dokázána. □

Ještě jedna poznámka o vztahu singulárního rozkladu a pseudoinverzní matice. Ověřením vlastností z definice 1.15 se dá snadno ukázat, že pseudoinverzní matici lze napsat pomocí singulárního rozkladu, popsaného ve větě 2.1, takto

$$\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{V}\Sigma^\dagger\mathbf{U}^\star,$$

kde $\Sigma^\dagger = \begin{pmatrix} \mathbf{S}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.

Kapitola 3

LU rozklad

Metoda LU rozkladu (podle Rutishausera se nazývá LR rozklad) se používá k řešení soustav lineárních rovnic a také k výpočtům vlastních čísel zejména matic v Hessenbergově tvaru nebo třídiagonálních matic. Tato metoda je založena na postupném trojúhelníkovém rozkladu posloupnosti matic $\{\boldsymbol{A}_k\}$, který je uveden níže.

Sestrojení LU rozkladu vychází z Gaussovy eliminační metody (GEM). Mějme matici $\mathbf{A}$, kterou chceme rozložit na součin dolní trojúhelníkové matice $\mathbf{L}$ a horní trojúhelníkové matice $\mathbf{U}$. Matici $\mathbf{A}$ upravíme klasickou Gaussovou eliminací na schodovitý tvar, čímž dostaneme horní trojúhelníkovou matici $\mathbf{U}$. Matice $\mathbf{L}$ bude potom dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále. Prvky l_{ij} pro $i > j$ pak budou koeficienty, jimiž jsme násobili i-tý řádek matice $\mathbf{A}$ tak, abychom tento násobek odečetli od j-tého řádku a na i-té pozici j-tého řádku dostali nulu. Jedná se tedy o matici, do níž zapisujeme jednotlivé úpravy matice $\mathbf{A}$. Postup si ukážeme na příkladu matice 3×3.

Uvažujme matici

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

Tuto matici chceme upravit pomocí GEM na schodovitý tvar. První řádek tedy opíšeme. Pro vynulování první pozice druhého řádku odečteme od druhého řádku trojnásobek prvního řádku. Máme tedy

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 3 & 0 & 2 \\ 1 & 5 & -1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 6 & -7 \\ 1 & 5 & -1 \end{pmatrix}.$$

Protože jsme první řádek násobili trojkou, abychom vynulovali první prvek matice $\mathbf{A}$, zapíšeme na tuto pozici v matici úprav trojku. Ta tedy nyní vypadá takto

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ \star & \star & 1 \end{pmatrix},$$

přičemž hvězdička zastupuje prvky, které zatím neznáme. V dalším kroku vynulujeme

číslo na první pozici třetího řádku. K tomu stačí od třetího řádku odečíst první. Máme tedy

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 3 & 0 & 2 \\ 1 & 5 & -1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 6 & -7 \\ 1 & 5 & -1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 6 & -7 \\ 0 & 7 & -4 \end{pmatrix}.$$

První řádek jsme nyní nemuseli násobit, proto na pozici l_{31} zapíšeme jedničku,

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ 1 & \star & 1 \end{pmatrix}.$$

Zbývá vynulovat druhý prvek třetího řádku. Toho docílíme tak, že od třetího řádku odečteme $\frac{7}{6}$-násobek prvního řádku. Máme

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 3 & 0 & 2 \\ 1 & 5 & -1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 6 & -7 \\ 1 & 5 & -1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 6 & -7 \\ 0 & 7 & -4 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 \\ 0 & 6 & -7 \\ 0 & 0 & \frac{25}{6} \end{pmatrix} = \mathbf{U}.$$

Matice úprav má tvar

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ 1 & \frac{7}{6} & 1 \end{pmatrix}.$$

Lze přitom snadno ověřit, že $\mathbf{LU} = \mathbf{A}$. Pro úplnost uvedeme ještě formální definici LU rozkladu.

Definice 3.1. Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$, potom LU rozkladem matice $\mathbf{A}$ rozumíme matice $\mathbf{L}$ a $\mathbf{U}$, pro něž platí

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

kde $\mathbf{L} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je dolní trojúhelníková matice a $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je horní trojúhelníková matice.

Obecně ale nelze LU rozklad provést bez výměny řádků, proto uvedeme následující větu.

Věta 3.1. *Nechť $\boldsymbol{A}$ je obecně komplexní matice typu $n \times n$. Pak pro každou takovovu matici existují matice $\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{L}$ a $\boldsymbol{U}$ takové, že*

$$\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LU},$$

kde $\boldsymbol{U}$ je horní trojúhelníková matice, $\boldsymbol{L}$ je dolní trojúhelníková matice a $\boldsymbol{P}$ je permutační matice.

Důkaz. Lze nalézt v [1]. □

Do permutační matice $\mathbf{P}$ se zapisují řádkové výměny provedené při GEM. Pokud lze GEM provést bez řádkových výměn, pak můžeme permutační matici vynechat a platí $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$. To lze udělat například tehdy, jsou-li hlavní minory matice $\mathbf{A}$ nenulové.

3.1 Řešení systémů lineárních rovnic LU rozkladem

Nyní ukážeme, jak lze LU rozklad využít k výpočtu soustavy lineárních rovnic. Uvažujme systém $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, kde $\mathbf{A}$ je regulární matice typu $n \times n$. Matici $\mathbf{A}$ pomocí Gaussovy eliminační metody (GEM) zjednodušíme na horní trojúhelníkovou matici $\mathbf{U}$ a jednotlivé úpravy zapíšeme do matice $\mathbf{L}$ pomocí postupu popsaného výše.

Známe-li matice $\mathbf{L}$ a $\mathbf{U}$, pak zbývá vyřešit soustavu

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

přičemž zavedeme substituci

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}.$$

Takže nejprve řešíme soustavu $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ s dolní trojúhelníkovou maticí a následně soustavu $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$. Odtud získáme požadovaný vektor $\mathbf{x}$.

Příklad 3.1. Pomocí LU rozkladu řešte lineární systém

$$\begin{array}{rcrcrcr} x_1 & + & x_2 & + & x_3 & = & 4 \\ x_1 & + & 2x_2 & + & 4x_3 & = & 12 \\ 2x_1 & - & 3x_2 & - & x_3 & = & 4. \end{array}$$

Nejprve upravíme matici

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

na matici $\mathbf{U}$. Provedené úpravy poté zapíšeme do matice $\mathbf{L}$.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 2 & -3 & -1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & -5 & -3 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix} = \mathbf{U}$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & -5 & 1 \end{pmatrix}$$

Řešením soustavy

$$\mathbf{Ly} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & -5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 12 \\ 4 \end{pmatrix} = \mathbf{b}$$

je vektor $\mathbf{y} = (4, 8, 36)^T$ a řešením soustavy

$$\mathbf{Ux} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 8 \\ 36 \end{pmatrix} = \mathbf{y}$$

je vektor $\mathbf{x}^T = (2, -1, 3)$.

3.2 Výpočet vlastních čísel pomocí LU rozkladu

Dále se budeme zabývat aplikací LU rozkladu při výpočtu vlastních čísel. Tato podkapitola čerpá zejména z knih [2] a [4]. Hlavní myšlenkou LU rozkladu v tomto případě je, že matice

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 = \mathbf{L}_1\mathbf{U}_1,$$

kde $\mathbf{L}_1$ a $\mathbf{U}_1$ jsou dolní a horní trojúhelníkové matice, má stejná vlastní čísla jako matice

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{U}_1\mathbf{L}_1.$$

To plyne z rovnice

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{U}_1\mathbf{L}_1 = \mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{A}_1\mathbf{L}_1,$$

z které zároveň plyne, že matice $\mathbf{A}_1$ a $\mathbf{A}_2$ jsou podobné. Takto lze matice dále rozkládat. Obecně je matice $\mathbf{A}_k$ tvaru

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{L}_k\mathbf{U}_k = \mathbf{U}_{k-1}\mathbf{L}_{k-1}, \quad k = 1,2,\ldots.$$

Nyní si všimněme následujících vlastností matic $\mathbf{A}_k$,$\mathbf{L}_k$ a $\mathbf{U}_k$.

1. Všechny matice $\mathbf{A}_k$ jsou si podobné, a mají tedy stejná vlastní čísla.

2. Položíme-li

$$\mathbf{W}_k = \mathbf{U}_k\mathbf{U}_{k-1}\ldots\mathbf{U}_1, \quad \mathbf{N}_k = \mathbf{L}_k\mathbf{L}_{k-1}\ldots\mathbf{L}_1, \tag{3.1}$$

   pak $\mathbf{W}_k$ je horní trojúhelníková matice a $\mathbf{N}_k$ je dolní trojúhelníková matice. Protože jsou všechny matice regulární, platí

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{L}_k^{-1}\mathbf{A}_k\mathbf{L}_k = \mathbf{U}_k\mathbf{A}_k\mathbf{U}_k^{-1}.$$

   A odtud plyne indukcí, že

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{N}_k^{-1}\mathbf{A}_1\mathbf{N}_k = \mathbf{W}_k\mathbf{A}_1\mathbf{W}_k^{-1}.$$

3. Protože platí

$$\mathbf{L}_j\mathbf{U}_j = \mathbf{U}_{j-1}\mathbf{L}_{j-1},$$

   plyne odtud

$$\mathbf{N}_k\mathbf{W}_k = \mathbf{L}_1\ldots\mathbf{L}_{k-1}\mathbf{L}_k\mathbf{U}_k\mathbf{U}_{k-1}\ldots\mathbf{U}_1 = \mathbf{L}_1\ldots\mathbf{L}_{k-1}\mathbf{U}_{k-1}\mathbf{L}_{k-1}\mathbf{U}_{k-1}\ldots\mathbf{U}_1.$$

   Budeme-li tento postup opakovat, nakonec dostaneme

$$\mathbf{N}_k\mathbf{W}_k = (\mathbf{L}_1\mathbf{U}_1)^k = \mathbf{A}^k. \tag{3.2}$$

Odteď budeme předpokládat, že na hlavní diagonále všech matic $\mathbf{U}_k$ jsou pouze jedničky. Toho lze dosáhnout analogickou konstrukcí LU rozkladu jako jsme uvedli výše. Nyní uvedeme větu, která pojednává o konvergenci posloupnosti matic $\{\mathbf{A}_k\}$. Ta závisí na konvergenci posloupnosti matic $\{\mathbf{W}_k\}$.

Věta 3.2. *Jestliže posloupnost $\{\boldsymbol{W}_k\}$ pro $k \to \infty$ konverguje k regulární matici $\boldsymbol{W}_\infty$, pak existuje také $\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{A}_k$ a je to dolní trojúhelníková matice.*

Důkaz. Protože posloupnost $\{\mathbf{W}_k\}$ konverguje, existují limity

$$\lim_{k\to\infty} \mathbf{U}_k = \lim_{k\to\infty} \mathbf{W}_k \mathbf{W}_{k-1}^{-1} = \mathbf{I}$$

a

$$\mathbf{L}_\infty = \lim_{k\to\infty} \mathbf{L}_k = \lim_{k\to\infty} \mathbf{U}_k^{-1}\mathbf{A}_{k+1} = \lim_{k\to\infty} \mathbf{W}_{k-1}\mathbf{A}_1\mathbf{W}_{k-1}^{-1} = \mathbf{W}_\infty\mathbf{A}_1\mathbf{W}_\infty^{-1}.$$

Platí tedy

$$\mathbf{A}_\infty = \lim_{k\to\infty} \mathbf{A}_k = \lim_{k\to\infty} \mathbf{L}_k\mathbf{U}_k = \mathbf{L}_\infty.$$

Tím je věta dokázána. □

Zkoumáním konvergence metody se zde více zabývat nebudeme, avšak lze říci, že metoda LU rozkladu konverguje pro velmi širokou třídu matic, která obsahuje všechny symetrické pozitivně definitní matice, mnohé matice s reálnými různými vlastními čísly a mnohé matice s reálnými vlastními čísly, pro která žádná z předešlých podmínek neplatí. Pro bližší zkoumání konvergence lze nahlédnout do [5].

Příklad 3.2. Pomocí LU rozkladu najděte vlastní čísla matice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & -2 \\ 2 & 0 & 1 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Výpočet provedeme voláním funkce `lua(A,19)` v softwaru `MATLAB`. Výsledkem bude matice, která má 3 sloupce odpovídající počtu vlastních čísel a 19 řádků odpovídajících 19 LU rozkladům. Některé hodnoty zapíšeme do následující tabulky.

k	λ_1	λ_2	λ_3
1	1.0000	0.0000	1.0000
2	0.5000	1.2500	0.2500
3	1.8095	-0.0854	0.2759
4	5.8684	-4.1357	0.2673
5	3.0045	-1.2726	0.2681
10	3.7691	-2.0371	0.2679
15	3.7304	-1.9984	0.2679
20	3.7321	-2.0001	0.2679

Zaokrouhlená vlastní čísla jsou přitom $\lambda_1 = 3.7321$, $\lambda_2 = -2$ a $\lambda_3 = 0.2679$. Tento příklad budeme později počítat i pomocí QR rozkladu, výsledky tedy budeme moci porovnat.

Dále si všimněme využití této metody pro třídiagonální matice. Uvažujme následující třídiagonální matici

$$\mathbf{A}_k = \begin{pmatrix} b_1^k & c_1^k & 0 & \dots & 0 \\ 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & c_{n-1}^k \\ 0 & \dots & 0 & 1 & b_n^k \end{pmatrix}.$$

Definujme

$$q_j^k = b_j^k - e_{j-1}^k, \quad j = 1, \dots, n, \quad e_0^k = 0, \tag{3.3}$$

$$e_j^k = \frac{c_j^k}{q_j^k}, \qquad j = 1, \dots, n-1. \tag{3.4}$$

Potom se dá snadno ukázat, že $\mathbf{A}_k = \mathbf{L}_k \mathbf{U}_k$, kde

$$\mathbf{L}_k = \begin{pmatrix} q_1^k & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 1 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & q_n^k \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{U}_k = \begin{pmatrix} 1 & e_1^k & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & e_{n-1}^k \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Navíc také platí, že matice $\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{U}_k \mathbf{L}_k$ je třídiagonální matice stejného tvaru jako matice $\mathbf{A}_k$. Předpokládejme, že žádné q_j^k, $j = 1, \dots, n$, se nerovná nule.

Nyní vypočteme jednotlivé prvky matice $\mathbf{A}_{k+1}$ pomocí předchozího násobení matic $\mathbf{L}_k$ a $\mathbf{U}_k$, navíc index k v rovnicích (3.3) a (3.4) nahradíme indexem $k+1$. Dostaneme tedy

$$b_j^{k+1} = q_j^k + e_j^k = q_j^{k+1} + e_{j-1}^{k+1}, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$e_0^{k+1} = e_n^k = 0,$$

$$c_j^{k+1} = e_j^k q_{j+1}^k = e_j^{k+1} q_j^{k+1}, \quad j = 1, \dots, n-1.$$

Odtud už přímo plynou rekurence pro $k = 1, 2, \dots$

$$q_j^{k+1} = q_j^k + e_j^k - e_{j-1}^{k+1}, \quad j = 1, \dots, n, \tag{3.5}$$

$$e_j^{k+1} = \frac{e_j^k q_{j+1}^k}{q_j^{k+1}}, \quad j = 1, \dots, n-1, \tag{3.6}$$

$$e_0^{k+1} = e_n^k = 0. \tag{3.7}$$

Příklad 3.3. Najděte vlastní čísla matice

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

Protože matice je v třídiagonálním tvaru a na spodní diagonále jsou jedničky, můžeme použít rekurentní vztahy (3.5), (3.6), (3.7), které jsme odvodili výše. Nejprve ale pro výpočet prvních iterací využijeme vztahů (3.3), (3.4). Tedy

$$q_1^1 = b_1^1 - e_0^1 = 1 - 0 = 1,$$

$$e_1^1 = \frac{c_1^1}{q_1^1} = \frac{2}{1} = 2,$$

$$q_2^1 = b_2^1 - e_1^1 = 3 - 2 = 1,$$

$$e_2^1 = \frac{c_2^1}{q_2^1} = \frac{6}{1} = 6,$$

$$q_3^1 = b_3^1 - e_2^1 = 1 - 6 = -5.$$

A nyní už budeme využívat rekurenci. Tedy

$$q_1^2 = q_1^1 + e_1^1 - e_0^2 = 1 + 2 - 0 = 3,$$

$$e_1^2 = \frac{e_1^1 q_2^1}{q_1^2} = \frac{2 \cdot 1}{3} = \frac{2}{3},$$

$$q_2^2 = q_2^1 + e_2^1 - e_1^2 = 1 + 6 - \frac{2}{3} = \frac{19}{3},$$

$$e_2^2 = \frac{e_2^1 q_3^1}{q_2^2} = \frac{6 \cdot (-5)}{\frac{19}{3}} = -\frac{90}{19},$$

$$q_3^2 = q_3^1 + e_3^1 - e_2^2 = -5 + 0 + \frac{90}{19} = -\frac{5}{19}.$$

Spočteme ještě třetí krok

$$q_1^3 = q_1^2 + e_1^2 - e_0^3 = 3 + \frac{2}{3} - 0 = \frac{11}{3},$$

$$e_1^3 = \frac{e_1^2 q_2^2}{q_1^3} = \frac{\frac{2}{3}\frac{19}{3}}{\frac{11}{3}} = \frac{38}{33},$$

$$q_2^3 = q_2^2 + e_2^2 - e_1^3 = \frac{19}{3} - \frac{90}{19} - \frac{38}{33} = \frac{93}{209},$$

$$e_2^3 = \frac{e_2^2 q_3^2}{q_2^3} = \frac{-\frac{90}{19}\cdot\left(-\frac{5}{19}\right)}{\frac{93}{209}} = \frac{1650}{589},$$

$$q_3^3 = q_3^2 + e_3^2 - e_2^3 = -\frac{5}{19} + 0 - \frac{1650}{589} = -\frac{83795}{28861}.$$

Nyní pro přehlednost sestavíme tabulku.

k	q_1^k	e_1^k	q_2^k	e_2^k	q_3^k
1	1.0000	2.0000	1.0000	6.0000	-5.0000
2	3.0000	0.6667	6.3333	-4.7368	-0.2632
3	3.6667	1.1515	0.4450	2.8014	-2.9034

Pokud bychom ve výpočtech pokračovali, dostali bychom aproximace vlastních hodnot $\lambda_1 = 5$, $\lambda_2 = 1$ a $\lambda_3 = -1$.

Uplatnění pro LU rozklad lze nalézt také například ve výpočtech vlastních čísel matice, která je generována při numerickém řešení diferenciálních rovnic. Takové matice bývají často třídiagonální a postupným LU rozkladem se z nich stávají matice blízké horní trojúhelníkové matici. To znamená, že LU rozklad nuluje dolní subdiagonálu těchto matic a na hlavní diagonále potom zůstávají přímo iterace vlastních čísel.

Mějme například matici 5×5, která je generována systémem diferenciálních rovnic. Ta vypadá následovně

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

Aplikujme na matici $\mathbf{A}_1$ LU rozklad. Zjistíme, že

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{3}{4} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{4}{5} & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}_1 = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{3}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{5}{4} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{6}{5} \end{pmatrix}.$$

Potom

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{U}_1\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} -\frac{5}{2} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{4} & -\frac{5}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{8}{9} & -\frac{25}{12} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{15}{16} & -\frac{41}{20} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{24}{25} & -\frac{6}{5} \end{pmatrix}.$$

K dalším výpočtům můžeme opět využít přiloženou funkci `lua` v programu `MATLAB`. Potom spočítáme, že

$$\mathbf{A}_{20} \approx \begin{pmatrix} -3.699 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.023 & -3.030 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.004 & -2.003 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.268 \end{pmatrix},$$

přičemž zaokrouhlená vlastní čísla původní matice $\mathbf{A}_1$, sestupně uspořádaná podle absolutních hodnot, jsou $\lambda_1 = -3.732$, $\lambda_2 = -3$, $\lambda_3 = -2$, $\lambda_4 = -1$ a $\lambda_5 = -0.268$.

Kapitola 4

QR rozklad

Tato metoda, stejně jako LU rozklad, se používá jednak k řešení soustav lineárních rovnic, jednak k výpočtu vlastních čísel matic. Navíc v případě řešení soustav lineárních rovnic může být matice A typu $m \times n, m \geq n$, tedy ne čtvercová. QR rozklad využívá ortogonální transformace matice $\mathbf{A}$ na součin matic $\mathbf{QR}$. Pokud neuvedeme jinak, budeme předpokládat, že pracujeme s reálnými maticemi.

4.1 Householderova transformace

Mějme nadrovinu $\mathbf{W}$, která je určena na ni kolmým vektorem $\mathbf{u}$. Dále mějme libovolný vektor

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2,$$

přičemž složka $\mathbf{x}_1$ je kolmým průmětem vektoru $\mathbf{x}$ na nadrovinu $\mathbf{W}$. Platí tedy

$$\mathbf{x}_1 \perp \mathbf{u}, \quad \mathbf{x}_1 \perp \mathbf{x}_2. \tag{4.1}$$

Dále víme, že

$$\mathbf{x}_2 = c\mathbf{u},$$

kde c je libovolná konstanta. Nyní můžeme počítat

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x} &= \mathbf{x}_1 + c\mathbf{u} \quad \mid (\cdot, \mathbf{u}) \\ (\mathbf{x}, \mathbf{u}) &= (\mathbf{x}_1, \mathbf{u}) + c\,(\mathbf{u}, \mathbf{u})\,. \end{aligned}$$

Víme ale, že $(\mathbf{x}_1, \mathbf{u}) = 0$, protože platí (4.1). Můžeme tedy vyjádřit

$$c = \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{(\mathbf{u}, \mathbf{u})},$$

takže

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x} - \mathbf{x}_2 = \mathbf{x} - \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{u})}{(\mathbf{u}, \mathbf{u})}\mathbf{u}.$$

Chceme sestrojit vektor $\mathbf{y}$, který je reflexí vektoru $\mathbf{x}$ podle nadroviny $\mathbf{W}$. Toho docílíme tak, že od vektoru $\mathbf{x}$ odečteme dvojnásobek vektoru $\mathbf{x}_2$, protože vektor $\mathbf{x}_2$ je kolmým průmětem $\mathbf{x}$ do $\mathbf{W}$. Můžeme tedy psát

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} - 2\mathbf{x}_2 = \mathbf{x} - 2\frac{(\mathbf{x},\mathbf{u})}{(\mathbf{u},\mathbf{u})}\mathbf{u} = \mathbf{x} - \frac{2}{(\mathbf{u},\mathbf{u})}(\mathbf{x},\mathbf{u})\,\mathbf{u}. \tag{4.2}$$

Nyní můžeme maticově zapsat

$$(\mathbf{x},\mathbf{u})\,\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} [(\mathbf{x},\mathbf{u})],$$

kde $[(\mathbf{x},\mathbf{u})]$ je matice 1×1. A protože $(\mathbf{x},\mathbf{u}) = \mathbf{u}^T\mathbf{x}$, píšeme

$$\mathbf{u}\,[(\mathbf{x},\mathbf{u})] = \mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{x}.$$

Nyní dosadíme zpět do (4.2) a dostaneme

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} - \frac{2}{\mathbf{u}^T\mathbf{u}}\mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{x} = \underbrace{\left(\mathbf{I} - \frac{2}{\mathbf{u}^T\mathbf{u}}\mathbf{u}\mathbf{u}^T\right)}_{\mathbf{H}}\mathbf{x},$$

kde $\mathbf{H}$ je tzv. Householderova matice reflexe. Pomocí této matice jsme zrcadlili vektor $\mathbf{x}$ skrze $\mathbf{W}$ na vektor $\mathbf{y}$. Vektor $\mathbf{u}$ navíc můžeme volit normovaný, takže $\mathbf{u}^T\mathbf{u} = \| \mathbf{u} \|^2 = 1$.

Nyní uvedeme způsob, jakým lze pomocí Householderovy reflexe sestrojit ortogonální rozklad matice $\mathbf{A}$.

Definice 4.1. Matice

$$\mathbf{H} = \mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T$$

typu $n \times n$, kde $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$, $\|\mathbf{u}\| = 1$, se nazývá Householderova matice a vektor $\mathbf{u}$ se nazývá Householderův vektor.

Poznamenejme, že matice $\mathbf{H}$ z předchozího vztahu je symetrická a ortogonální, neboť platí

$$\mathbf{H}^T = \mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T, \quad \mathbf{H}^T\mathbf{H} = \mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T + 4\mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{u}\mathbf{u}^T,$$

a protože $\mathbf{u}^T\mathbf{u} = \|\mathbf{u}\| = 1$, dostaneme $\mathbf{H}^T\mathbf{H} = \mathbf{I}$, což znamená, že

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}^T = \mathbf{H}^{-1}.$$

Budeme hledat matici $\mathbf{H}$ tak, aby platilo

$$\mathbf{H}\mathbf{x} = \alpha\mathbf{e}_1, \tag{4.3}$$

kde $\mathbf{e}_1 = (1,0,\ldots,0)^T$. Z ortogonality $\mathbf{H}$ plyne, že

$$|\alpha| = \|\alpha\mathbf{e}_1\| = \|\mathbf{H}\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|.$$

Dosadíme-li do vztahu (4.3) $\alpha = \|\mathbf{x}\|$ a uvážíme-li, že $\mathbf{H}^{-1} = \mathbf{H}$, můžeme psát

$$\mathbf{x} = \mathbf{H}(\alpha\mathbf{e}_1) = \alpha(\mathbf{e}_1 - 2u_1\mathbf{u}),$$

kde u_1 je první souřadnice vektoru $\mathbf{u}$. Dále položíme-li $\mathbf{v} = (x_1 - \alpha, x_2, \ldots, x_n)^T$, pak můžeme psát

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|}.$$

Nyní vyjádřeme u_i pro jednotlivá x_i.

$$u_1 = \frac{v_1}{\| v_1 \|} = \frac{x_1 - \alpha}{\| v_1 \|},$$

$$u_i = \frac{x_i}{\| v_1 \|}, \qquad i = 2,3,\ldots n.$$

Položme $\beta = \alpha(\alpha - x_1)$ a použijme vztah pro u_1, potom dostaneme

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\sqrt{2\beta}}(x_1 - \alpha, x_2, \ldots, x_n)^T.$$

Známénko α se přitom volí tak, aby x_1 po transformaci bylo v absolutní hodnotě co největší, tedy $sgn\alpha = -sgnx_1$.

Při sestrojování Householderovy matice $\mathbf{H}$ obvykle postupujeme tak, že nejprve vypočteme skaláry α a β, poté vektory $\mathbf{u}$ a $\mathbf{v}$ a nakonec dosadíme do vztahu $\mathbf{H} = \mathbf{I} - \frac{1}{\beta}\mathbf{v}\mathbf{v}^T$, čímž sestrojíme Householderovu matici. Vše si ukážeme na jedoduchém příkladu. V tom budeme sice transformovat pouze jediný vektor, ale pokud bychom chtěli transformovat celou matici, rozdělíme ji na jednotlivé vektory a postup aplikujeme vícekrát.

Příklad 4.1. Transformujte vektor $\mathbf{x} = (1,3,1,2,1)^T$ na vektor $\tilde{\mathbf{x}} = (\star,0,0,0,0)^T$. Tedy hledáme matici $\mathbf{H}$, která nuluje všechny složky vektoru $\mathbf{x}$ kromě první.

Nejprve vypočteme

$$|\alpha| = \|\mathbf{x}\| = \sqrt{1^2 + 3^2 + 1^2 + 2^2 + 1^2} = 4.$$

Protože znaménko x_1 je kladné, zvolíme znaménko α záporné. Dále počítejme $\beta = -4(-4-1) = 20$. Dále vektory

$$\mathbf{v} = (5,3,1,2,1)^T, \quad \mathbf{u} = \frac{1}{\sqrt{40}}(5,3,1,2,1)^T.$$

Nyní už známe vše k sestrojení Householderovy matice, tedy

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{20} \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 3 & 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \mathbf{I} - \frac{1}{20} \begin{pmatrix} 25 & 15 & 5 & 10 & 5 \\ 15 & 9 & 3 & 6 & 3 \\ 5 & 3 & 1 & 2 & 1 \\ 10 & 6 & 2 & 4 & 2 \\ 5 & 3 & 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{20} \begin{pmatrix} -5 & -15 & -5 & -10 & -5 \\ -15 & 11 & -3 & -6 & -3 \\ -5 & -3 & 19 & -2 & -1 \\ -10 & -6 & -2 & 16 & -2 \\ -5 & -3 & -1 & -2 & 19 \end{pmatrix}.$$

Nulovaný vektor $\tilde{\mathbf{x}}$ získáme tak, že matici $\mathbf{H}$ vynásobíme původním vektorem $\mathbf{x}$.

$$\mathbf{Hx} = \frac{1}{20} \begin{pmatrix} -5 & -15 & -5 & -10 & -5 \\ -15 & 11 & -3 & -6 & -3 \\ -5 & -3 & 19 & -2 & -1 \\ -10 & -6 & -2 & 16 & -2 \\ -5 & -3 & -1 & -2 & 19 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{20} \begin{pmatrix} -80 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Vidíme tedy, že Householderovy matice lze poměrně jednoduše používat k nulování složek vektorů. Mějme nyní vektor $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)^T$. Chceme-li nulovat jeho posledních $n-k$ složek, položme $\mathbf{x}^{k-1} = (x_1, \ldots, x_{k-1})^T$ a $\mathbf{x}^{n-k+1} = (x_k, \ldots, x_n)$. Householderova matice řádu $n-k+1$, která nuluje tyto složky, bude vypadat takto

$$\tilde{\mathbf{H}}_k = \mathbf{I}_{n-k+1} - \frac{1}{\beta_k} \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k^T.$$

Je-li tedy

$$\mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{k-1} & 0 \\ 0 & \tilde{\mathbf{H}}_k \end{pmatrix}, \tag{4.4}$$

potom

$$\left(x_1, \ldots, x_{k-1}, \pm \left(\sum_{i=k}^{n} x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}, 0, \ldots, 0 \right)^T.$$

Nulování složek vektorů můžeme využít při konstrukci QR rozkladu. Mějme matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a předpokládejme její plnou sloupcovou hodnost. Pak lze Householderovu transformaci n-krát opakovat a dostaneme

$$\mathbf{H}_n \ldots \mathbf{H}_1 \mathbf{A} = \mathbf{R},$$

kde $\mathbf{R} = (\mathbf{R}_1, \mathbf{0})^T$. Matice $\mathbf{R}$ má stejně jako matice $\mathbf{R}_1$ nulové prvky pod diagonálou, matice $\mathbf{R}_1$ je navíc horní trojúhelníková matice. Dále položme

$$\mathbf{H}_n \ldots \mathbf{H}_1 = \mathbf{Q}^T = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1^T \\ \mathbf{Q}_2^T \end{pmatrix},$$

kde $\mathbf{Q}_1^T$ obsahuje prvních n řádků matice $\mathbf{Q}^T$. Potom platí

$$\mathbf{Q}^T\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1^T\mathbf{A} \\ \mathbf{Q}_2^T\mathbf{A} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}. \tag{4.5}$$

Dále počítejme

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{Q}_1^T\mathbf{A}.$$

Řešíme-li tedy systém $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ pomocí QR rozkladu, pak dále platí

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_1\mathbf{x} &= \mathbf{Q}_1^T\mathbf{Ax} \\ \mathbf{R}_1\mathbf{x} &= \mathbf{Q}_1^T\mathbf{b}, \end{aligned}$$

tedy řešení $\mathbf{x} = \mathbf{R}_1^{-1}\mathbf{Q}_1^T\mathbf{b}$ je také řešením původního systému $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, který je zadaný maticí $\mathbf{A}$ a vektorem pravých stran $\mathbf{b}$.

Příklad 4.2. Pomocí QR rozkladu řeště následující systém.

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & -1 \\ 2 & -4 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -4 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$

K sestrojení matic $\mathbf{Q}$ a $\mathbf{R}$ využijte Householderovy matice.

Začneme výpočtem skalárů

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \|\mathbf{a}_1\| = \sqrt{4^2+1^2+2^2+2^2} = 5, \\ \beta_1 &= \alpha_1(\alpha_1 - a_1) = 5(5-4) = 5. \end{aligned}$$

Nyní sestrojíme vektor

$$\mathbf{v}_1 = (a_1 - \alpha_1, a_2, a_3, a_4)^T = (-1,1,2,2)^T$$

a matici

$$\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1^T = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 2 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -2 & -2 \\ -1 & 1 & 2 & 2 \\ -2 & 2 & 4 & 4 \\ -2 & 2 & 4 & 4 \end{pmatrix}.$$

A nyní už můžeme sestrojit Householderovu matici

$$\mathbf{H}_1 = \mathbf{I} - \frac{1}{\beta_1}\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 1 & -1 & -2 & -2 \\ -1 & 1 & 2 & 2 \\ -2 & 2 & 4 & 4 \\ -2 & 2 & 4 & 4 \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 4 & -2 & -2 \\ 2 & -2 & 1 & -4 \\ 2 & -2 & -4 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matici $\mathbf{A} = \mathbf{A}_0$ zleva vynásobíme maticí $\mathbf{H}_1$, čímž dostaneme matici $\mathbf{A}_1$, tedy

$$\mathbf{H}_1\mathbf{A} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 4 & -2 & -2 \\ 2 & -2 & 1 & -4 \\ 2 & -2 & -4 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & -1 \\ 2 & -4 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & -1 \end{pmatrix} = \mathbf{A}_1.$$

Vidíme, že matice $\mathbf{A}_1$ má v prvním sloupci nuly pod diagonálou. Nyní budeme stejný postup aplikovat na druhý sloupec této matice. Víme však, že platí (4.4), proto nebudeme počítat s celým sloupcovým vektorem, ale vynecháme jeho první složku, neboť chceme nulovat členy pod hlavní diagonálou, tedy $\mathbf{a}_2 = (0,0,4)^T$. Máme opět

$$\alpha_2 = \|\mathbf{a}_2\| = \sqrt{0^2 + 0^2 + 4^2} = 4,$$
$$\beta_2 = \alpha_2(\alpha_2 - a_2) = 4(4-0) = 16$$

a

$$\mathbf{v}_2 = (a_2 - \alpha_2, a_3, a_4)^T = (-4,0,4)^T.$$

Matice $\mathbf{v}_2\mathbf{v}_2^T$ je nyní tvaru

$$\begin{pmatrix} -4 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -4 & 0 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16 & 0 & -16 \\ 0 & 0 & 0 \\ -16 & 0 & 16 \end{pmatrix}.$$

Householderova matice má tvar

$$\mathbf{H}_2^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{16}\begin{pmatrix} 16 & 0 & -16 \\ 0 & 0 & 0 \\ -16 & 0 & 16 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Matici $\mathbf{H}_2$ sestavíme tak, že na pozici h_{11} bude jednička, na ostatních pozicích prvního řádku a prvního sloupce budou nuly a na zbylých místech budou členy matice $\mathbf{H}_2^2$. Tato matice pouze přehazuje řádky matice $\mathbf{A}_1$ Můžeme počítat součin

$$\mathbf{H}_2\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 1 \\ 0 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} = \mathbf{A}_2.$$

Tím jsme dostali nuly pod diagonálou i ve druhém sloupci, celý proces zopakujeme ještě jednou pro třetí sloupec, přičemž opět díky (4.4) budeme počítat pouze s třetí a čtvrtou složkou třetího sloupce.

$$\alpha_3 = \|\mathbf{a}_3\| = \sqrt{0^2 + (-2)^2} = 2,$$
$$\beta_3 = \alpha_3(\alpha_3 - a_3) = 2(2-0) = 4,$$
$$\mathbf{v}_3 = (a_3 - \alpha_3, a_4)^T = (-2,-2)^T.$$

Matice $\mathbf{v}_3\mathbf{v}_3^T$ má tvar

$$\begin{pmatrix} -2 \\ -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 4 \\ 4 & 4 \end{pmatrix}.$$

Householderova matice je tvaru

$$\mathbf{H}_3^1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4 & 4 \\ 4 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

A konečně matice

$$\mathbf{A}_3 = \mathbf{H}_3\mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & -2 & 1 \\ 0 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 1 \\ 0 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{R}.$$

Řešení příkladu dostaneme ze vztahu $\mathbf{x} = \mathbf{R}_1^{-1}\mathbf{Q}_1^T\mathbf{b}$. Vynecháním posledního řádku z matice $\mathbf{R}$ získáme matici

$$\mathbf{R}_1 = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 1 \\ 0 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

potom snadno spočítáme, že inverzní matice

$$\mathbf{R}_1^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & \frac{1}{10} & -\frac{1}{20} \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

A dále matici $\mathbf{Q}_1^T$ získáme z matice

$$\mathbf{H}_3\mathbf{H}_2\mathbf{H}_1 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 & 2 \\ 1 & 4 & -2 & -2 \\ 2 & -2 & 1 & -4 \\ 2 & -2 & -4 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & -4 & 1 \\ -1 & -4 & 2 & 2 \\ -2 & 2 & -1 & 4 \end{pmatrix} = \mathbf{Q}^T$$

odebráním posledního řádku, tedy

$$\mathbf{Q}_1^T = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & -4 & 1 \\ -1 & -4 & 2 & 2 \end{pmatrix}.$$

A nakonec najdeme řešení

$$\mathbf{x} = \mathbf{R}_1^{-1}\mathbf{Q}_1^T\mathbf{b} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & \frac{1}{10} & -\frac{1}{20} \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{8} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & -4 & 1 \\ -1 & -4 & 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -4 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

4.2 Givensova rotace

Začneme opět jednoduchou ukázkou rotace v rovině.

Definice 4.2. Ortogonální matici $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ nazveme rotací, jestliže má tvar

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}.$$

Vektor $\mathbf{y} = \mathbf{Qx}$ vznikne otočením vektoru $\mathbf{x}$ o úhel ϕ po směru hodinových ručiček.[3] Stejně jako v případě Householderovy transformace uvažujme vektor $\mathbf{x} = (1,1)^T$. Zvolme dále požadované otočení o 45 stupňů. Potom

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\pi}{4}) & \sin(\frac{\pi}{4}) \\ -\sin(\frac{\pi}{4}) & \cos(\frac{\pi}{4}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}$$

a

$$\mathbf{Qx} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{y}.$$

Chceme-li nulovat prvky pod dolní diagonálou, pak lze efektivně využít Householderovy matice. Může se ale stát, že chceme nulovat prvky více selektivně, potom je vhodné využít Givensovy rotace.

Definice 4.3. Givensovou rotací nazveme matici, která má tvar

$$\mathbf{G}(i,j,\phi) = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & c & \dots & s & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & -s & \dots & c & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \dots & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix},$$

kde $c = \cos\phi$, $s = \sin\phi$ pro nějaké ϕ.

Jedná se tedy o jednotkovou matici s výjimkou i-tého a j-tého řádku a sloupce. Přičemž prvky na těchto pozicích jsou definovány následujícím způsobem.

$$\begin{aligned} g_{ii} = g_{jj} &= \cos\phi = c \\ g_{ij} &= \sin\phi = s \\ g_{ji} &= -\sin\phi = -s \end{aligned}$$

Dále poznamenejme, že $c^2 + s^2 = 1$ a že Givensovy matice jsou ortogonální.

Uvažujme nyní vektor $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$, potom vektor $\mathbf{y}$, který vznikne z vektoru $\mathbf{x}$ vynásobením Givensovou maticí, bude mít souřadnice

$$\begin{aligned} y_i &= cx_i + sx_j \\ y_j &= -sx_i + cx_j \\ y_k &= x_k, \quad k \neq i, j. \end{aligned}$$

Vidíme, že vektor zůstane až na souřadnice i a j stejný. Analogicky lze odvodit, že v případě matic se bude měnit pouze i-tý a j-tý řádek a sloupec. Této vlastnosti lze využít k nulování jednotlivých souřadnic vektorů.

Věta 4.1. *Nechť* $\boldsymbol{x} = \left(x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, x_n\right)^T, r = \sqrt{x_i^2 + x_j^2}$. *Potom transformací vektoru* $\boldsymbol{x}$ *pomocí Givensovy rotace s koeficienty*

$$c = \frac{x_i}{r}, \qquad s = \frac{x_j}{r}$$

dostaneme vektor $\boldsymbol{y}$, *pro jehož složky platí*

$$\begin{aligned} y_k &= x_k, \quad k \neq i, j, \\ y_i &= r \\ y_j &= 0. \end{aligned}$$

Důkaz. Dosazením dostaneme

$$\begin{aligned} y_i = \frac{x_i}{r} x_i + \frac{x_j}{r} x_j &= \frac{x_i^2 + x_j^2}{r} = \frac{r^2}{r} = r, \\ y_j = -\frac{x_j}{r} x_i + \frac{x_i}{r} x_j &= 0. \end{aligned}$$

Tím je věta dokázána. □

Proces nulování jednotlivých složek matic pomocí Givensovy matice si nyní budeme ilustrovat na příkladu. Jednotlivé výpočty jsou poměrně náročné. Proto, pokud nevyužijeme výpočetní software, je nutné počítat velmi pozorně.

Příklad 4.3. Pomocí QR rozkladu řešte systém

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & -1 \\ 2 & -4 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -4 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

K sestrojení matic $\mathbf{Q}$ a $\mathbf{R}$ využijte Givensovy rotace.

Nejprve budeme nulovat prvek a_{21}. Z matice $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}$ vypočteme

$$r_1 = \sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2} = \sqrt{4^2 + 1^2} = \sqrt{17},$$

potom

$$c_1 = \frac{a_{11}}{r_1} = \frac{4}{\sqrt{17}}, \quad s_1 = \frac{a_{21}}{r_1} = \frac{1}{\sqrt{17}}.$$

Nyní můžeme sestrojit matici $\mathbf{A}_2$ jako součin matice $\mathbf{A}_1$ a Givensovy matice $\mathbf{G}_{12}$, tedy

$$\mathbf{G}_{12}\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} \frac{4}{\sqrt{17}} & \frac{1}{\sqrt{17}} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{17}} & \frac{4}{\sqrt{17}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & -1 \\ 2 & -4 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{17}{\sqrt{17}} & -\frac{2}{\sqrt{17}} & -\frac{1}{\sqrt{17}} \\ 0 & -\frac{8}{\sqrt{17}} & -\frac{4}{\sqrt{17}} \\ 2 & -4 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{A}_2.$$

Nyní vytvoříme nulu namísto prvku a_{31}, opět začneme výpočtem

$$r_2 = \sqrt{a_{11}^2 + a_{31}^2}\sqrt{\frac{17^2}{17} + 2^2} = \sqrt{21}$$

a

$$c_2 = \frac{a_{11}}{r_2} = \frac{17}{\sqrt{17}\sqrt{21}}, \quad s_2 = \frac{a_{31}}{r_2} = \frac{2}{\sqrt{21}}.$$

Můžeme počítat

$$\mathbf{G}_{13}\mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} \frac{17}{\sqrt{17}\sqrt{21}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{21}} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{\sqrt{21}} & 0 & \frac{17}{\sqrt{17}\sqrt{21}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{17}{\sqrt{17}} & -\frac{2}{\sqrt{17}} & -\frac{1}{\sqrt{17}} \\ 0 & -\frac{8}{\sqrt{17}} & -\frac{4}{\sqrt{17}} \\ 2 & -4 & 2 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{21}{\sqrt{21}} & -\frac{10}{\sqrt{21}} & \frac{3}{\sqrt{21}} \\ 0 & -\frac{8}{\sqrt{17}} & -\frac{4}{\sqrt{17}} \\ 0 & -\frac{64}{\sqrt{17}\sqrt{21}} & \frac{36}{\sqrt{17}\sqrt{21}} \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{A}_3.$$

Poslední složku prvního sloupce vynulujeme pomocí

$$r_3 = \sqrt{a_{11}^2 + a_{41}^2} = \sqrt{\frac{21^2}{21} + 2^2} = \sqrt{25} = 5$$

a

$$c_3 = \frac{a_{11}}{r_3} = \frac{21}{5\sqrt{21}}, \quad s_3 = \frac{a_{41}}{r_3} = \frac{2}{5}.$$

Potom

$$\mathbf{G}_{14}\mathbf{A}_3 = \begin{pmatrix} \frac{21}{\sqrt{21}} & 0 & 0 & \frac{2}{5} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\frac{2}{5} & 0 & 0 & \frac{21}{\sqrt{21}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{21}{\sqrt{21}} & -\frac{10}{\sqrt{21}} & \frac{3}{\sqrt{21}} \\ 0 & -\frac{8}{\sqrt{17}} & -\frac{4}{\sqrt{17}} \\ 0 & -\frac{64}{\sqrt{17}\sqrt{21}} & \frac{36}{\sqrt{17}\sqrt{21}} \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 5 & -2 & 1 \\ 0 & -\frac{8}{\sqrt{17}} & -\frac{4}{\sqrt{17}} \\ 0 & -\frac{64}{\sqrt{17}\sqrt{21}} & \frac{36}{\sqrt{17}\sqrt{21}} \\ 0 & \frac{4}{\sqrt{21}} & \frac{3}{\sqrt{21}} \end{pmatrix} = \mathbf{A}_4.$$

Tím jsme až na první složku vynulovali první sloupec. Stejným postupem bychom nulovali třetí a čtvrtou složku druhého sloupce, přičemž bychom dostali matice $\mathbf{A}_5$ a $\mathbf{A}_6$, a nakonec bychom vynulovali prvek $\mathbf{a}_{43}$. Tím bychom dostali matici $\mathbf{A}_7$, která má stejné prvky jako matice získaná Householderovými maticemi.

$$\mathbf{A}_7 = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 1 \\ 0 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Další postup je totožný s postupem v příkladu 4.2, kde jsme využívali Householderovy matice. Příklad tedy znovu dopočítávat nebudeme.

4.3 Jednoznačnost QR rozkladu

Věta 4.2. *Nechť $\boldsymbol{A}$ je typu $m \times n, m \geq n$ a má lineárně nezávislé sloupce. Pak existuje jediná dvojice matic $\boldsymbol{Q}$ typu $m \times n$ a $\boldsymbol{R}$ typu $n \times n$ taková, že $\boldsymbol{Q}^\star \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{D}$ je diagonální matice s kladnými prvky a $\boldsymbol{R}$ je horní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále, přičemž platí*

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

Důkaz. Matici $\mathbf{Q} = (\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n)$ a matici $\mathbf{R} = (r_{ij})$ lze získat pomocí matice $\mathbf{A}^n$ v posloupnosti $\mathbf{A} = \mathbf{A}^0, \mathbf{A}^1, \ldots, \mathbf{A}^n$, kde $\mathbf{A}^k = \left(\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_k, \mathbf{a}_{k+1}^k, \ldots, \mathbf{a}_n^k\right), j = 1, \ldots, n$, vypočteme z předchozího $\left(\mathbf{A}^{k-1} = \mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{a}_k^{k-1}, \ldots, \mathbf{a}_n^{k-1}\right)$ pomocí následujících vztahů.

$$\mathbf{q}_k = \mathbf{a}_k^{k-1}, \qquad d_k = \mathbf{q}_k^T \mathbf{q}_k, \qquad r_{kk} = 1$$

$$r_{ki} = \frac{\mathbf{q}_k \mathbf{a}_i^{k-1}}{d_k}, \qquad \mathbf{a}_i^k = \mathbf{a}_i^{k-1} - r_{ki}\mathbf{q}_k, \qquad j = k+1, \ldots, n. \tag{4.6}$$

Nejdříve ukážeme, že předchozí vztahy (4.6) vedou pro počáteční $\mathbf{A}^0 = \mathbf{A}$ k maticím $\mathbf{Q}$ a $\mathbf{R}$, $(r_{ik}) = 0$ pro $i > k$, přičemž tyto matice splňují podmínky $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ a

$$\mathbf{Q}^\star \mathbf{Q} = \mathbf{D}. \tag{4.7}$$

Použijeme indukci podle k, abychom dokázali, že pro matici $\mathbf{A}^k, \quad k = 1, \ldots, n$, platí

$$\left(\mathbf{q}_i, \mathbf{a}_j^k\right) = \mathbf{0} \qquad i = 1, \ldots, k, \quad j = k+1, \ldots, n. \tag{4.8}$$

A také

$$\mathbf{q}_p = \mathbf{q}_q = \mathbf{0} \quad p \neq q, \quad p, q = 1, \ldots, k. \tag{4.9}$$

Pro $k = 0$ není co dokazovat. Ukážeme, že pro k z podmínek (4.8) a (4.9) plynou stejné podmínky pro $k+1$. Především podle (4.8) pro $i = 1, \ldots, k$ platí

$$(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_{k+1}) = \left(\mathbf{q}_i, \mathbf{a}_{k+1}^k\right) = \mathbf{0},$$

to znamená, že (4.9) platí také pro $k+1$. Dále podle (4.6), (4.8), (4.9) pro $k+1$ a $i = 1, \ldots, k$, $j = k+2, \ldots, n$ je

$$\left(\mathbf{q}_i, \mathbf{a}_j^{k+1}\right) = \left(\mathbf{q}_i, \mathbf{a}_j^k\right) - r_{k+1,j}\left(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_{k+1}\right) = \mathbf{0}.$$

Nyní podle (4.6) je pro $i = k+1$ a $j = k+2, \ldots, n$

$$\left(\mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{a}_j^{k+1}\right) = \left(\mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{a}_j^k\right) - r_{k+1,j}\left(\mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{q}_{k+1}\right) = \left(\mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{a}_j^k\right) -$$

$$- \left(\left(\mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{a}_j^k\right) / d_{k+1}\right)\left(\mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{q}_{k+1}\right).$$

Platí proto (4.7). Pokud dále sečteme poslední vztahy v (4.6), pro $k = 1, \ldots, i-1$ dostaneme

$$\mathbf{q}_i = \mathbf{a}_i^{i-1} = \mathbf{a}_i^0 - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki}\mathbf{q}_k$$

neboli

$$\mathbf{a}_i^0 = \sum_{k=1}^{i} r_{ki}\mathbf{q}_k, \quad i = 1, \ldots, n.$$

To znamená, že matici $\mathbf{A}$ lze psát ve tvaru

$$\mathbf{A} = (\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n) \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \ldots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \ldots & r_{2n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & r_{nn} \end{pmatrix} = \mathbf{QR}.$$

Nyní stačí dokázat jednoznačnost. Nechť kromě $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ platí také $\mathbf{A} = \mathbf{Q}_1\mathbf{R}_1$, kde $\mathbf{Q}_1^\star\mathbf{Q}_1 = \mathbf{D}_1$ je diagonální matice a $\mathbf{R}_1$ je trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále. Potom $\mathbf{Q}_1\mathbf{R}_1 = \mathbf{QR}$, odkud $\mathbf{Q}_1 = \mathbf{QRR}_1^{-1}$. Potom tedy

$$\mathbf{D}_1 = \mathbf{Q}_1^\star\mathbf{Q}_1 = \left(\mathbf{RR}_1^{-1}\right)^\star \mathbf{Q}^\star\mathbf{Q}\left(\mathbf{RR}_1^{-1}\right) = \left(\mathbf{RR}_1^{-1}\right)^\star \mathbf{D}\left(\mathbf{RR}_1^{-1}\right)$$

neboli

$$\left(\left(\mathbf{RR}_1^{-1}\right)^\star\right)^{-1}\mathbf{D}_1 = \mathbf{D}\left(\mathbf{RR}_1^{-1}\right).$$

Na levé straně je dolní trojúhelníková matice, na pravé straně pak horní trojúhelníková matice, proto musí být obě diagonální a platí $\mathbf{RR}_1^{-1} = \mathbf{I}$, z čehož plyne, že $\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}$ a také $\mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}$. Tím je věta dokázána. $\square$

Uvažujme nyní lineární systém $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, kde $\mathbf{A}$ je čtvercová regulární matice. Ukážeme, že řešení $\mathbf{x}_0$ této soustavy je také řešením soustavy

$$\mathbf{Rx} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{Q}^{\star}\mathbf{b}.$$

Pokud totiž platí

$$\mathbf{Rx}_0 = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{Q}^{\star}\mathbf{b}, \tag{4.10}$$

pak

$$\mathbf{Ax}_0 = \mathbf{QRx}_0 = \mathbf{QD}^{-1}\mathbf{Q}^{\star}\mathbf{b} = \mathbf{QQ}^{-1}\left(\mathbf{Q}^{\star}\right)^{-1}\mathbf{Q}^{\star}\mathbf{b} = \mathbf{b},$$

protože v tomto případě je $\mathbf{Q}$ čtvercová regulární matice. Uvedená metoda platí ale i v případě, že matice $\mathbf{A}$ je typu $m \times n, m > n$, pokud jsou její sloupce lineárně nezávislé. Platí totiž následující věta.

Věta 4.3. *Nechť $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ je soustava, jejíž matice $\boldsymbol{A}$ je typu $m \times n, m > n$ a její sloupce jsou lineárně nezávislé. Je-li $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$ rozklad matice $\boldsymbol{A}$ podle předchozí věty, pak řešení $\hat{\boldsymbol{x}}$ soustavy*

$$\boldsymbol{Rx} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{Q}^{\star}\boldsymbol{b}$$

splňuje rovnost

$$\boldsymbol{A}^{\star}\left(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}}\right) = \boldsymbol{0}. \tag{4.11}$$

Tato rovnost definuje vektory $\hat{\boldsymbol{x}}$, které mají mezi všemi vektory $\boldsymbol{x}$ minimální euklidovskou normu rezidua $\boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}$, tedy

$$\left\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}}\right\| \leq \left\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{Ax}\right\|. \tag{4.12}$$

Důkaz. Nejprve dokážeme, že (4.12) plyne z (4.11). Pro libovolný vektor $\mathbf{x}$ a vektor $\hat{\mathbf{x}}$ splňující (4.11) totiž platí

$$\left\|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\right\|^2 = \left(\mathbf{b} - \mathbf{Ax}, \mathbf{b} - \mathbf{Ax}\right) = \left(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\right), \mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\right)\right) =$$

$$= \left(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}\right) + \left(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\right)\right) + \left(\mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\right), \mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}\right) + \left(\mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\right), \mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\right)\right) =$$

$$= \left\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}\right\|^2 + \left\|\mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\right)\right\|^2 \geq \left\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}\right\|^2,$$

protože

$$\left(\mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\right), \mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}\right) = \left(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}, \mathbf{A}^{\star}\left(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}\right)\right) = 0,$$

tedy také

$$\left(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{A}\left(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\right)\right) = 0.$$

Nyní nechť

$$\mathbf{R}\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{Q}^{\star}\mathbf{b}.$$

Potom

$$\mathbf{A}^{\star}\left(\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}\right) = \mathbf{R}^{\star}\mathbf{Q}^{\star}\left(\mathbf{b} - \mathbf{QR}\hat{\mathbf{x}}\right) = \mathbf{R}^{\star}\mathbf{Q}^{\star}\mathbf{b} - \mathbf{R}^{\star}\mathbf{Q}^{\star}\mathbf{QD}^{-1}\mathbf{Q}^{\star}\mathbf{b} = \mathbf{0},$$

protože $\mathbf{Q}^{\star}\mathbf{QD}^{-1} = \mathbf{I}$. Tímto je věta dokázána.

□

Příklad 4.4. Pomocí QR rozkladu řešte lineární systém

$$\begin{array}{rcrcrcl} x_1 & + & x_2 & + & x_3 & = & 4 \\ x_1 & + & 2x_2 & + & 4x_3 & = & 12 \\ 2x_1 & - & 3x_2 & - & x_3 & = & 4. \end{array}$$

K výpočtům využijeme vztahů (4.6). Nejprve si vypíšeme matici $\mathbf{A}$ a vektor pravých stran $\mathbf{b}$.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 2 & -3 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 4 \\ 12 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

Pro $k = 1$ počítáme

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_1 &= \mathbf{a}_1^0 = (1,1,2)^T \\ d_1 &= \left(\mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_1\right) = 6 \\ r_{11} &= 1 \\ r_{12} &= \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_2^0}{d_1} = -\frac{1}{2} \\ r_{13} &= \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_3^0}{d_1} = \frac{1}{2} \\ \mathbf{a}_1^1 &= \mathbf{a}_1^0 - r_{11}\mathbf{q}_1 = (0,0,0)^T \\ \mathbf{a}_2^1 &= \mathbf{a}_2^0 - r_{12}\mathbf{q}_1 = \left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, -2\right)^T \\ \mathbf{a}_3^1 &= \mathbf{a}_3^0 - r_{13}\mathbf{q}_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{7}{2}, -2\right)^T. \end{aligned}$$

Nyní pro $k = 2$

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_2 &= \mathbf{a}_2^1 = \left(\frac{3}{2}, \frac{5}{2}, -2\right)^T \\ d_2 &= \left(\mathbf{q}_2^T \mathbf{q}_2\right) = \frac{25}{2} \\ r_{22} &= 1 \\ r_{21} &= \frac{\mathbf{q}_2^T \mathbf{a}_1^1}{d_2} = 0 \\ r_{23} &= \frac{\mathbf{q}_2^T \mathbf{a}_3^1}{d_2} = \frac{27}{25} \\ \mathbf{a}_1^2 &= \mathbf{a}_1^1 - r_{21}\mathbf{q}_2 = (0,0,0)^T \\ \mathbf{a}_2^2 &= \mathbf{a}_2^1 - r_{22}\mathbf{q}_2 = (0,0,0)^T \\ \mathbf{a}_3^2 &= \mathbf{a}_3^1 - r_{23}\mathbf{q}_2 = \left(-\frac{28}{25}, \frac{20}{25}, \frac{4}{25}\right)^T. \end{aligned}$$

A nakonec pro $k = 3$ dostaneme

$$\begin{aligned}
\mathbf{q}_3 = \mathbf{a}_3^2 &= \left(-\frac{28}{25}, \frac{20}{25}, \frac{4}{25}\right)^T \\
d_3 = \left(\mathbf{q}_3^T \mathbf{q}_3\right) &= \frac{48}{25} \\
r_{33} &= 1 \\
r_{31} &= \frac{\mathbf{q}_3^T \mathbf{a}_1^2}{d_3} = 0 \\
r_{32} &= \frac{\mathbf{q}_3^T \mathbf{a}_2^2}{d_3} = 0 \\
\mathbf{a}_1^3 &= \mathbf{a}_1^2 - r_{31}\mathbf{q}_3 = (0,0,0)^T \\
\mathbf{a}_2^3 &= \mathbf{a}_2^2 - r_{32}\mathbf{q}_3 = (0,0,0)^T \\
\mathbf{a}_3^3 &= \mathbf{a}_3^2 - r_{33}\mathbf{q}_3 = (0,0,0)^T .
\end{aligned}$$

Výsledky nyní zapíšeme do matic.

$$\mathbf{Q} = (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3) \begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{2} & -\frac{28}{25} \\ 1 & \frac{5}{2} & \frac{20}{25} \\ 2 & -2 & \frac{4}{25} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R} = \left(r_{ij}\right) \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{27}{25} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{25}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{48}{25} \end{pmatrix}.$$

Pro kontrolu můžeme ověřit, platí-li $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$, a platí-li $\mathbf{Q}^\star\mathbf{Q} = \mathbf{D}$.

$$\mathbf{QR} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{2} & -\frac{28}{25} \\ 1 & \frac{5}{2} & \frac{20}{25} \\ 2 & -2 & \frac{4}{25} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{27}{25} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 2 & -3 & -1 \end{pmatrix} = \mathbf{A}$$

$$\mathbf{Q}^\star\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ \frac{3}{2} & \frac{5}{2} & -2 \\ -\frac{28}{25} & \frac{20}{25} & -\frac{4}{25} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{2} & -\frac{28}{25} \\ 1 & \frac{5}{2} & \frac{20}{25} \\ 2 & -2 & \frac{4}{25} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{25}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{48}{25} \end{pmatrix} = \mathbf{D}$$

Vidíme, že oba vztahy jsou v pořádku, proto můžeme přejít k samotnému řešení soustavy pomocí maticového rozkladu. Toto řešení je podle (4.10) tvaru $\mathbf{Rx}_0 = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{Q}^\star\mathbf{b}$. Vypočteme pravou stranu.

$$\mathbf{D}^{-1}\mathbf{Q}^\star\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{25} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{25}{48} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ \frac{3}{2} & \frac{5}{2} & -2 \\ -\frac{28}{25} & \frac{20}{25} & \frac{4}{25} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 12 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ \frac{56}{25} \\ 3 \end{pmatrix}$$

Zbývá určit inverzní matici k matici $\mathbf{R}$.

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{27}{25} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & -\frac{104}{27} \\ 0 & 1 & -\frac{25}{27} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{R}^{-1}$$

A nyní už určíme přesné řešení

$$\mathbf{x}_0 = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & -\frac{104}{27} \\ 0 & 1 & -\frac{25}{27} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ \frac{56}{25} \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

4.4 Výpočet vlastních čísel pomocí QR rozkladu

QR rozklad lze také použít k výpočtu vlastních čísel. Podobně jako u LU rozkladu, i zde je základní myšlenka v tom, že matici soustavy $\mathbf{A}$ lze rozložit na součin ortogonální matice $\mathbf{Q}$ a horní trojúhelníkové matice $\mathbf{R}$. Tato podkapitola čerpá zejména z knih [4] a [6]. Platí tedy

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

přičemž platí, že matice $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}$ má stejná vlastní čísla jako matice

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

To plyne z rovnice

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{R}_1\mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}_1^{-1}\mathbf{A}_1\mathbf{Q}_1,$$

ze které rovněž plyne, že matice $\mathbf{A}_1$ a $\mathbf{A}_2$ jsou podobné. Takto lze sestrojit posloupnost matic $\{\mathbf{A}_k\}_{k=1}^n$, kde $\mathbf{A}_k$ je tvaru

$$\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{R}_k\mathbf{Q}_k, \quad k = 1,\dots,n, \quad \mathbf{A}_1 = \mathbf{A}. \tag{4.13}$$

Analogicky k rovnicím (3.1) a (3.2) lze sestrojit také rovnice pro QR rozklad. A podobně jako ve větě 3.2 platí, že pokud konverguje součin $\mathbf{Q}_1 \dots \mathbf{Q}_k$ pro $k \to \infty$, pak také matice $\mathbf{A}_k$ konvergují k horní trojúhelníkové matici, která má na hlavní diagonále vlastní čísla matice $\mathbf{A}$. Tato vlastní čísla jsou navíc uspořádaná podle klesajících vlastních hodnot. [4].

Nyní se pokusíme najít vlastní čísla několika jednoduchých matic. Přitom budeme sledovat, v jakých případech QR rozklad dobře aproximuje vlastní čísla a v jakých nikoliv. K výpočtům budeme používat systém `MATLAB`, který umí QR rozklad přímo počítat. Zbývá pouze napsat funkci, která bude QR rozklad n-krát opakovat. Příklad tedy vypočteme funkcí `qra(A,n)`, kde parametr A je matice, jejíž vlastní čísla chceme počítat, a parametr n vyjadřuje požadovaný počet kroků. Výstupem potom je matice $\mathbf{D}$, která obsahuje n řádků. Počet sloupců je určen počtem vlastních čísel matice $\mathbf{A}$. V každém řádku je tedy popsána i-tá aproximace vektoru vlastních čísel pro $i = 2,\dots,n$.

Příklad 4.5. Pomocí QR rozkladu najděte vlastní čísla matice

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

Příklad řešíme voláním výše uvedené funkce `qra(A,19)`, kde nám stačí zadat požadovaný počet 19 kroků, neboť první aproximace je přímo diagonála matice $\mathbf{A}$. Takto zadaná funkce tedy vrací aproximace $2,3,\dots,20$. Výsledky shrneme do tabulky.

k	λ_1	λ_2	λ_3
1	1.0000	3.0000	1.0000
2	3.5000	3.1667	-1.6667
3	4.6923	0.5987	-0.2910
4	4.9353	1.6615	-1.5568
5	4.9924	0.3542	-0.3467
10	5.0000	1.5455	-1.5455
15	5.0000	0.3490	-0.3490
20	5.0000	1.5455	-1.5455

Vlastní čísla matice **A** jsou $5, 1, -1$. Vidíme, že jednoduchý QR algoritmus dobře aproximuje pouze vlastní hodnotu 5. Aproximace hodnot -1 a 1 okolo těchto čísel oscilují. Zkusíme další příklad.

Příklad 4.6. Pomocí QR rozkladu najděte vlastní čísla matice

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 4 & 7 & -5 \\ -4 & 5 & 0 \\ 1 & 9 & -4 \end{pmatrix}.$$

Příklad opět řešíme voláním funkce `qra(B,19)`. Výsledky shrneme v tabulce.

k	λ_1	λ_2	λ_3
1	4.0000	5.0000	-4.0000
2	1.2121	3.6586	0.1293
3	4.6873	-0.5458	0.8585
4	1.7079	2.2784	1.0137
5	-2.0111	5.9955	1.0156
10	2.8030	1.1970	1.0000
15	-0.6030	4.6030	1.0000
20	1.6752	2.3248	1.0000

Vlastní čísla matice **B** jsou $2+3i, 2-3i, 1$. Z tabulky je vidět, že jednoduchý QR algoritmus dobře aproximuje opět pouze jedno vlastní číslo. O zbylých dvou nelze říci nic.

Příklad 4.7. Pomocí QR rozkladu najděte vlastní čísla matice

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 4 & 4 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ -2 & -4 & 2 \end{pmatrix}.$$

Postupujeme obdobně jako u předchozích příkladů. Tabulka bude nyní vypadat takto.

k	λ_1	λ_2	λ_3
1	4.0000	0.0000	2.0000
2	3.2381	2.4286	0.3333
3	2.7857	2.1667	1.0476
4	2.5688	2.0834	1.3478
5	2.4444	2.0494	1.5062
10	2.2112	2.0105	1.7783
15	2.1383	2.0044	1.8573
20	2.1028	2.0024	1.8948

Vlastní číslo matice **C** je trojnásobné a je rovno 2. Tentokrát vidíme, že vlastní hodnoty v tabulce se blíží vlastní hodnotě matice **C**. Nicméně rychlost konvergence je poměrně nízká. Ani tentokrát tedy není jednoduchý QR algoritmus efektivní.

Příklad 4.8. Pomocí QR rozkladu najděte vlastní čísla matice

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & -2 \\ 2 & 0 & 1 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Výsledná tabulka vypadá následovně.

k	λ_1	λ_2	λ_3
1	1.0000	0.0000	1.0000
2	3.1667	-1.3571	0.1905
3	2.7025	-0.9728	0.2703
4	4.1048	-2.3718	0.2670
5	3.4543	-1.7224	0.2680
10	3.7434	-2.0114	0.2679
15	3.7315	-1.9995	0.2679
20	3.7321	-2.0000	0.2679

Vlastní čísla matice **D** jsou $3.7321, -2, 0.2679$. V tomto případě je jednoduchý QR rozklad nejefektivnější, neboť našel všechna vlastní čísla v poměrně nízkém počtu kroků.

Všimněme si, že pouze v příkladě 4.8 má matice v absolutní hodnotě různá čísla. V příkladě 4.5 má matice **A** vlastní hodnoty $|\lambda_2| = |\lambda_3| = 1$. V příkladě 4.6 má matice **B** komplexně sdružená vlastní čísla, jejich absolutní hodnoty se tedy také rovnají. A v příkladě 4.7 jsou dokonce všechna vlastní čísla rovna dvěma.

Nelze tedy obecně říci, že posloupnost matic $\{\mathbf{A}_k\}$ popsaná rekurentním vztahem (4.13) konverguje na hlavní diagonále k vlastním hodnotám původní matice **A**. Nyní sestrojíme algoritmus, který aproximuje vlastní čísla čtvercových matic bez ohledu na to, zda jsou vlastní čísla reálná nebo komplexní, či zda mají stejnou absolutní hodnotu.

Následující tvrzení se sice zatím nepodařilo dokázat, avšak na základě mnohých numerických výpočtů můžeme předpokládat, že platí.

Myšlenka algoritmu spočívá v tom, že po provedení dostatečného množství kroků se matice $\mathbf{A}_k \in \mathbb{R}^{n\times n}$ blíží matici, která je tvaru

$$\mathbf{A}_k = \begin{pmatrix} T_1 & \star & \dots & \star \\ 0 & T_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \star \\ 0 & \dots & 0 & T_p \end{pmatrix},$$

kde $T_i, \quad i = 1, \dots, p$, jsou bloky 1×1, nebo 2×2. Jedná se tedy o blokově horní trojúhelníkovou matici. Prvky zastoupené hvězdičkami mohou být libovolná čísla,která pro výpočet pomocí našeho algoritmu nejsou důležitá. Přitom platí, že je-li T_i řádu 1, pak hodnota T_i přímo aproximuje jednu z vlastních hodnot matice $\mathbf{A}_k$, a tedy i původní matice $\mathbf{A}$. Je-li naopak blok T_i řádu dva, potom jsou jeho vlastní čísla komplexně sdružená a snadno je vypočteme, neboť mějme

$$T_i = \begin{pmatrix} a_i & b_i \\ c_i & d_i \end{pmatrix}.$$

Potom vlastní hodnoty bloku T_i odpovídají kořenům polynomu

$$\lambda^2 - \lambda\,(a_i + d_i) - b_i c_i + a_i d_i.$$

Po provedení k kroků vypadá $\mathbf{A}_k$ takto

$$\mathbf{A}_k = \begin{pmatrix} T_1 & \star & \dots & \star \\ \varepsilon_{t,1} & T_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \star \\ \varepsilon_{n,1} & \dots & \varepsilon_{n,n-r} & T_p \end{pmatrix},$$

kde $t = \{2,3\}$, $r = \{1,2\}$ v závislosti na tom, jaké rozměry mají bloky T_1 a T_p. Označme $\mathbf{A}_\varepsilon$ matici, která obsahuje pouze prvky ε z předchozí matice, na zbylých pozicích jsou nuly. Dostatečnou přesností výpočtu potom rozumíme zvolenou konstantu h, pro kterou platí

$$\|\mathbf{A}_\varepsilon\| < h.$$

Algoritmus pro nalezení vlastních čísel pomocí QR rozkladu

Nejprve vytvoříme funkci s názvem `qrrozklad`, jejíž vstupní hodnoty jsou matice $\mathbf{A}$ a požadovaná přesnost. Výstupem pak bude vektor vlastních hodnot matice $\mathbf{A}$.

`function[vlc] = qrrozklad(A, chyba)`

Do proměnné `norma` uložíme normu matice, která pod dolní subdiagonálou obsahuje prvky matice $\mathbf{A}$, jinde nuly.

```
L = tril(A, -2);
norma = norm(L);
```

Nyní napíšeme cyklus, který eliminuje prvky pod dolní subdiagonálou.

```
while chyba < norma
[Q,R] = qr(A);
A = R*Q;
L = tril(A,-2);
norma = norm(L);
end
```

Do proměnné `vektor` uložíme prvky dolní subdiagonály.

```
vektor = diag(A,-1);
```

A nyní napíšeme cyklus, který nuluje vybrané prvky na dolní subdiagonále.

```
while abs(vektor(j)) > chyba abs(vektor(j+1)) > chyba
[Q,R] = qr(A);
A = R*Q;
vektor = diag(A,-1);
end
```

Dále identifikujeme pozice, na kterých jsou bloky 1×1, tedy odpovídající reálná vlastní čísla, a bloky 2×2, tedy odpovídající komplexní vlastní hodnoty.

```
pozice = abs(vektor) > chyba;
pozice = [pozice;0];
kindexy = find(pozice);
kindexy2 = kindexy+1;
kindexy3 = [kindexy;kindexy2];
kindexy3 = sort(kindexy3);
komplex = size(kindexy,1);
real = diag(A);
real(kindexy3) = [];
vlc = [real];
```

Reálná vlastní čísla už známe, zbylá komplexní tedy vypočteme pomocí cyklu `for`.

```
for i = 1 : komplex
M = A(kindexy(i) : kindexy(i)+1,kindexy(i) : kindexy(i)+1);
diskr = (-M(1,1)-M(2,2))^2 - 4*(M(1,1)*M(2,2)-M(1,2)*M(2,1));
vl1 = (M(1,1)+M(2,2)+sqrt(diskr))/2;
vl2 = (M(1,1)+M(2,2)-sqrt(diskr))/2;
vl = [vl1;vl2];
vlc = [vlc;vl];
end
```

Vlastní hodnoty nakonec seřadíme podle klesajících absolutních hodnot.

```
vlc = sort(vlc,'descend');
```

Funkci ukončíme a jsme hotovi.

```
end
```

Nyní ještě několik poznatků o vztahu QR rozkladu a pseudoinverzní matice. Mějme obdélníkovou $m \times n$ matici $\mathbf{A}$, $m \geq n$. Připomeňme, že po provedení QR rozkladu je matice $\mathbf{Q}$ typu $m \times m$ a matice $\mathbf{R}$ typu $m \times n$, přičemž posledních $m-n$ řádků matice $\mathbf{R}$ obsahuje pouze nuly. Matice $\mathbf{R}_1$ vznikne z matice $\mathbf{R}$ odebráním právě těchto $m-n$ nulových řádků.

Potom odpovídající matice $\tilde{\mathbf{Q}}$ vznikne z matice $\mathbf{Q}$ odebráním $m-n$ posledních sloupců. Matice $\mathbf{R}_1$ má nyní rozměry $n \times n$, je tedy invertibilní a můžeme formulovat následující větu.

Věta 4.4. *Nechť má matice $\boldsymbol{A}$ lineárně nezávislé sloupce a nechť $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$ je její QR rozklad. Potom pro pseudoinverzní matici platí*

$$\boldsymbol{A}^{\dagger} = \boldsymbol{R}_1^{-1}\tilde{\boldsymbol{Q}}^T.$$

Jedná se přitom o matici $\mathbf{R}_1$, která je popsána vztahem 4.5 na straně 20.

Důkaz. Podle věty 1.6 platí, že

$$\mathbf{A}^{\dagger} = \left(\mathbf{A}^T\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{A}^T,$$

potom

$$\mathbf{A}^{\dagger} = \left(\mathbf{R}_1^T\tilde{\mathbf{Q}}^T\tilde{\mathbf{Q}}\mathbf{R}_1\right)^{-1}\mathbf{R}_1^T\tilde{\mathbf{Q}}^T = \mathbf{R}_1^{-1}\left(\mathbf{R}_1^T\right)^{-1}\mathbf{R}_1^T\tilde{\mathbf{Q}}^T = \mathbf{R}_1^{-1}\tilde{\mathbf{Q}}^T.$$

Tím je věta dokázána. □

Závěr

V diplomové práci jsme se zabývali maticovými rozklady. Nejprve jsme popsali konstrukci singulárního rozkladu, poté jsme se zabývali trojúhelníkovým rozkladem a nakonec jsme pracovali s různými postupy konstrukce ortogonálního rozkladu, Householderovou transformací, Givensovou rotací a jednoznačností QR rozkladu. Tyto rozklady jsme poté používali jednak k výpočtům systémů lieárních rovnic, ale zejména k výpočtům vlastních čísel čtvercových matic. U každé z metod je vyřešen konkrétní příklad, který jednotlivé metody ilustruje. LU rozklad i QR rozklad jsou již v programu `Matlab` předprogramovány, proto je u obou metod přiložena `m`-funkce, která rozklad n-krát opakuje, čímž iteruje vlastní čísla dané matice a jako výstup uvadí matici jednotlivých iterací.

Protože pomocí QR rozkladu nelze obecně počítat vlastní čísla libovolné matice, jedním z cílů diplomové práce bylo v `Matlabu` vytvořit algoritmus, který tyto hodnoty vypočítá. Konstrukce algoritmu je popsána v závěru práce. Samotná `m`-funkce je k práci přiložena.

Hlavním přínosem práce jsou právě přiložené `m`-funkce, zejména ta, která pomocí QR rozkladu počítá vlastní čísla libovolných čtvercových matic. Jak jsme se mohli v práci přesvědčit, počítání na papír je u těchto metod náročné i pro matice malých rozměrů. Pokud se jedná o matice vyšších řádů, je využití vhodného softwaru nezbytné.

Příloha

CD obsahující funkce napsané v softwaru `Matlab`.

- `lua.m` - funkce n-krát opakující LU rozklad
- `qra.m` - funkce n-krát opakující QR rozklad
- `qrrozklad.m` - funkce, která hledá vlastní čísla libovolné čtvercové matice pomocí QR rozkladu
- `Help.txt` - textový soubor popisující volání jednotlivých funkcí v softwaru `Matlab`

Seznam použité literatury

[1] DONT, Miroslav. *Elementy numerické linární algebry.* Praha: Vydavatelství ČVUT, 2004.

[2] GENTLE, James E. *Matrix algebra: theory, computations, and applications in statistics.* London: Springer, 2007. ISBN 9780387708720.

[3] GOLUB, Gene H. a Charles F. VAN LOAN. *Matrix computations.* 3rd ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 1996. ISBN 0801854148.

[4] RALSTON, Anthony. *Základy numerické matematiky.* 2. vyd. Přeložil Milan PRÁGER, přeložil Emil VITÁSEK. Praha: Academia, 1978.

[5] RUTISHAUSER, Heinz. *Solution of Eigenvalue Problems with the LR-transformation.* Nat. Bur. Standards Appl. Math. Ser., 1958.

[6] WATKINS, David S. *Fundamentals od Matrix Computations.* 2nd ed. New York: Wiley-Interscience, 2002. Pure and applied mathematics. ISBN 0471213942.

[7] ZEMÁNEK, Petr. *QR rozklad.* [online]. 2006, s. 26 [cit. 2017-05-12]. Dostupné z: http://www.math.muni.cz/ zemanekp/files/.

[8] ZLATOŠ, Pavol. *Lineárna algebra a gemoteria: cesta z troch rozmerov s presahnmi do príbuzných oborov.* Bratislava: Marenčin PT, 2011. ISBN 9788081141119.