

Παραγοντοποίηση QR

Δρ. Αικατερίνη Αρετάκη

ΔΠΜΣ «Πληροφορική και Υπολογιστική Βιοϊατρική»
Ειδικά Θέματα Αριθμητικής Ανάλυσης και
Εφαρμοσμένων Μαθηματικών

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Λαμία, 2025

1 Βασικές Έννοιες

- Νόρμες διανυσμάτων
- Νόρμες πινάκων
- Ορθοκανονικοποίηση Gram–Schmidt

2 Παραγοντοποίηση QR

- Απλή παραγοντοποίηση QR
- Πλήρης Παραγοντοποίηση QR
- QR με στροφές Givens

3 Εφαρμογές της QR

Νόρμες διανυσμάτων

- **Νόρμα διανύσματος** $\Rightarrow$ Μια συνάρτηση $\|\cdot\| : \mathbb{C}^n \rightarrow [0, +\infty)$ που για κάθε $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n$ ικανοποιεί τα ακόλουθα:

1. $\|\mathbf{x}\| \geq 0$ (μη αρνητική)
2. $\|\mathbf{x}\| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$
3. $\|\lambda \mathbf{x}\| = |\lambda| \|\mathbf{x}\|$ για κάθε $\lambda \in \mathbb{C}$
4. $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$ (τριγωνική ανισότητα).

- **Είδη νόρμας** διανύσματος $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{C}^n$:

1. $\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \{|x_i|\}$ (νόρμα- ∞)
2. $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ (νόρμα-1)
3. $\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2} = \sqrt{\mathbf{x}^* \mathbf{x}}$ (νόρμα-2)

- Η νόρμα-2 (ή **Ευκλείδεια νόρμα**) επάγεται από το Ευκλείδειο εσωτερικό γινόμενο, δηλαδή $\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle}$, όπου

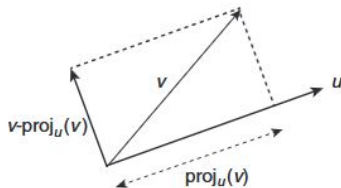
$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = x_1 \overline{y_1} + x_2 \overline{y_2} + \dots + x_n \overline{y_n}, \quad \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n.$$

Νόρμες πινάκων

- **Νόρμα πίνακα** $\Rightarrow$ Μια συνάρτηση $\|\cdot\| : \mathcal{M}_n(\mathbb{C}) \rightarrow [0, +\infty)$ που για κάθε $A, B \in \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ ικανοποιεί τα ακόλουθα:
 1. $\|A\| \geq 0$ (μη αρνητική)
 2. $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0$
 3. $\|\lambda A\| = |\lambda| \|A\|$ για κάθε $\lambda \in \mathbb{C}$
 4. $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ (τριγωνική ανισότητα)
 5. $\|A \cdot B\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$ (υποπολλαπλασιαστική ιδιότητα).
- **Είδη νόρμας** πίνακα $A = (a_{ij})_{i,j=1}^n$:
 1. $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ (νόρμα γραμμής)
 2. $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$ (νόρμα στήλης)
 3. $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|^2} = \sqrt{\text{tr}(A^* A)}$ (Frobenius νόρμα)
 4. $\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^* A)}$ (νόρμα-2)
- Η νόρμα-2 (ή **φασματική νόρμα**) ορίζεται μέσω της φασματικής ακτίνας ενός πίνακα

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(A)\}$$

Ορθοκανονικοποίηση Gram–Schmidt



- Αν $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα, τότε

$$\text{proj}_{\mathbf{u}}(\mathbf{v}) = \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle}{\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle} \mathbf{u}$$

είναι η **προβολή** του $\mathbf{v}$ επί του $\mathbf{u}$, τότε

$$(\mathbf{v} - \text{proj}_{\mathbf{u}}(\mathbf{v})) \perp \mathbf{u} \Rightarrow \langle \mathbf{v} - \frac{\langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle}{\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle} \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = 0$$

- Η μέθοδος Gram–Schmidt χρησιμοποιεί την παραπάνω ιδιότητα και μέσω γραμμικών συνδυασμών των προβολών μιας αρχικής βάσης κατασκευάζει ορθοκανονική βάση.

Μέθοδος Gram–Schmidt

Έστω ότι $\mathcal{B} = \{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$, $\mathbf{u}_j \in \mathbb{R}^m$ είναι μια βάση του $\mathbb{R}^n$. Τότε η κατασκευή πραγματοποιείται σε 2 στάδια:

❶ Ορθογώνια βάση $\mathcal{O} = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}$ (διανύσματα ανά δύο κάθετα):

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{u}_1$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{u}_2 - \text{proj}_{\mathbf{v}_1}(\mathbf{u}_2) = \mathbf{u}_2 - \frac{\langle \mathbf{u}_2, \mathbf{v}_1 \rangle}{\langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1 \rangle} \mathbf{v}_1$$

$$\mathbf{v}_3 = \mathbf{u}_3 - \text{proj}_{\mathbf{v}_1}(\mathbf{u}_3) - \text{proj}_{\mathbf{v}_2}(\mathbf{u}_3) = \mathbf{u}_3 - \frac{\langle \mathbf{u}_3, \mathbf{v}_1 \rangle}{\langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1 \rangle} \mathbf{v}_1 - \frac{\langle \mathbf{u}_3, \mathbf{v}_2 \rangle}{\langle \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_2 \rangle} \mathbf{v}_2$$

$$\vdots = \vdots$$

$$\mathbf{v}_n = \mathbf{u}_n - \sum_{j=1}^{n-1} \text{proj}_{\mathbf{v}_j}(\mathbf{u}_n) = \mathbf{u}_n - \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\langle \mathbf{u}_n, \mathbf{v}_j \rangle}{\langle \mathbf{v}_j, \mathbf{v}_j \rangle} \mathbf{v}_j.$$

❷ Κανονικοποιημένη βάση $\mathcal{U} = \{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n\}$ (μοναδιαία διανύσματα):

$$\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{v}_1}{\|\mathbf{v}_1\|}, \dots, \mathbf{q}_n = \frac{\mathbf{v}_n}{\|\mathbf{v}_n\|}.$$

Απλή παραγοντοποίηση QR

Θεώρημα

Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$), του οποίου οι στήλες $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^m$ είναι γραμμικά ανεξάρτητα διανύσματα, δηλ. $\text{rank}(A) = n$.

Τότε υπάρχει πίνακας $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ με $Q^T Q = I_n$ και άνω τριγωνικός πίνακας $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ με θετικά διαγώνια στοιχεία ώστε

$$A = [\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \cdots \ \mathbf{a}_n] = [\mathbf{q}_1 \ \mathbf{q}_2 \ \cdots \ \mathbf{q}_n] \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & & r_{2n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & r_{nn} \end{bmatrix} = QR.$$

- Κάθε $m \times n$ πίνακας A **πλήρους βαθμού**, δηλαδή $\text{rank}(A) = \min\{m, n\}$, έχει μοναδική παραγοντοποίηση QR .

Παρατηρήσεις

- Οι στήλες $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_n$ του $m \times n$ πίνακα Q είναι ορθοκανονικά διανύσματα του $\mathbb{R}^m$, τα οποία προκύπτουν άμεσα από την ορθοκανονικοποίηση Gram-Schmidt:

$$\text{span}\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n\} = \text{span}\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\}.$$

- Ο $n \times n$ πίνακας R έχει στοιχεία τους συντελεστές της ορθοκανονικοποίησης Gram-Schmidt:

$$\mathbf{a}_1 = r_{11}\mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_2 = r_{12}\mathbf{q}_1 + r_{22}\mathbf{q}_2$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{a}_n = r_{1n}\mathbf{q}_1 + r_{2n}\mathbf{q}_2 + \dots + r_{nn}\mathbf{q}_n.$$

Επίπλέον, είναι αντιστρέψιμος καθώς έχει θετικά διαγώνια στοιχεία ($r_{ii} > 0, i = 1, \dots, n$).

Παράδειγμα

Έστω $\mathbf{u}_1 = (1, 1, 1)$, $\mathbf{u}_2 = (0, 1, 1)$, $\mathbf{u}_3 = (0, 0, 1)$ μια βάση του $\mathbb{R}^3$.

Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Gram-Schmidt θα κατασκευάσουμε μια ορθοκανονική βάση.

• Ορθογωνοποίηση βάσης

$$\mathbf{v}_1 = (1, 1, 1)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_2 &= (0, 1, 1) - \frac{\langle (0, 1, 1), (1, 1, 1) \rangle}{\langle (1, 1, 1), (1, 1, 1) \rangle} (1, 1, 1) = (0, 1, 1) - \frac{2}{3} (1, 1, 1) \\ &= \left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3} \right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_3 &= (0, 0, 1) - \frac{\langle (0, 0, 1), (1, 1, 1) \rangle}{\langle (1, 1, 1), (1, 1, 1) \rangle} (1, 1, 1) \\ &\quad - \frac{\langle (0, 0, 1), \left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3} \right) \rangle}{\langle \left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3} \right), \left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3} \right) \rangle} \left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3} \right) \\ &= (0, 0, 1) - \frac{1}{3} (1, 1, 1) - \frac{1}{2} \left(-\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3} \right) = \left(0, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right).\end{aligned}$$

Παράδειγμα (συνέχεια)

• Κανονικοποίηση βάσης

$$\mathbf{q}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3} \right), \mathbf{q}_2 = \left(-\frac{\sqrt{6}}{3}, \frac{\sqrt{6}}{6}, \frac{\sqrt{6}}{6} \right), \mathbf{q}_3 = \left(0, -\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2} \right).$$

$$A = [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \mathbf{u}_3] = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 + \frac{2}{3}\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_3 + \frac{1}{2}\mathbf{v}_2 + \frac{1}{3}\mathbf{v}_1] = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \mathbf{v}_3] \begin{bmatrix} 1 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = VT$$

$$\text{Αν } D = \begin{bmatrix} \|\mathbf{v}_1\| & 0 & 0 \\ 0 & \|\mathbf{v}_2\| & 0 \\ 0 & 0 & \|\mathbf{v}_3\| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{6}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}, \text{ τότε } A = \underbrace{VD^{-1}}_Q \underbrace{DT}_R, \text{ όπου}$$

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{3} & -\frac{\sqrt{6}}{3} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{6} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{6} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \text{ και } R = \begin{bmatrix} \sqrt{3} & \frac{2\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{3}}{3} \\ 0 & \frac{\sqrt{6}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{6} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}.$$

Σημειώνουμε ότι $Q^*Q = I_3$ και R αντιστρέψιμος.

Άσκηση 1

Να κατασκευαστεί η απλή QR παραγοντοποίηση του πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{5 \times 3}.$$

1. Ο βαθμός του πίνακα είναι $\text{rank}(A) = 3$ (full rank).
2. Έστω $A = [\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \mathbf{a}_3]$. Εφαρμόζουμε τη μέθοδο Gram-Schmidt για να κατασκευάσουμε ορθογώνια διανύσματα

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{a}_1 = [1 \ 1 \ 2 \ 1 \ 2]^T$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{a}_2 - \frac{0}{11}\mathbf{v}_1 = [-1 \ 2 \ -1 \ 1 \ 0]^T$$

$$\mathbf{v}_3 = \mathbf{a}_3 - \frac{3}{11}\mathbf{v}_1 - \frac{0}{7}\mathbf{v}_2 = \left[\frac{8}{11} \ \frac{8}{11} \ \frac{16}{11} \ \frac{8}{11} \ -\frac{28}{11}\right]^T.$$

3. Λύνουμε τις σχέσεις του βήματος 2 ως προς τις στήλες του πίνακα A

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{a}_2 &= 0\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{3}{11}\mathbf{v}_1 + 0\mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_3.\end{aligned}$$

Συνεπώς,

$$A = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \mathbf{v}_3] \begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{3}{11} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \underbrace{ED^{-1}}_Q \underbrace{DT}_R = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{11}} & \frac{-1}{\sqrt{7}} & \frac{2}{\sqrt{77}} \\ \frac{1}{\sqrt{11}} & \frac{2}{\sqrt{7}} & \frac{2}{\sqrt{77}} \\ \frac{2}{\sqrt{11}} & \frac{-1}{\sqrt{7}} & \frac{4}{\sqrt{77}} \\ \frac{1}{\sqrt{11}} & \frac{1}{\sqrt{7}} & \frac{2}{\sqrt{77}} \\ \frac{2}{\sqrt{11}} & 0 & \frac{7}{\sqrt{77}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{11} & 0 & \frac{3\sqrt{11}}{11} \\ 0 & \sqrt{7} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{12\sqrt{77}}{121} \end{bmatrix},$$

$$\text{όπου } D = \begin{bmatrix} \|\mathbf{v}_1\| & 0 & 0 \\ 0 & \|\mathbf{v}_2\| & 0 \\ 0 & 0 & \|\mathbf{v}_3\| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{7} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4\sqrt{77}}{11} \end{bmatrix}.$$

Άσκηση 2

Να βρεθεί η απλή QR του πίνακα $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$.

Έστω $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ οι στήλες του A , εφόσον $\text{rank}(A) = 3$. Τότε με τη μέθοδο Gram-Schmidt βρίσκουμε τα ορθογώνια διανύσματα

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{a}_1 = [1 \ 1 \ 1 \ 1]^T$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{a}_2 - \frac{3}{4}\mathbf{v}_1 = \left[-\frac{3}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{1}{4} \ \frac{1}{4}\right]^T$$

$$\mathbf{v}_3 = \mathbf{a}_3 - \frac{1}{2}\mathbf{v}_1 - \frac{2}{3}\mathbf{v}_2 = \left[0 \ -\frac{2}{3} \ \frac{1}{3} \ \frac{1}{3}\right]^T.$$

$$A = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \mathbf{v}_3] \begin{bmatrix} 1 & \frac{3}{4} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \underbrace{VD^{-1}}_Q \underbrace{DT}_R = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & \frac{3}{2} & 1 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} \end{bmatrix},$$

$$\text{όπου } D = \begin{bmatrix} \|\mathbf{v}_1\| & 0 & 0 \\ 0 & \|\mathbf{v}_2\| & 0 \\ 0 & 0 & \|\mathbf{v}_3\| \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} \end{bmatrix}.$$

Αλγόριθμος QR με Gram-Schmidt

Listing 1: Matlab function file

```
1 % QR factorization using Gram-Schmidt algorithm
2 % Input: A is an m-by-n matrix of full rank  $m \geq n$ 
3 % Output: an m-by-n unitary matrix Q and
4 %          an n-by-n upper triangular matrix R such that  $A = Q \cdot R$ .
5
6 function [Q,R] = qrGS(A)
7
8 [m,n] = size(A);
9 R(1,1) = norm(A(:,1));
10 Q(:,1) = A(:,1)/R(1,1);
11 for i=2:n
12     R(1:i-1,i) = Q(:,1:i-1)'*A(:,i);
13     Q(:,i) = A(:,i) - Q(:,1:i-1)*R(1:i-1,i);
14     R(i,i) = norm(Q(:,i));
15     Q(:,i) = Q(:,i)/R(i,i);
16 end
```

Αριθμητική ευστάθεια της Gram-Schmidt

- Η κλασική εκδοχή της Gram-Schmidt (GS) αποτελεί ένα πολύ καλό θεωρητικό εργαλείο, αλλά δεν είναι αριθμητικά ευσταθής αλγόριθμος.
- Εξαιτίας των σφαλμάτων στρογγυλοποίησης σε αριθμητική κινητής υποδιαστολής (floating-point), η υλοποίηση της GS μπορεί να οδηγήσει σε ένα νέο σύνολο διανυσμάτων τα οποία απέχουν πολύ από το να είναι ορθοκανονικά.
- Το πρόβλημα προκαλείται από την ταυτόχρονη αφαίρεση των προβολών. Αν αντί αυτού ο υπολογισμός διαχωριστεί σε μικρότερα μέρη αφαιρώντας τις προβολές μία κάθε φορά, τότε αυτή η προσέγγιση (τροποποιημένη GS) δίνει το ίδιο αποτέλεσμα αλλά εισάγει μικρότερα σφάλματα στρογγυλοποίησης.

Αλγόριθμος QR με τροποποιημένη Gram-Schmidt

Listing 2: Matlab function file

```
1 % QR factorization using Modified Gram-Schmidt algorithm
2 % Input: A is an m-by-n matrix of full rank  $m \geq n$ 
3 % Output: an m-by-n unitary matrix Q and
4 %          an n-by-n upper triangular matrix R such that  $A = Q \cdot R$ .
5
6 function [Q,R] = qrmodGS(A)
7 [m,n]=size(A);
8 for i = 1:n
9     Q(:,i) = A(:,i)
10    for j = 1:i-1
11        R(j,i) = Q(:,j)'*Q(:,i)
12        Q(:,i) = Q(:,i) - R(j,i) *Q(:,j)
13    end
14    R(i,i) = norm(Q(:,i))
15    Q(:,i) = Q(:,i)/R(i,i)
16 end
```

Απλή παραγοντοποίηση QR στο MatLab

Η εντολή

$[Q, R] = qr(A, 0);$ % compute economy QR factorization

κατασκευάζει την απλή παραγοντοποίηση QR ενός πλήρους βαθμού πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) με πίνακα $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $Q^T Q = I_n$ και άνω τριγωνικό πίνακα $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Πλήρης Παραγοντοποίηση QR

- Ένας πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) μπορεί να παραγοντοποιηθεί στη μορφή

$$A = [\hat{Q} \quad \tilde{Q}] \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix} = QR,$$

όπου

- $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ είναι ορθομοναδιαίος πίνακας ώστε

$$Q = [\hat{Q} \quad \tilde{Q}] = H_1 H_2 \cdots H_n,$$

με $H_i \in \mathbb{C}^{m \times m}$ πίνακες (αντανάκλασης) Householder.

- $R = \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ με $\hat{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ άνω τριγωνικό πίνακα.

Η παραπάνω μορφή είναι γνωστή ως **πλήρης παραγοντοποίηση QR**.

Πλήρης Παραγοντοποίηση QR

$$\left[\begin{array}{c|ccc} & \boxed{\begin{array}{ccc} & & \end{array}} & & \\ \hline \mathbf{q}_1 & \cdots & \mathbf{q}_n & \mathbf{q}_{n+1} & \cdots & \mathbf{q}_m \end{array} \right] \left[\begin{array}{c|ccc} & \boxed{\begin{array}{ccc} r_{11} & \cdots & r_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ & & r_{nn} \end{array}} & & \\ \hline 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 \end{array} \right] = A \ (m \times n)$$

$\hat{Q} \ (m \times n)$ $\hat{R} \ (n \times n)$
 $Q \ (m \times m)$ $R \ (m \times n)$

Μετασχηματισμός Householder

Η πλήρης QR αξιοποιεί τους μετασχηματισμούς Householder:

- Ο πίνακας A πολλαπλασιάζεται με μια σειρά από ορθογώνιους πίνακες $Q_j \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $j = 1, \dots, k$ ώστε να προκύψει άνω τριγωνικός:

$$Q_k \cdots Q_2 Q_1 A = R \Leftrightarrow A = \underbrace{Q_1^T Q_2^T \cdots Q_k^T}_Q R.$$

- Οι ορθογώνιοι πίνακες Q_j επιλέγονται τέτοιοι ώστε να εισάγονται μηδενικά στην j -στη στήλη κάτω από τη διαγώνιο διατηρώντας τα προηγούμενα μηδενικά:

$$\begin{array}{cccc} \begin{bmatrix} \star & \star & \star \\ \star & \star & \star \\ \star & \star & \star \\ \star & \star & \star \\ \star & \star & \star \end{bmatrix} & \xrightarrow{Q_1} & \begin{bmatrix} \star & \star & \star \\ 0 & \star & \star \\ 0 & \star & \star \\ 0 & \star & \star \\ 0 & \star & \star \end{bmatrix} & \xrightarrow{Q_2} & \begin{bmatrix} \star & \star & \star \\ 0 & \star & \star \\ 0 & 0 & \star \\ 0 & 0 & \star \\ 0 & 0 & \star \end{bmatrix} & \xrightarrow{Q_3} & \begin{bmatrix} \star & \star & \star \\ 0 & \star & \star \\ 0 & 0 & \star \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ A & & Q_1 A & & Q_2 Q_1 A & & Q_3 Q_2 Q_1 A \end{array}$$

Μετασχηματισμός Householder

- Ο $m \times m$ πίνακας Q_j είναι της μορφής

$$Q_j = \begin{bmatrix} I_{j-1} & 0 \\ 0 & H \end{bmatrix},$$

όπου

- ▶ I_{j-1} είναι ο $(j-1) \times (j-1)$ μοναδιαίος πίνακας (διατηρεί αναλλοίωτες τις πρώτες $j-1$ γραμμές και στήλες)
 - ▶ H είναι $(m-j+1) \times (m-j+1)$ **πίνακας ανάκλασης Householder**.
- Ο μετασχηματισμός Householder χρησιμοποιείται ευρέως για την παραγοντοποίηση QR , καθώς είναι λιγότερο ευαίσθητος σε σφάλματα στρογγυλοποίησης συγκριτικά με τη Gram-Schmidt. (εντολή `qr` του MATLAB)

$$H = I_n - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T \text{ με } \mathbf{u} \in \mathbb{R}^n, \|\mathbf{u}\| = 1$$

- H συμμετρικός πίνακας, δηλαδή

$$H = H^T$$

- H ορθογώνιος πίνακας, δηλαδή

$$H^T H = H H^T = I_n$$

- το διάνυσμα $H\mathbf{x}$ υπολογίζεται από την ποσότητα

$$H\mathbf{x} = \mathbf{x} - 2(\mathbf{u}^T \mathbf{x})\mathbf{u} = \mathbf{x} - 2\langle \mathbf{x}, \mathbf{u} \rangle \mathbf{u}$$

- $\|H\mathbf{x}\|_2 = \|\mathbf{x}\|_2$

Κατασκευή του πίνακα ανάκλασης Householder

Θα κατασκευάσουμε πίνακα H ώστε να επιτευχθεί η απεικόνιση:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \rightarrow H\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \pm \|\mathbf{x}\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \pm \|\mathbf{x}\|_2 \mathbf{e}_1,$$

όπου $\mathbf{e}_1 = (1, 0, \dots, 0)$ είναι το διάνυσμα της κανονικής βάσης.

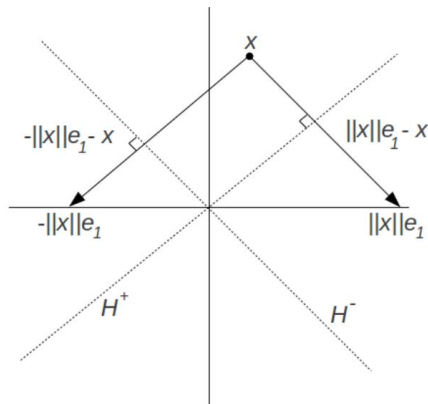
- Ορίζουμε το μοναδιαίο διάνυσμα Householder

$$\mathbf{u} = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}, \text{ όπου } \mathbf{w} = \mathbf{x} \pm \|\mathbf{x}\| \mathbf{e}_1,$$

- Ο αντίστοιχος πίνακας Householder είναι

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

Γεωμετρική αναπαράσταση



Το διάνυσμα $Hx = \pm ||x||_2 e_1$ είναι μια αντανάκλαση του $x \neq 0$ ως προς τον υπόχωρο $\mathcal{H}^\pm = span\{w\}^\perp = \{z : w^T z = 0\}$, ο οποίος είναι κάθετος στο διάνυσμα

$$w = x \pm ||x|| e_1.$$

Πλήρης παραγοντοποίηση QR

Έστω $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) με $\text{rank}(A) = n$.

1. Θεωρούμε την πρώτη στήλη $\mathbf{a}_1 \in \mathbb{R}^m$ του A και υπολογίζουμε το διάνυσμα Householder

$$\mathbf{u}_1 = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}, \quad \mathbf{w} = \mathbf{a}_1 \pm \|\mathbf{a}_1\| \mathbf{e}_1$$

και τον πίνακα Householder

$$H_1 = I_m - 2\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1^T,$$

2. Υπολογίζουμε το γινόμενο των πινάκων

$$H_1 A = \begin{bmatrix} -\|\mathbf{a}_1\| & \star \\ 0 & A_1 \end{bmatrix}, \quad A_1 \in \mathbb{R}^{(m-1) \times (n-1)}$$

3. Θεωρούμε την πρώτη στήλη $\tilde{\mathbf{a}}_1 \in \mathbb{R}^{m-1}$ του A_1 και υπολογίζουμε το διάνυσμα Householder

$$\mathbf{u}_2 = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|}, \quad \mathbf{w} = \tilde{\mathbf{a}}_1 \pm \|\tilde{\mathbf{a}}_1\| \tilde{\mathbf{e}}_1$$

και τον πίνακα Householder

$$H_2 = I_{m-1} - 2\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2^T,$$

4. Υπολογίζουμε το γινόμενο των πινάκων

$$H_2 A_1 = \begin{bmatrix} -\|\tilde{\mathbf{a}}_1\| & \star \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}, \quad A_2 \in \mathbb{R}^{(m-2) \times (n-2)}$$

5. Αν $Q_1 = H_1$ και $Q_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix}$, τότε

$$Q_2 Q_1 A = \begin{bmatrix} -\|\mathbf{a}_1\| & \star & \star \\ 0 & -\|\tilde{\mathbf{a}}_1\| & \star \\ 0 & 0 & A_2 \end{bmatrix}$$

6. Συνεχίζουμε τη διαδικασία με τον πίνακα $A_2 \in \mathbb{R}^{(m-2) \times (n-2)}$ και έχουμε

$$H_3 A_2 = \begin{bmatrix} -\|\tilde{\mathbf{a}}_1\| & \star \\ 0 & A_3 \end{bmatrix}, \quad A_3 \in \mathbb{R}^{(m-3) \times (n-3)}$$

και

$$Q_3 Q_2 Q_1 A = \begin{bmatrix} -\|\mathbf{a}_1\| & \star & \star & \star \\ 0 & -\|\tilde{\mathbf{a}}_1\| & \star & \star \\ 0 & 0 & \ddots & \star \\ 0 & 0 & 0 & A_3 \end{bmatrix}, \quad \text{με } Q_3 = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & H_3 \end{bmatrix}$$

7. Τελικά θα έχουμε

$$Q_{m-1} \cdots Q_2 Q_1 A = \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix},$$

όπου ο πίνακας $Q_{m-1} \cdots Q_2 Q_1$ είναι ορθογώνιος ως γινόμενο ορθογώνιων πινάκων.

8. Συνεπώς, έχουμε

$$A = \underbrace{Q_1 Q_2 \cdots Q_{m-1}}_{Q \in \mathbb{R}^{m \times m}} \underbrace{\begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix}}_{R \in \mathbb{R}^{m \times n}}$$

Αλγόριθμος QR ανάλυσης με ανακλάσεις Householder

Listing 3: Matlab function file

```
1 % QR factorization using Householder reflections
2
3 function [Q,R] = Householder_QR(A)
4
5 [m,n]=size(A);
6 Q=eye(m);
7 R = A;
8 for j=1:n
9     norma = norm(R(j:end,j));
10    pm = -sign(R(j,j));
11    u1 = R(j,j) - pm*norma;
12    w = R(j:end,j)/u1;
13    w(1) = 1;
14    t = - pm*u1/norma;
15    disp(' ')
16    fprintf('Iteration: %d',j)
17    disp(' ')
18    R(j:end,:) = R(j:end,:) - (t*w)*(w'*R(j:end,:))
19    Q(:,j:end) = Q(:,j:end) - (Q(:,j:end)*w)*(t*w)'
20 end
```

Άσκηση 1

Να βρεθεί η πλήρης QR του πίνακα $A = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & 5 \\ 1 & 3 & 7 \end{bmatrix}$.

Θα κατασκευάσουμε ορθογώνιους πίνακες $Q_j = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & H_j \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{4 \times 4}$ ώστε

$$Q_3 Q_2 Q_1 A = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{23} \\ 0 & 0 & r_{33} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

1. Θεωρούμε την πρώτη στήλη του A και υπολογίζουμε:

$$\mathbf{a}_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w} = \mathbf{a}_1 - \|\mathbf{a}_1\| \mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_1 = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

2. Για $Q_1 = H_1 = I_4 - 2\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1^T$ έχουμε

$$Q_1 A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 4/3 & 8/3 \\ 0 & 2/3 & 16/3 \\ 0 & 4/3 & 20/3 \end{bmatrix}$$

3. Ομοίως, υπολογίζουμε:

$$\mathbf{a}_1 = \begin{bmatrix} 4/3 \\ 2/3 \\ 4/3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w} = \mathbf{a}_1 - \|\mathbf{a}_1\| \mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 10/3 \\ 2/3 \\ 4/3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{bmatrix} 5 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

4. Για $Q_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix}$ με $H_2 = I_3 - 2\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2^T$ έχουμε

$$Q_2 Q_1 A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & -8 \\ 0 & 0 & 16/5 \\ 0 & 0 & 12/5 \end{bmatrix}$$

5. Ομοίως

$$\mathbf{a}_1 = \begin{bmatrix} 16/5 \\ 12/5 \end{bmatrix}, \mathbf{w} = \mathbf{a}_1 - \|\mathbf{a}_1\| \mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 36/5 \\ 12/5 \end{bmatrix}, \mathbf{u}_2 = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

6. Για $Q_3 = \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & H_3 \end{bmatrix}$ με $H_3 = I_2 - 2\mathbf{u}_3\mathbf{u}_3^T$ έχουμε

$$Q_3 Q_2 Q_1 A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & -8 \\ 0 & 0 & -4 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

7. Τελικά,

$$A = Q_1^T Q_2^T Q_3^T \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix} = Q_1 Q_2 Q_3 \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix},$$

καθόσον $Q_j = Q_j^T$.

Άσκηση 2

Να κατασκευαστεί η πλήρης QR παραγοντοποίηση του πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{5 \times 3}.$$

1. Ο βαθμός του πίνακα είναι $\text{rank}(A) = 3$ (full rank).
2. Έστω $\mathbf{a}_1 = [1 \ 1 \ 2 \ 1 \ 2]^T$. Υπολογίζουμε το διάνυσμα Householder

$$\mathbf{u}_1 = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} = [0.8067 \ 0.1869 \ 0.3738 \ 0.1869 \ 0.3738]^T, \text{ όπου } \mathbf{w} = \mathbf{a}_1 + \|\mathbf{a}_1\| \mathbf{e}_1$$

και τον πίνακα Householder

$$H_1 = I_5 - 2\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1^T = \begin{bmatrix} -0.3015 & -0.3015 & -0.6030 & -0.3015 & -0.6030 \\ -0.3015 & 0.9302 & -0.1397 & -0.0698 & -0.1397 \\ -0.6030 & -0.1397 & 0.7206 & -0.1397 & -0.2794 \\ -0.3015 & -0.0698 & -0.1397 & 0.9302 & -0.1397 \\ -0.6030 & -0.1397 & -0.2794 & -0.1397 & 0.7206 \end{bmatrix}.$$

3. Υπολογίζουμε το γινόμενο των πινάκων

$$Q_1 A = H_1 A = \begin{bmatrix} -3.3166 & 0 & -0.9045 \\ 0 & 2.2317 & 0.5588 \\ 0 & -0.5367 & 1.1176 \\ 0 & 1.2317 & 0.5588 \\ 0 & 0.4633 & -2.8824 \end{bmatrix},$$

$$\text{και θέτουμε } A_1 = \begin{bmatrix} 2.2317 & 0.5588 \\ -0.5367 & 1.1176 \\ 1.2317 & 0.5588 \\ 0.4633 & -2.8824 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{4 \times 2}.$$

4. Θεωρούμε την πρώτη στήλη $\tilde{\mathbf{a}}_1 = [2.2317 \ -0.5367 \ 1.2317 \ 0.4633]^T$ του A_1 . Υπολογίζουμε το διάνυσμα Householder

$$\mathbf{u}_2 = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} = [0.9601 \ -0.1056 \ 0.2424 \ 0.0912]^T, \quad \mathbf{w} = \tilde{\mathbf{a}}_1 + \|\tilde{\mathbf{a}}_1\| \tilde{\mathbf{e}}_1$$

και τον πίνακα Householder

$$H_2 = I_4 - 2\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2^T = \begin{bmatrix} -0.8435 & 0.2028 & -0.4655 & -0.1751 \\ 0.2028 & 0.9777 & 0.0512 & 0.0193 \\ -0.4655 & 0.0512 & 0.8824 & -0.0442 \\ -0.1751 & 0.0193 & -0.0442 & 0.9834 \end{bmatrix},$$

5. Υπολογίζουμε το γινόμενο των πινάκων

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix} H_1 A = \begin{bmatrix} -3.3165 & 0 & -0.9045 \\ 0 & -2.6459 & -0.0002 \\ 0 & 0 & 1.1791 \\ 0 & 0 & 0.4177 \\ 0 & 0 & -2.9355 \end{bmatrix}.$$

6. Με διάνυσμα $\tilde{\mathbf{a}}_2 = [1.1791 \ -0.4177 \ -2.9355]^T$ θα υπολογίσουμε το διάνυσμα Householder

$$\mathbf{u}_3 = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} = [0.8275 \ 0.0791 \ -0.5559]^T, \quad \mathbf{w} = \tilde{\mathbf{a}}_2 + \|\tilde{\mathbf{a}}_2\| \tilde{\mathbf{e}}_1$$

και τον πίνακα Householder

$$H_3 = I_3 - 2\mathbf{u}_3\mathbf{u}_3^T = \begin{bmatrix} -0.3695 & -0.1309 & 0.9200 \\ -0.1309 & 0.9875 & 0.0879 \\ 0.9200 & 0.0879 & 0.3820 \end{bmatrix},$$

7. Υπολογίζουμε το γινόμενο των πινάκων

$$\begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & H_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix} H_1 A = \begin{bmatrix} -3.3166 & 0 & -0.9045 \\ 0 & -2.6458 & 0 \\ 0 & 0 & -3.1909 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

8. Τελικά, θα έχουμε

$$A = H_1 \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & H_3 \end{bmatrix}}_{Q \in \mathbb{R}^{5 \times 5}} \underbrace{\begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix}}_{R \in \mathbb{R}^{5 \times 3}}.$$

Πλήρης QR με χρήση MatLab

Η εντολή

$[Q, R] = qr(A);$ % compute full QR factorization

κατασκευάζει την πλήρη QR παραγοντοποίηση του πλήρους βαθμού πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) με ορθογώνιο πίνακα $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ και άνω τριγωνικό πίνακα $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Ειδικότερα, στην άσκηση 2 έχουμε:

$$Q = \begin{bmatrix} -0.3015 & 0.3780 & -0.2279 & -0.0869 & -0.8407 \\ -0.3015 & -0.7559 & -0.2279 & -0.5218 & -0.1160 \\ -0.6030 & 0.3780 & -0.4558 & -0.1160 & 0.5218 \\ -0.3015 & -0.3780 & -0.2279 & 0.8407 & -0.0869 \\ -0.6030 & 0 & 0.7977 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} -3.3166 & 0 & -0.9045 \\ 0 & -2.6458 & 0 \\ 0 & 0 & -3.1909 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Στροφές Givens στον $\mathbb{R}^2$

- Εναλλακτικά του μετασχηματισμού Householder H ώστε $H\mathbf{x} = \pm\|\mathbf{x}\|\mathbf{e}_1$ μπορούμε να περιστρέψουμε το διάνυσμα $\mathbf{x}$.
- Οι *στροφές Givens* στον $\mathbb{R}^2$

$$G(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

έχουν την ιδιότητα να περιστρέφουν αριστερόστροφα οποιοδήποτε $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ κατά γωνία θ .

- Έστω $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T$ με $x_1 = \rho \cos(\theta)$, $x_2 = \rho \sin(\theta)$ όπου $\rho = \|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$, τότε

$$G(\theta)^T \mathbf{x} = G(\theta)^T \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho \\ 0 \end{bmatrix} = \|\mathbf{x}\|\mathbf{e}_1.$$

Γενίκευση στροφών Givens στον $\mathbb{R}^n$

- Οι στροφές Givens για διανύσματα του $\mathbb{R}^n$ είναι πίνακες της μορφής

$$G(i, j, \theta) = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & c & \cdots & s & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & -s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix},$$

όπου $c = \cos(\theta)$, $s = \sin(\theta)$ βρίσκονται στις i, j γραμμές και στήλες.

- $G(i, j, \theta) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ είναι ορθογώνιοι πίνακες με την ιδιότητα $G(i, j, \theta)^T \mathbf{y}$ να περιστρέφει το διάνυσμα $\mathbf{y}$ ως προς τις συνιστώσες i, j κατά γωνία θ αφήνοντας αναλλοίωτες τις άλλες συνιστώσες.
- Αν $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, τότε το γινόμενο $G(i, j, \theta)^T A$ επηρεάζει μόνο τις γραμμές i, j του A , ενώ το γινόμενο $AG(i, j, \theta)$ επηρεάζει μόνο τις i, j στήλες του A .

Παραγοντοποίηση QR με στροφές Givens

- Αν $\mathbf{y} = G(i, j, \theta)^T \mathbf{x}$, τότε $y_k = \begin{cases} cx_i - sx_j, & k = i \\ sx_i + cx_j, & k = j \\ x_k, & k \neq i, j \end{cases}$ και μπορούμε

να αναγκάσουμε τη συνιστώσα $y_j = 0$ του $\mathbf{y}$ για $j > i$ αν θέσουμε

$$c = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} \quad \text{και} \quad s = \frac{-x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}.$$

- Λόγω σφαλμάτων κινητής υποδιαστολής (floating-point arithmetic) ο υπολογισμός $\sqrt{x_i^2 + x_j^2}$ δεν είναι αποδοτικός. Συνεπώς, αν $|x_i| \geq |x_j|$, θεωρούμε

$$\tau = \frac{x_j}{x_i} \quad \text{και} \quad s = \frac{1}{\sqrt{1 + \tau^2}}, \quad c = s\tau,$$

διαφορετικά, αν $|x_i| \leq |x_j|$

$$\tau = \frac{x_j}{x_i} \quad \text{και} \quad c = \frac{1}{\sqrt{1 + \tau^2}}, \quad s = c\tau.$$

Οι στροφές Givens χρησιμοποιούνται στην παραγοντοποίηση QR .
Δείχνουμε τη βασική διαδικασία μέσω ενός πίνακα 4×3 .

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \times & \times & \times \\ \mathbf{x} & \times & \times \\ \mathbf{x} & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{G(4,3,\theta_1)^T} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ \mathbf{x} & \times & \times \\ \mathbf{x} & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{G(3,2,\theta_2)^T} \begin{bmatrix} \mathbf{x} & \times & \times \\ \mathbf{x} & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{G(2,1,\theta_3)^T} \\
 & \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & \mathbf{x} & \times \\ 0 & \mathbf{x} & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{G(4,3,\theta_4)^T} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \mathbf{x} & \times \\ 0 & \mathbf{x} & \times \\ 0 & 0 & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{G(3,2,\theta_5)^T} \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \mathbf{x} \\ 0 & 0 & \mathbf{x} \end{bmatrix} \xrightarrow{G(4,3,\theta_6)^T} R \\
 & R = \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Άρα για $G_k = G(k, k-1, \theta)$ λαμβάνουμε

$$\underbrace{G_4^T}_{3\text{η στήλη}} \underbrace{G_3^T G_4^T}_{2\text{η στήλη}} \underbrace{G_2^T G_3^T G_4^T}_{1\text{η στήλη}} A = R \Rightarrow A = QR$$

Άσκηση 1

Να γραφεί η παραγοντοποίηση QR του $A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & -3 & 4 \\ 5 & 1 & -1 \\ 7 & 4 & 2 \end{bmatrix}$ εφαρμόζοντας

τις στροφές Givens.

1. Υπολογίζουμε στροφή Givens G_4 ώστε αν εφαρμοστεί στα στοιχεία a_{31}, a_{41} να μηδενιστεί το $(4,1)$ στοιχείο του πίνακα $G_4^T A$

$$\begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5812 & 0.8137 \\ -0.8137 & 0.5812 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 \\ 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.6023 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5812 & 0.8137 \\ 0 & 0 & -0.8137 & 0.5812 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & -3 & 4 \\ 5 & 1 & -1 \\ 7 & 4 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & -3 & 4 \\ 8.6023 & 3.8362 & 1.0462 \\ 0 & 1.5112 & 1.9762 \end{bmatrix}$$

2. Υπολογίζουμε στροφή Givens G_3 ώστε αν εφαρμοστεί στα στοιχεία $(2, 1)$, $(3, 1)$ του $G_4^T A$ να μηδενιστεί το $(3, 1)$ στοιχείο του $G_3^T G_4^T A$

$$\begin{bmatrix} 0.2265 & 0.9740 \\ -0.9740 & 0.2265 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 8.6023 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.8318 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.2265 & 0.9740 & 0 \\ 0 & -0.9740 & 0.2265 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & -3 & 4 \\ 8.6023 & 3.8362 & 1.0462 \\ 0 & 1.5112 & 1.9762 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 8.8318 & 3.0571 & 1.9249 \\ 0 & 3.7908 & -3.6592 \\ 0 & 1.5112 & 1.9762 \end{bmatrix}$$

3. Υπολογίζουμε G_2 ώστε να μηδενιστεί το $(2, 1)$ στοιχείο του $G_2^T G_3^T G_4^T A$

$$\begin{bmatrix} 0.3216 & 0.9469 \\ -0.9469 & 0.3216 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 8.8318 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.3274 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0.3216 & 0.9469 & 0 & 0 \\ -0.9469 & 0.3216 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 8.8318 & 3.0571 & 1.9249 \\ 0 & 3.7908 & -3.6592 \\ 0 & 1.5112 & 1.9762 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.3274 & 3.5380 & 2.1442 \\ 0 & -0.9104 & -0.3278 \\ 0 & 3.7908 & -3.6592 \\ 0 & 1.5112 & 1.9762 \end{bmatrix}$$

4. Υπολογίζουμε G_4 ώστε να μηδενιστεί το (4,2) στοιχείο του $G_4^T G_2^T G_3^T G_4^T A$

$$\begin{bmatrix} 0.9289 & 0.3703 \\ -0.3703 & 0.9289 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3.7908 \\ 1.5112 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.0809 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.9289 & 0.3703 \\ 0 & 0 & -0.3703 & 0.9289 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9.3274 & 3.5380 & 2.1442 \\ 0 & -0.9104 & -0.3278 \\ 0 & 3.7908 & -3.6592 \\ 0 & 1.5112 & 1.9762 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.3274 & 3.5380 & 2.1442 \\ 0 & -0.9104 & -0.3278 \\ 0 & 4.0809 & -2.6672 \\ 0 & 0 & 3.1908 \end{bmatrix}$$

5. Υπολογίζουμε G_2 ώστε να μηδενιστεί το (3,2) στοιχείο του $G_3^T G_4^T G_2^T G_3^T G_4^T A$

$$\begin{bmatrix} -0.2178 & 0.9760 \\ -0.9760 & -0.2178 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -0.9104 \\ 4.0809 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.1812 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.2178 & 0.9760 & 0 \\ 0 & -0.9760 & -0.2178 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9.3274 & 3.5380 & 2.1442 \\ 0 & -0.9104 & -0.3278 \\ 0 & 4.0809 & -2.6672 \\ 0 & 0 & 3.1908 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.3274 & 3.5380 & 2.1442 \\ 0 & 4.1812 & -2.5318 \\ 0 & 0 & 0.9007 \\ 0 & 0 & 3.1908 \end{bmatrix}$$

6. Υπολογίζουμε G_4 ώστε να μηδενιστεί το $(4,3)$ στοιχείο του $G_4^T G_3^T G_4^T G_2^T G_3^T G_4^T A$

$$\begin{bmatrix} 0.2717 & 0.9624 \\ -0.9624 & 0.2717 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.9007 \\ 3.1908 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.3154 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2717 & 0.9624 \\ 0 & 0 & -0.9624 & 0.2717 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9.3269 & 3.5376 & 2.1444 \\ 0 & 4.1813 & -2.5317 \\ 0 & 0 & 0.9007 \\ 0 & 0 & 3.1905 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9.3274 & 3.5380 & 2.1442 \\ 0 & 4.1812 & -2.5318 \\ 0 & 0 & 3.3154 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

7. Άρα $A = QR$, όπου

$$Q = \begin{bmatrix} 0.3216 & 0.2062 & 0.2511 & -0.8894 \\ 0.2145 & -0.8989 & 0.3813 & -0.0232 \\ 0.5361 & -0.2144 & -0.8121 & -0.0851 \\ 0.7505 & 0.3216 & 0.3635 & 0.4486 \end{bmatrix}, R = \begin{bmatrix} 9.3274 & 3.5380 & 2.1442 \\ 0 & 4.1812 & -2.5318 \\ 0 & 0 & 3.3154 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Αλγόριθμος QR ανάλυσης με στροφές Givens

Listing 4: Matlab function file

```
1 % QR factorization using Givens rotations
2 % Input: A is an m-by-n matrix of full rank m>=n
3 % Output: an m-by-m unitary matrix Q and
4 %         an m-by-n upper triangular matrix R such that A = Q*R.
5
6 function [Q,R] = QR_Givens(A)
7 [m,~] = size(A); Q = eye(m); R=A;
8 for j=1:m
9     for i=m:-1:j+1
10        x=R(:,j);
11        if norm ([x(i-1),x(i)])>0
12            c = x(i-1)/norm([x(i-1),x(i)]);
13            s = -x(i)/norm([x(i-1),x(i)]);
14            G = eye(m);
15            G([i-1,i],[i-1,i]) = [c,s;-s,c];
16            R = G'*R; Q = Q*G;
17        end
18    end
19 end
```

Εφαρμογές της QR

Η QR παραγοντοποίηση μπορεί να εφαρμοστεί στα ακόλουθα:

- Επίλυση γραμμικού συστήματος $Ax = b$:

$$Ax = b \Leftrightarrow QRx = b \Leftrightarrow Qy = b \text{ και } y = Rx,$$

όπου το σύστημα $y = Rx$ επιλύεται με προς τα πίσω αντικατάσταση και το σύστημα $Qy = b$ επιλύεται άμεσα θεωρώντας $y = Q^T b$.

- Υπολογισμός ορίζουσας και αντιστρόφου του πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$:

$$\det A = \det Q \cdot \det R = \pm \prod_{j=1}^n r_{jj} \neq 0,$$

εφόσον $QQ^T = I_n \Rightarrow \det Q = \pm 1$ και άρα

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

Εφαρμογές της QR

- Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων:

Έστω $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ με $\text{rank}(A) = n \leq m$. Να βρεθεί $x \in \mathbb{R}^n$ ώστε

$$\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_2 = \arg \min_{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - A\mathbf{w}\|_2.$$

$$\text{Αν } A = QR = [Q_1 \quad Q_2] \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}, \text{ τότε}$$

$$\begin{aligned} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_2^2 &= \min_{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n} \|Q^T(\mathbf{b} - A\mathbf{w})\|_2^2 = \min_{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n} \|Q^T(\mathbf{b} - QR\mathbf{w})\|_2^2 \\ &= \min_{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n} \|Q_1^T \mathbf{b} - R_1 \mathbf{w}\|_2^2 + \|Q_2^T \mathbf{b}\|_2^2 \end{aligned}$$

$$\|Q_1^T \mathbf{b} - R_1 \mathbf{w}\|_2 = 0 \Rightarrow R_1 \mathbf{w} = Q_1^T \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{w} = R_1^{-1} Q_1^T \mathbf{b}.$$