UNIVERZITA PALACKÉHO V OLOMOUCI
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

QR rozklad a jeho využití

Katedra matematické analýzy a aplikací matematiky
Vedoucí bakalářské práce: **RNDr. Jitka Machalová, Ph.D.**
Vypracovala: **Markéta Zajíčková**
Studijní program: B1103 Aplikovaná matematika
Studijní obor: Matematika–ekonomie se zaměřením na bankovnictví/pojišťovnictví
Forma studia: prezenční
Rok odevzdání: 2017

BIBLIOGRAFICKÁ IDENTIFIKACE

Autor: Markéta Zajíčková

Název práce: QR rozklad a jeho využití

Typ práce: Bakalářská práce

Pracoviště: Katedra matematické analýzy a aplikací matematiky

Vedoucí práce: RNDr. Jitka Machalová, Ph.D.

Rok obhajoby práce: 2017

Abstrakt: Cílem této bakalářské práce je vysvětlit QR rozklad, což je jeden ze způsobů, jak rozložit danou matici na součin dvou matic, $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$, kde $\boldsymbol{Q}$ je ortogonální, popř. ortonormální matice a $\boldsymbol{R}$ je horní trojúhelníková matice.
V práci jsou rozebírány metody pro nalezení tohoto rozkladu, tj. QR rozklad pomocí Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu, pomocí Householderovy matice a pomocí Givensovy rotace. Následně se zabýváme jeho využitím při řešení soustav lineárních rovnic a při výpočtu vlastních čísel. Celá práce je doplněna vlastními zdrojovými kódy a QR příkazem v matematickém softwaru Matlab.

Klíčová slova: QR rozklad, Matlab, ortogonální matice, ortonormální matice, horní trojúhelníková matice, soustava lineárních rovnic, vlastní čísla, QR rozklad pomocí Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu, QR rozklad pomocí Givensovy rotace, QR rozklad pomocí Householderovy matice zrcadlení

Počet stran: 56

Počet příloh: 1

Jazyk: český

BIBLIOGRAPHICAL IDENTIFICATION

Author: Markéta Zajíčková

Title: QR Decomposition and Its Using

Type of thesis: Bachelor's

Department: Department of Mathematical Analysis and Application of Mathematics

Supervisor: RNDr. Jitka Machalová, Ph.D.

The year of presentation: 2017

Abstract: The aim of this bachelor´s thesis is to explain the QR decomposition, which is one of the ways to decompose a given matrix on the product of two matrices $\boldsymbol{Q}$ and $\boldsymbol{R}$, where $\boldsymbol{Q}$ is an orthogonal, resp. orthonormal matrix and $\boldsymbol{R}$ is an upper triangular matrix. The thesis analyzes the methods of finding this decomposition, i.e. the QR decomposition using the Gram-Schmidt orthogonalization process, using the Householder matrix and the Givens rotation. We then deal with its use in solving linear system of equations and in calculating eigenvalues. The whole thesis is complemented by its own source codes and QR commands in Matlab software.

Key words: QR decomposition, Matlab software, orthogonal matrix, orthonormal matrix, upper triangular matrix, linear system of equations, eigenvalues, QR decomposition using the Gram-Schmidt orthogonalization process, QR decomposition using the Givens rotation, QR decomposition using the Householder matrix

Number of pages: 56

Number of appendices: 1

Language: Czech

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracovala samostatně pod vedením paní RNDr. Jitky Machalové, Ph.D., a všechny použité zdroje jsem uvedla v seznamu literatury.

V Olomouci dne ....

podpis

Obsah

Poděkování

Děkuji vedoucí mé bakalářské práce, paní RNDr. Jitce Machalové, Ph.D., za odborné vedení a za čas věnovaný konzultacím. Dále bych ráda poděkovala mým blízkým za podporu při tvorbě této bakalářské práce.

Seznam použitých symbolů

$\mathbb{R}$	...	množina reálných čísel $\mathbb{R}$
$\mathbb{R}^n$	...	n-rozměrný vektorový prostor
$\mathbb{R}^{m,n}$	...	lineární prostor reálných matic typu m,n
$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m,n}$	...	obdélníková matice
$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$	...	čtvercová matice
$\boldsymbol{0}$	...	nulová matice
$\boldsymbol{A}^{(k)}$	...	k-tá matice v posloupnosti matic
$\boldsymbol{D}$	...	diagonální matice
$\boldsymbol{D}^{-1}$	...	inverzní matice k matici $\boldsymbol{D}$
$\boldsymbol{G}_k$	...	k-tá Givensova matice
$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_k)$	...	Householderova matice vektoru $\boldsymbol{x}_k$
$\boldsymbol{I}$	...	jednotková matice
$\boldsymbol{P}$	...	permutační matice
$\boldsymbol{Q}^T$	...	transponovaná matice k matici $\boldsymbol{Q}$
$\boldsymbol{R}$	...	horní trojúhelníková matice
$\boldsymbol{o}$	...	nulový vektor
$\boldsymbol{a}_k$	...	k-tý sloupcový vektor matice $\boldsymbol{A}$
$\boldsymbol{a}_i^{(k)}$	...	i-tý sloupcový vektor matice $\boldsymbol{A}^{(k)}$
d_k	...	k-tý diagonální prvek matice $\boldsymbol{D}$
$\boldsymbol{q}_k$	...	k-tý ortogonální sloupcový vektor
$\hat{\boldsymbol{q}}_k$	...	k-tý ortonormální sloupcový vektor
r_{ij}	...	prvek i-tého řádku a j-tého sloupce v matici $\boldsymbol{R}$
λ_n	...	n-té vlastní číslo
$sgn(\cdot)$	...	znaménko daného prvku
$h(\boldsymbol{A})$	...	hodnost matice $\boldsymbol{A}$
$\|\cdot\|$	...	euklidovská norma vektoru
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	...	skalární součin

Úvod

Cílem této bakalářské práce je nastudovat QR rozklad matice a zaměřit se na různé typy úloh, u kterých lze tento rozklad efektivně použít. Dále bude potřeba práci doplnit vlastními příklady a v matematickém softwaru Matlab sestavit vlastní programy pro řešení konkrétních úloh.

Pro lepší orientaci rozčleníme bakalářskou práci do několika kapitol.
V první kapitole nadefinujeme pojmy, se kterými se v průběhu celé práce budeme setkávat a jejichž pochopení je pro porozumění této práce nezbytné. Poté vysvětlíme Gram-Schmidtův ortogonalizační proces a to jak teoreticky, tak prakticky na konkrétním příkladu. V následující kapitole uvedeme tři metody pro nalezení QR rozkladu matice, kterými jsou QR rozklad pomocí Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu, jenž je možno provést dvěma způsoby, QR rozklad pomocí Householderovy matice zrcadlení a QR rozklad pomocí Givensovy rotace. Všechny zmíněné metody nejdříve popíšeme teoreticky, poté je aplikujeme na příkladu a nakonec s využitím matematického softwaru Matlab vytvoříme vlastní zdrojové kódy. Ve třetí kapitole ukážeme, jak nalezený QR rozklad matice efektivně využít při řešení soustav lineárních rovnic a při výpočtu vlastních čísel. Opět ke každé podkapitole vytvoříme vlastní zdrojový kód. V poslední kapitole se budeme věnovat QR rozkladu v Matlabu, popíšeme příkaz [Q,R]=qr(A) a některé jeho modifikace, pomocí nichž dostaneme hledaný rozklad.

Problematiku QR rozkladu řeší různé programy, avšak jak již bylo zmíněno, v této bakalářské práci budeme využívat matematický software Matlab verze 7.6.0.324 (R2008a). Pro pochopení uvedených kódů předpokládáme základní znalost tohoto programu. Celá práce bude vysázena v programu LaTeX, a proto bylo při její tvorbě potřeba prohloubit znalosti spojené s tímto programem.

1. Přípravná kapitola

V této kapitole vysvětlíme důležité pojmy, které jsou potřebné pro pochopení námi probírané látky. Při jejich formulování jsme vycházeli z definic uvedených v literatuře [4], [6].

Definice 1.1 (Horní trojúhelníková matice)
Čtvercová matice $\boldsymbol{R} = (r_{ik})$ n-tého řádu se nazývá horní trojúhelníková matice, je-li $r_{ik} = 0$ pro $i > k, i, k = 1, \ldots, n$.

Mluvíme o matici, která má pod hlavní diagonálou samé nuly.

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \ldots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \ldots & r_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & r_{nn} \end{pmatrix}$$

Definice 1.2 (Lineární nezávislost vektorů)
Množina vektorů $\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n\}$ se nazývá lineárně nezávislá, jestliže každá jejich netriviální lineární kombinace je nenulovým vektorem.

Definice 1.3 (Hodnost matice)
Hodností matice $\boldsymbol{A}$ rozumíme přirozené číslo $h = h(\boldsymbol{A})$, které udává maximální počet lineárně nezávislých řádků (sloupců) matice $\boldsymbol{A}$.

Definice 1.4 (Regulární matice)
Matice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$ se nazývá regulární, jestliže $h(\boldsymbol{A}) = n$.

Definice 1.5 (Skalární součin)
Operaci $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, která dvojici vektorů $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{q}$ přiřadí skalár $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} \rangle$, splňující tyto podmínky $\forall \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^n, \forall \alpha \in \mathbb{R}$:

1. $\langle \alpha \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} \rangle = \alpha \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} \rangle, \langle \boldsymbol{a}, \alpha \boldsymbol{q} \rangle = \alpha \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} \rangle$
2. $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} \rangle = \langle \boldsymbol{q}, \boldsymbol{a} \rangle$
3. $\langle \boldsymbol{a} + \boldsymbol{q}, \boldsymbol{r} \rangle = \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{r} \rangle + \langle \boldsymbol{q}, \boldsymbol{r} \rangle, \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} + \boldsymbol{r} \rangle = \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} \rangle + \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{r} \rangle$
4. $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{a} \rangle \geq 0$, *přičemž* $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{a} \rangle = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{a} = \boldsymbol{o}$,

nazýváme skalárním součinem.

V prostoru $\mathbb{R}^n$ je skalární součin $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} \rangle$ vektorů $\boldsymbol{a} = (a_1, \ldots, a_n)^T$ a $\boldsymbol{q} = (q_1, \ldots, q_n)^T$ dán následovně:

$$\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} \rangle = a_1 q_1 + a_2 q_2 + \cdots + a_n q_n.$$

Definice 1.6 (Norma vektoru)

Zobrazení $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ *s následujícími vlastnostmi* $\forall \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^n, \alpha \in \mathbb{R}$*:*

1. $\|\boldsymbol{a}\| \geq 0,$ *přičemž* $\|\boldsymbol{a}\| = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{a} = \boldsymbol{o}$
2. $\|\alpha \boldsymbol{a}\| = |\alpha| \, \|\boldsymbol{a}\|$
3. $\|\boldsymbol{a} + \boldsymbol{q}\| \leq \|\boldsymbol{a}\| + \|\boldsymbol{q}\|$

se nazývá norma vektoru.

V celé práci budeme uvažovat Euklidovskou normu vektoru, kdy $\forall \boldsymbol{a} = (a_1, \ldots, a_n)^T \in \mathbb{R}^n$ je

$$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{a} \rangle} = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \cdots + a_n^2}.$$

Výpočet této normy ukážeme na následujícím příkladě.

Příklad 1.1 Nechť je dán vektor $\boldsymbol{a} = (1, 2, -1)^T$. Vypočtěte normu tohoto vektoru.

Řešení:

$$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{(1)^2 + (2)^2 + (-1)^2} = \sqrt{1 + 4 + 1} = \sqrt{6}.$$

Definice 1.7 (Lineární obal)

Nechť je dána množina vektorů $\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n\}$, $\boldsymbol{a}_k \in \mathbb{R}^n$, *k = 1, …, n. Lineárním obalem množiny* $\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n\}$ *nazýváme množinu všech lineárních kombinací vektorů* $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$.

Definice 1.8 (Báze prostoru)

Množina vektorů $\{\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_n\}$, $\boldsymbol{a}_k \in \mathbb{R}^n$, $k = 1, \dots, n$ *se nazývá bází prostoru* $\mathbb{R}^n$*, jestliže platí:*

1. *vektory* $\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_n$ *jsou lineárně nezávislé,*
2. *pro každý vektor* $\boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^n$ *existují čísla* $\alpha_k \in \mathbb{R}$, $k = 1, \dots, n$ *taková, že*

$$\boldsymbol{q} = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \boldsymbol{a}_k.$$

Definice 1.9 (Ortogonální vektory, Ortonormální vektory)

Vektory $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{q}$ *nazýváme ortogonální, jestliže je jejich skalární součin roven nule, tj.* $\langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{q} \rangle = 0$*. Mají-li ortogonální vektory navíc jednotkovou normu, mluvíme o vektorech ortonormálních.*

Poznámka 1.1

Jestliže vektory $\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_n$ tvoří bázi prostoru $\mathbb{R}^n$ a jsou vzájemně ortogonální, resp. ortonormální, hovoříme o ortogonální, resp. ortonormální bázi.

Definice 1.10 (Ortogonální matice, Ortonormální matice)

Matice $\boldsymbol{A}$ *se nazývá ortogonální, jsou-li její sloupcové vektory vzájemně ortogonální. O ortonormální matici hovoříme tehdy, je-li tvořená vzájemně ortonormálními sloupcovými vektory.*

Poznámka 1.2

Poznamenejme, že v případě čtvercové ortonormální matice $\boldsymbol{A}$ platí:
$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$, tedy $\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A}^{-1}$.

Poznámka 1.3

Pokud by čtvercová matice $\boldsymbol{A}$ byla ortogonální, pak platí: $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D}$.

Poznámka 1.4

Někteří autoři, viz např. [5], [6], [7], [8], hovoří o ortogonální matici v případě čtvercové matice $\boldsymbol{A}$ splňující podmínku uvedenou v Poznámce 1.2, avšak my budeme hovořit o matici ortonormální.

Nyní blíže představíme Gram-Schmidtův ortogonalizační/ortonormalizační proces, který z množiny lineárně nezávislých vektorů vytvoří ortogonální, případně ortonormální systém. Budeme jej využívat při hledání QR rozkladu matice $\boldsymbol{A}$.

Gram-Schmidtův ortogonalizační/ortonormalizační proces

Nechť je dána posloupnost lineárně nezávislých vektorů $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$, $\boldsymbol{a}_k \in \mathbb{R}^m$, $k = 1, \ldots, n$ takových, že $m \geq n$. Naším cílem je z ní zkonstruovat ortogonální posloupnost vektorů $\boldsymbol{q}_1, \ldots, \boldsymbol{q}_n$, $\boldsymbol{q}_k \in \mathbb{R}^m$, $k = 1, \ldots, n$, a to následujícím způsobem, viz např. [4], [6], [7]:

1. Položíme $\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{a}_1$.

2. Pro $k = 2, \ldots, n$ vypočteme vektor

$$\boldsymbol{q}_k = \boldsymbol{a}_k - \frac{\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{a}_k \rangle}{\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_1 \rangle} \boldsymbol{q}_1 - \frac{\langle \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{a}_k \rangle}{\langle \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_2 \rangle} \boldsymbol{q}_2 - \cdots - \frac{\langle \boldsymbol{q}_{k-1}, \boldsymbol{a}_k \rangle}{\langle \boldsymbol{q}_{k-1}, \boldsymbol{q}_{k-1} \rangle} \boldsymbol{q}_{k-1}, \tag{1.1}$$

   kde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ je skalární součin.

Gram-Schmidtův ortogonalizační proces ukážeme na následujícím příkladě:

Příklad 1.2 Vektory

$$\boldsymbol{a}_1 = (2, 3, 1)^T,$$
$$\boldsymbol{a}_2 = (-1, -1, -2)^T,$$
$$\boldsymbol{a}_3 = (2, 5, -1)^T$$

zortogonalizujeme pomocí Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu.

Řešení:

Nejprve ověříme, jestli jsou vektory $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ lineárně nezávislé. Proto z nich sestavíme matici, kterou vhodnými elementárními úpravami převedeme na horní trojúhelníkový tvar.

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 4 \\ 0 & 3 & 4 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & -8 \end{pmatrix}$$

Vidíme, že podmínka lineární nezávislosti je splněna.

Při splnění požadavku lineární nezávislosti se dostáváme k samotné ortogonalizaci.

1. Pro $k = 1$ položme $\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{a}_1 = (2,\ 3,\ 1)^T$.
2. Pro $k = 2$ vypočteme $\boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{a}_2 - \frac{\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{a}_2 \rangle}{\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_1 \rangle} \boldsymbol{q}_1$ následovně:

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{a}_2 \rangle &= \left\langle (2,3,1)^T, (-1,-1,-2)^T \right\rangle = \\
&= 2 \cdot (-1) + 3 \cdot (-1) + 1 \cdot (-2) = -7, \\
\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_1 \rangle &= 2 \cdot 2 + 3 \cdot 3 + 1 \cdot 1 = 14, \\
\boldsymbol{q}_2 &= (-1,-1,-2)^T + \frac{7}{14}(2,3,1)^T = \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T.
\end{aligned}
$$

3. Pro $k = 3$ spočteme $\boldsymbol{q}_3 = \boldsymbol{a}_3 - \frac{\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{a}_3 \rangle}{\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_1 \rangle} \boldsymbol{q}_1 - \frac{\langle \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{a}_3 \rangle}{\langle \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_2 \rangle} \boldsymbol{q}_2$ takto:

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{a}_3 \rangle &= \left\langle (2,3,1)^T, (2,5,-1)^T \right\rangle = \\
&= 2 \cdot 2 + 3 \cdot 5 + 1 \cdot (-1) = 18, \\
\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_1 \rangle &= 14, \\
\langle \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{a}_3 \rangle &= \left\langle \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T, (2,5,-1)^T \right\rangle = \\
&= \frac{1}{2} \cdot 5 + \left(-\frac{3}{2}\right) \cdot (-1) = \frac{8}{2} = 4, \\
\langle \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_2 \rangle &= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \left(-\frac{3}{2}\right) \cdot \left(-\frac{3}{2}\right) = \frac{10}{4} = \frac{5}{2}, \\
\boldsymbol{q}_3 &= (2,5,-1)^T - \frac{18}{14}(2,3,1)^T - \frac{4}{\frac{5}{2}} \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T = \\
&= \left(-\frac{4}{7}, \frac{12}{35}, \frac{4}{35}\right)^T.
\end{aligned}
$$

Vypočítané vektory $\boldsymbol{q}_1,\ \boldsymbol{q}_2,\ \boldsymbol{q}_3$ jsou ortogonální.

Poznámka 1.5

Poznamenejme, že ortogonalizační proces nemusí nalézt jedinou možnou kombinaci ortogonálních vektorů. Každý lineární násobek některého z těchto získaných vektorů bude ortogonální k vektorům ostatním.

V rámci této bakalářské práce budeme potřebovat pracovat také s ortonormálními vektory a nyní ukážeme, jak tyto vektory nalezneme.

Nechť je dána posloupnost lineárně nezávislých vektorů $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$, $\boldsymbol{a}_k \in \mathbb{R}^m$, $k = 1, \ldots, n$ takových, že $m \geq n$. Naším cílem je z ní zkonstruovat ortonormální posloupnost vektorů $\hat{\boldsymbol{q}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{q}}_n$, $\hat{\boldsymbol{q}}_k \in \mathbb{R}^m$, $k = 1, \ldots, n$, a to jedním z uvedených postupů, viz např. [4]:

A) V prvním způsobu nejprve najdeme ortogonální systém vektorů $\boldsymbol{q}_1, \ldots, \boldsymbol{q}_n$ dle vztahu (1.1) a poté každý z vektorů zortonormalizujeme, tedy pro $k = 1, \ldots, n$ každý vektor $\boldsymbol{q}_k$ vydělíme jeho normou, tj. $\hat{\boldsymbol{q}}_k = \frac{\boldsymbol{q}_k}{\|\boldsymbol{q}_k\|}$.

B) Nebo použijeme druhý postup, kde ortonormalizujeme ihned v průběhu ortogonalizace, proto pro $k = 1, \ldots, n$ vypočteme vektor

$$\boldsymbol{q}_k = \boldsymbol{a}_k - \langle \hat{\boldsymbol{q}}_1, \boldsymbol{a}_k \rangle \hat{\boldsymbol{q}}_1 - \langle \hat{\boldsymbol{q}}_2, \boldsymbol{a}_k \rangle \hat{\boldsymbol{q}}_2 - \cdots - \left\langle \hat{\boldsymbol{q}}_{k-1}, \boldsymbol{a}_k \right\rangle \hat{\boldsymbol{q}}_{k-1}.$$

Dále tento vektor znormalizujeme, tj. vydělíme jej jeho normou, tedy

$$\hat{\boldsymbol{q}}_k = \frac{\boldsymbol{q}_k}{\|\boldsymbol{q}_k\|}$$

a pokračujeme ve výpočtu.

Tyto postupy bývají v některých literaturách označovány jako Gram-Schmidtův ortonormalizační proces, viz např. [4].

Gram-Schmidtův ortonormalizační proces si ukážeme na následujících příkladech, a to jak podle postupu A), tak podle postupu B):

Příklad 1.3 Ortogonální vektory převzaté z Příkladu 1.2

$$\boldsymbol{q}_1 = (2, 3, 1)^T,$$

$$\boldsymbol{q}_2 = \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T,$$

$$\boldsymbol{q}_3 = \left(-\frac{4}{7}, \frac{12}{35}, \frac{4}{35}\right)^T$$

zortonormalizujte podle postupu A).

Řešení:

Požadavek lineární nezávislosti jsme ověřili v Příkladě 1.2, a proto se můžeme rovnou věnovat ortonormálnímu procesu.

1. Pro $k = \mathit{1}$ položíme $\hat{\boldsymbol{q}}_1 = \frac{1}{\sqrt{2^2+3^2+1^2}}(2,3,1)^T = \frac{1}{\sqrt{14}}(2,3,1)^T$,
2. Pro $k = \mathit{2}$ je $\hat{\boldsymbol{q}}_2 = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2+\left(-\frac{3}{2}\right)^2}}\left(0,\frac{1}{2},-\frac{3}{2}\right)^T = \frac{1}{\sqrt{10}}(0,1,-3)^T$,
3. Pro $k = \mathit{3}$ je $\hat{\boldsymbol{q}}_3 = \frac{1}{\sqrt{\left(-\frac{4}{7}\right)^2+\left(\frac{12}{35}\right)^2+\left(\frac{4}{35}\right)^2}}\left(-\frac{4}{7},\frac{12}{35},\frac{4}{35}\right)^T = \frac{1}{\sqrt{35}}(-5,3,1)^T$.

Příklad 1.4 Vektory

$$\boldsymbol{a}_1 = (2,3,1)^T,$$

$$\boldsymbol{a}_2 = (-1,-1,-2)^T,$$

$$\boldsymbol{a}_3 = (2,5,-1)^T$$

zortonormalizujte s využitím Gram-Schmidtova ortonormalizačního procesu podle způsobu B).

Řešení:

Opět nebudeme kontrolovat lineární nezávislost, neboť je ověřena v Příkladě 1.2, a proto se budeme rovnou zabývat ortonormalizací.

1. Pro $k = \mathit{1}$ položíme $\hat{\boldsymbol{q}}_1 = \frac{1}{\sqrt{2^2+3^2+1^2}}(2,3,1)^T = \frac{1}{\sqrt{14}}(2,3,1)^T$.
2. Pro $k = \mathit{2}$ vypočteme $\hat{\boldsymbol{q}}_2$ následovně:

$$\langle \hat{\boldsymbol{q}}_1, \boldsymbol{a}_2 \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{14}}(2,3,1)^T, (-1,-1,-2)^T \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{14}}(2\cdot(-1) + 3\cdot(-1) + 1\cdot(-2)) = -\frac{7}{\sqrt{14}},$$

$$\boldsymbol{q}_2 = (-1,-1,-2)^T + \frac{7}{\sqrt{14}}\frac{1}{\sqrt{14}}(2,3,1)^T =$$

$$= \left((-1)+1, (-1)+\frac{3}{2}, (-2)+\frac{1}{2}\right)^T = \left(0,\frac{1}{2},-\frac{3}{2}\right)^T,$$

$$\hat{\boldsymbol{q}}_2 = \frac{1}{\sqrt{0^2+\left(\frac{1}{2}\right)^2+\left(-\frac{3}{2}\right)^2}}\left(0,\frac{1}{2},-\frac{3}{2}\right)^T = \frac{1}{\sqrt{10}}(0,1,-3)^T.$$

3. Pro $k = 3$ spočteme $\hat{\boldsymbol{q}}_3$ takto:

$$\langle \hat{\boldsymbol{q}}_1, \boldsymbol{a}_3 \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{14}}(2,3,1)^T, (2,5,-1)^T \right\rangle =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{14}}(2 \cdot 2 + 3 \cdot 5 + 1 \cdot (-1)) = \frac{18}{\sqrt{14}},$$
$$\langle \hat{\boldsymbol{q}}_2, \boldsymbol{a}_3 \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{10}}(0,1,-3)^T, (2,5,-1)^T \right\rangle =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{10}}(0 \cdot 2 + 1 \cdot 5 + (-3) \cdot (-1)) = \frac{8}{\sqrt{10}},$$
$$\boldsymbol{q}_3 = (2,5,-1)^T - \frac{18}{\sqrt{14}}\frac{1}{\sqrt{14}}(2,3,1)^T - \frac{8}{\sqrt{10}}\frac{1}{\sqrt{10}}(0,1,-3)^T =$$
$$= \left(2 - \frac{18}{7}, 5 - \frac{27}{7} - \frac{4}{5}, (-1) - \frac{9}{7} + \frac{12}{5}\right)^T = \left(-\frac{4}{7}, \frac{12}{35}, \frac{4}{35}\right)^T,$$
$$\hat{\boldsymbol{q}}_3 = \frac{1}{\sqrt{\left(-\frac{4}{7}\right)^2 + \left(\frac{12}{35}\right)^2 + \left(\frac{4}{35}\right)^2}} \left(-\frac{4}{7}, \frac{12}{35}, \frac{4}{35}\right)^T = \frac{1}{\sqrt{35}}(-5,3,1)^T.$$

Právě vytvořené vektory $\hat{\boldsymbol{q}}_1$, $\hat{\boldsymbol{q}}_2$, $\hat{\boldsymbol{q}}_3$ jsou ortonormální a vidíme, že jak metodou A), tak B) obdržíme stejné ortonormální vektory.

Poznámka 1.6

Na rozdíl od ortogonalizace, pomocí které nemusíme k dané posloupnosti lineárně nezávislých vektorů získat jedinou variantu ortogonálních vektorů, ortonormalizací obdržíme, až na znaménko, jedinou možnou variantu ortonormálních vektorů. Tedy spávně bychom měli v příkladech při výpočtu normy dávat před odmocninu $\pm$, avšak my v celé bakalářské práci budeme používat pouze kladnou variantu.

2. QR rozklad matice

V této kapitole se seznámíme s QR rozkladem matic a vysvětlíme jednotlivé metody pro jeho nalezení. Na konci každé podkapitoly ukážeme, jak danou metodou nalézt QR rozklad užitím matematického softwaru Matlab.

Definice 2.1 (QR rozklad)
Řekneme, že matice $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$ tvoří QR rozklad matice $\boldsymbol{A}$, jestliže platí

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

kde $\boldsymbol{Q}$ je ortogonální matice a $\boldsymbol{R}$ je horní trojúhelníková matice.

QR rozklad matice je jeden ze způsobů, jak zapsat matici $\boldsymbol{A}$ ve formě součinu dvou matic. Tyto matice se označují $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$, kde $\boldsymbol{Q}$ je ortonormální matice a $\boldsymbol{R}$ má tvar horní trojúhelníkové matice, což už bylo zmíněno v Definici 2.1.

V různých zdrojích se můžeme setkat s různými zněními vět o existenci matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$, případně i o jejich jednoznačnosti. Nyní uvedeme dvě z nich.

Věta 2.1 *Je-li $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m,n}$ reálná matice s lineárně nezávislými sloupci, pak existuje jediná dvojice matic $\boldsymbol{Q}$, $\boldsymbol{R}$, kde $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{R}^{m,n}$ a $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}$, $\boldsymbol{R}$ je regulární, horní trojúhelníková matice řádu n taková, že platí $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$.*

Důkaz viz [7] str. 102.

Nyní uvedeme větu druhou.

Věta 2.2 *Nechť $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m,n}$, $m \geq n$, je matice s lineárně nezávislými sloupci. Pak existuje matice $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{R}^{m,n}$ s ortonormálními sloupci a horní trojúhelníková matice $\boldsymbol{R} \in \mathbb{R}^{n,n}$ s kladnými reálnými prvky na hlavní diagonále taková, že platí $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$.*

Důkaz viz [10] str. 169.

Obě zmíněné věty hovoří o existenci matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$. Zatímco Věta 2.1 říká, že existuje jediná dvojice matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$, Věta 2.2 o jednoznačnosti nehovoří. Ani v tvrzení o matici $\boldsymbol{R}$ nejsou totožné, neboť první věta popisuje matici $\boldsymbol{R}$ pouze jako horní trojúhelníkovou, avšak věta druhá navíc upřesňuje její hlavní diagonálu, která je tvořená kladnými reálnými prvky. V obou případech je matice $\boldsymbol{R}$ regulární, neboť horní trojúhelníková matice, která má na hlavní diagonále kladná čísla, je regulární, a také matice $\boldsymbol{Q}$ jsou v obou případech ortonormální. Požadavek ortonormální matice se však nevylučuje s Definicí 2.1, která mluví o matici ortogonální, neboť je-li matice ortonormální, pak je i ortogonální, což naopak neplatí.

Matice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m,n}$, $m \geq n$ a $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{R}^{m,n}$, $m \geq n$ mohou být jak čtvercového, tak obdélníkového typu. Tedy QR rozklad lze najít jak pro čtvercové, tak obdélníkové matice $\boldsymbol{A}$.

QR rozklad se využívá například při hledání vlastních čísel dané matice anebo při hledání řešení soustavy lineárních rovnic.

Tento rozklad lze najít různými způsoby. Jedním z nich je použití Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu, další postup je pomocí Householderovy matice a poslední z nich je s využitím Givensovy rotace.

2.1. QR rozklad pomocí Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu

V Přípravné kapitole jsme vysvětlili Gram-Schmidtův ortogonalizační proces. Nyní jej využijeme při hledání QR rozkladu a ukážeme ho na dvou různých postupech.

2.1.1. První způsob určení QR rozkladu

Při hledání QR rozkladu se budeme držet následujícího postupu, který lze najít např. v [9], [10]. Nejprve jej uvádíme obecně a pak na konkrétním příkladě. Tato metoda odpovídá Větě 2.2, tj. najdeme matici $\boldsymbol{Q}$ s ortonormálními sloupci a horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{R}$ s kladnými reálnými prvky na hlavní diagonále.

Nechť je dána matice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m,n}$, $m \geq n$. Naším cílem je určit QR rozklad dané matice, tedy nalézt matice $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$ podle následujícího postupu:

1. Nejprve zkontrolujeme, zda jsou sloupce matice $\boldsymbol{A}$, tedy vektory $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$, $\boldsymbol{a}_k \in \mathbb{R}^m$, $k = 1, \ldots, n$ lineárně nezávislé. Tedy, že $h(\boldsymbol{A}) = n$.
   Pokud je požadavek lineární nezávislosti splněn, pak pomocí Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu, viz Přípravná kapitola, zortogonalizujeme vektory $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ na množinu ortogonálních vektorů $\{\boldsymbol{q}_1, \ldots, \boldsymbol{q}_n\}$, $\boldsymbol{q}_k \in \mathbb{R}^m, k = 1, \ldots, n$ prostoru $\mathbb{R}^n$.

2. S využitím Gram-Schmidtova ortonormalizačního procesu, který je uvedený v Přípravné kapitole, zortonormalizujeme získané ortogonální vektory, čímž dostaneme množinu ortonormálních vektorů $\{\hat{\boldsymbol{q}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{q}}_n\}$, $\hat{\boldsymbol{q}}_k \in \mathbb{R}^m$, $k = 1, \ldots, n$. Poté položíme

$$\boldsymbol{Q} = (\hat{\boldsymbol{q}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{q}}_n).$$

3. Matici $\boldsymbol{R}$ můžeme získat dvěma způsoby:

   (a) Uspořádáním norem ortogonálních vektorů $\boldsymbol{q}_1, \ldots, \boldsymbol{q}_n$ a hodnot skalárních součinů ortonormálních vektorů a vektorů matice $\boldsymbol{A}$ do horní trojúhelníkové matice

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \|\boldsymbol{q}_1\| & \langle \hat{\boldsymbol{q}}_1, \boldsymbol{a}_2 \rangle & \langle \hat{\boldsymbol{q}}_1, \boldsymbol{a}_3 \rangle & \ldots & \langle \hat{\boldsymbol{q}}_1, \boldsymbol{a}_n \rangle \\ 0 & \|\boldsymbol{q}_2\| & \langle \hat{\boldsymbol{q}}_2, \boldsymbol{a}_3 \rangle & \ldots & \langle \hat{\boldsymbol{q}}_2, \boldsymbol{a}_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & \|\boldsymbol{q}_n\| \end{pmatrix}. \tag{2.1}$$

   (b) Položíme

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{Q}^T \boldsymbol{A}. \tag{2.2}$$

   Vynásobíme-li vztah $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$ maticí $\boldsymbol{Q}^T$ zleva, dostaneme matici $\boldsymbol{R}$ ve tvaru $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}$, neboť $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}$, viz Poznámka 1.2.

Oba postupy výpočtu matice $\boldsymbol{R}$ nám dají stejný výsledek, což ověříme v následujícím příkladě v bodě 3.

Nyní ukážeme celý postup.

Příklad 2.1 Pro danou matici

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix}$$

určíme její QR rozklad.

Řešení:

1. Nejprve je třeba ověřit, zda jsou sloupce matice $\boldsymbol{A}$ lineárně nezávislé, což jsme otestovali v Příkladě 1.2. V tomtéž příkladě jsme zortogonalizovali sloupcové vektory matice $\boldsymbol{A}$, proto je nebudeme znovu počítat a pouze je převezmeme, tedy:

$$\boldsymbol{q}_1 = (2, 3, 1)^T,$$

$$\boldsymbol{q}_2 = \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T,$$

$$\boldsymbol{q}_3 = \left(-\frac{4}{7}, \frac{12}{35}, \frac{4}{35}\right)^T.$$

2. Potřebné ortonormální vektory $\hat{\boldsymbol{q}}_1$, $\hat{\boldsymbol{q}}_2$, $\hat{\boldsymbol{q}}_3$ taktéž převezmeme, neboť jsme je vypočítali v Příkladech 1.3, 1.4 a poté z nich vytvoříme matici $\boldsymbol{Q}$.

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{14}} & 0 & -\frac{5}{\sqrt{35}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{35}} \\ \frac{1}{\sqrt{14}} & -\frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{35}} \end{pmatrix}$$

3. V posledním kroku sestavíme matici $\boldsymbol{R}$. Pro vytvoření využijeme oba způsoby, jak (2.1), tak (2.2), a tím dokážeme, že výsledky postupů jsou totožné.

(a) Podle vztahu (2.1), výpočtů z Příkladu 1.4 a norem ortogonálních vektorů

$$\langle \hat{\boldsymbol{q}}_1, \boldsymbol{a}_2 \rangle = -\frac{7}{\sqrt{14}}, \qquad \|\bar{\boldsymbol{q}}_1\| = \sqrt{14},$$
$$\langle \hat{\boldsymbol{q}}_1, \boldsymbol{a}_3 \rangle = \frac{18}{\sqrt{14}}, \qquad \|\bar{\boldsymbol{q}}_2\| = \frac{\sqrt{10}}{2},$$
$$\langle \hat{\boldsymbol{q}}_2, \boldsymbol{a}_3 \rangle = \frac{8}{\sqrt{10}} \quad a \quad \|\bar{\boldsymbol{q}}_3\| = \frac{4}{\sqrt{35}}$$

položíme

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \sqrt{14} & -\frac{7}{\sqrt{14}} & \frac{18}{\sqrt{14}} \\ 0 & \frac{\sqrt{10}}{2} & \frac{8}{\sqrt{10}} \\ 0 & 0 & \frac{4}{\sqrt{35}} \end{pmatrix}.$$

(b) Nyní použijeme způsob (2.2).

Proto

$$\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{14}} & \frac{3}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{14}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{10}} & -\frac{3}{\sqrt{10}} \\ -\frac{5}{\sqrt{35}} & \frac{3}{\sqrt{35}} & \frac{1}{\sqrt{35}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{14} & -\frac{7}{\sqrt{14}} & \frac{18}{\sqrt{14}} \\ 0 & \frac{\sqrt{10}}{2} & \frac{8}{\sqrt{10}} \\ 0 & 0 & \frac{4}{\sqrt{35}} \end{pmatrix} = \boldsymbol{R}.$$

Dále provedeme kontrolu, a to tak, že ověříme platnost výrazu $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$.
Tudíž

$$\boldsymbol{QR} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{14}} & 0 & -\frac{5}{\sqrt{35}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{35}} \\ \frac{1}{\sqrt{14}} & -\frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{35}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{14} & -\frac{7}{\sqrt{14}} & \frac{18}{\sqrt{14}} \\ 0 & \frac{\sqrt{10}}{2} & \frac{8}{\sqrt{10}} \\ 0 & 0 & \frac{4}{\sqrt{35}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}.$$

Právě jsme vysvětlili první metodu pro nalezení QR rozkladu dané matice, avšak způsobů, jak hledat QR rozklad pomocí Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu, je více.

2.1.2. Druhý způsob určení QR rozkladu

Nyní ukážeme využití Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu na dalším způsobu nalezení QR rozkladu. Uvedeme ještě jednu větu o existenci matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$, viz [4].

Věta 2.3 *Nechť* $\boldsymbol{A}$=($\boldsymbol{a}_1, \ldots ,\boldsymbol{a}_n$), $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m,n}$, $m \geq n$ *je matice s lineárně nezávislými sloupci. Pak existuje jediná dvojice matic* $\boldsymbol{Q}$, $\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{R}^{m,n}$, $\boldsymbol{R} \in \mathbb{R}^{n,n}$, *tak, že* $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q}$ *je diagonální matice s kladnými diagonálními prvky,* $\boldsymbol{R}$ *horní trojúhelníková matice s diagonálními prvky 1, a přitom* $\boldsymbol{A}$=$\boldsymbol{QR}$.
Matici $\boldsymbol{Q}$=($\boldsymbol{q}_1, \ldots ,\boldsymbol{q}_n$) *a zároveň matici* $\boldsymbol{R}$=(r_{ik}) *lze získat jako matici* $\boldsymbol{A}^{(n)}$ *v posloupnosti* $\boldsymbol{A}^{(0)}$=$\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{A}^{(1)}, \ldots ,\boldsymbol{A}^{(n)}$, *kde*

$$\boldsymbol{A}^{(k)} = (\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{a}_{k+1}^{(k)}, \ldots, \boldsymbol{a}_n^{(k)}),\ \ k = 1, \ldots, n,$$

se vypočte z

$$\boldsymbol{A}^{(k-1)} = (\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_{k-1}, \boldsymbol{a}_k^{(k-1)}, \ldots, \boldsymbol{a}_n^{(k-1)})$$

takto:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{q}_k &= \boldsymbol{a}_k^{(k-1)}, & d_k &= \langle \boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{q}_k \rangle, \\ r_{kk} &= 1, & r_{ki} &= \left\langle \boldsymbol{q}_k, \boldsymbol{a}_i^{(k-1)} \right\rangle / d_k, \\ \boldsymbol{a}_i^{(k)} &= \boldsymbol{a}_i^{(k-1)} - r_{ki}\boldsymbol{q}_k, \end{aligned}$$

i = k+1,...,n.

Důkaz viz [4] str. 207.

Tato věta, v níž:

$\boldsymbol{R}$=$(r_{ij})_{i,j=1}^n$,
$\boldsymbol{A}^{(k)}$ je k-tá matice v posloupnosti matic,
$\boldsymbol{q}_k$ symbolizuje k-tý sloupcový vektor matice $\boldsymbol{Q}$,
$\boldsymbol{a}_i^{(k)}$ značí i-tý sloupcový vektor matice $\boldsymbol{A}^{(k)}$,

je návodem pro vypočítání QR rozkladu matice $\boldsymbol{A}$.

Zdůrazněme, že diagonální matice $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q}$ s kladnými diagonálními prvky představuje ortogonalitu matice $\boldsymbol{Q}$.

Zatímco Věta 2.1 je obecným případem vět o existenci matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$, Věta 2.3 je jejím specifických případem. Podobně jako Věta 2.1 říká, že existuje jediná dvojice matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$, avšak navíc udává, jakým způsobem tyto matice nalezneme.

Na rozdíl od předchozích vět hledá ortogonální matici $\boldsymbol{Q}$ a horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{R}$ s kladnými diagonálními prvky, které navíc musí být všechny rovny 1.

Nyní na konkrétním příkladě ukážeme, jak podle Věty 2.3 postupovat při hledání QR rozkladu.

Příklad 2.2 Pro danou matici

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix}$$

určíme její QR rozklad dle Věty 2.3.

Řešení:

1. Lineární nezávislost sloupců matice $\boldsymbol{A}$ je ověřena v Příkladě 1.2, kde jsme dokázali, že $h(\boldsymbol{A}) = 3$.

2. Nejprve provedeme výpočet pro $k = 1$.

$$\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{a}_1^{(0)} = (2,3,1)^T$$

$$d_1 = \langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_1 \rangle = 2 \cdot 2 + 3 \cdot 3 + 1 \cdot 1 = 14$$

$$r_{11} = 1$$

$$r_{12} = \left\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{a}_2^{(0)} \right\rangle / d_1 = (2 \cdot (-1) + 3 \cdot (-1) + 1 \cdot (-2)) \frac{1}{14} = -\frac{1}{2}$$

$$r_{13} = \left\langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{a}_3^{(0)} \right\rangle / d_1 = (2 \cdot 2 + 3 \cdot 5 + 1 \cdot (-1)) \frac{1}{14} = \frac{9}{7}$$

$$\boldsymbol{a}_1^{(1)} = \boldsymbol{a}_1^{(0)} - r_{11} \boldsymbol{q}_1 = (2-2, 3-3, 1-1) = (0,0,0)^T$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a}_2^{(1)} &= \boldsymbol{a}_2^{(0)} - r_{12} \boldsymbol{q}_1 = \\ &= \left((-1) - \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot 2, (-1) - \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot 3, (-2) - \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot 1 \right) = \\ &= \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{a}_3^{(1)} = \boldsymbol{a}_3^{(0)} - r_{13} \boldsymbol{q}_1 = \left(2 - \frac{9}{7} \cdot 2, 5 - \frac{9}{7} \cdot 3, (-1) - \frac{9}{7} \cdot 1 \right) = \left(-\frac{4}{7}, \frac{8}{7}, -\frac{16}{7} \right)^T$$

3. Pro $k = \mathit{2}$ dostáváme:

$$\boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{a}_2^{(1)} = \left(0, \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T,$$

$$d_2 = \langle \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_2 \rangle = 0 \cdot 0 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \left(-\frac{3}{2}\right) \cdot \left(-\frac{3}{2}\right) = \frac{5}{2},$$

$$r_{22} = 1,$$

$$r_{21} = \left\langle \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{a}_1^{(1)} \right\rangle / d_2 = 0,$$

$$r_{23} = \left\langle \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{a}_3^{(1)} \right\rangle / d_2 = \left(0 + \frac{1}{2} \cdot \frac{8}{7} + \left(-\frac{3}{2}\right) \cdot \left(-\frac{16}{7}\right)\right) \frac{2}{5} = \frac{8}{5},$$

$$\boldsymbol{a}_1^{(2)} = \boldsymbol{a}_1^{(1)} - r_{21} \boldsymbol{q}_2 = (0,0,0)^T,$$

$$\boldsymbol{a}_2^{(2)} = \boldsymbol{a}_2^{(1)} - r_{22} \boldsymbol{q}_2 = \left(0, \frac{1}{2} - 1 \cdot \frac{1}{2}, \left(-\frac{3}{2}\right) - 1 \cdot \left(-\frac{3}{2}\right)\right) = (0,0,0)^T,$$

$$\boldsymbol{a}_3^{(2)} = \boldsymbol{a}_3^{(1)} - r_{23} \boldsymbol{q}_2 = \left(\left(-\frac{4}{7}\right) - \frac{8}{5} \cdot 0, \frac{8}{7} - \frac{8}{5} \cdot \frac{1}{2}, \left(-\frac{16}{7}\right) - \frac{8}{5} \cdot \left(-\frac{3}{2}\right)\right) =$$

$$= \left(-\frac{4}{7}, \frac{12}{35}, \frac{4}{35}\right)^T.$$

4. Vypočítáme hodnoty pro $k = \mathit{3}$.

$$\boldsymbol{q}_3 = \boldsymbol{a}_3^{(2)} = \left(-\frac{4}{7}, \frac{12}{35}, \frac{4}{35}\right)^T$$

$$d_3 = \langle \boldsymbol{q}_3, \boldsymbol{q}_3 \rangle = \left(-\frac{4}{7}\right) \cdot \left(-\frac{4}{7}\right) + \frac{12}{35} \cdot \frac{12}{35} + \frac{4}{35} \cdot \frac{4}{35} = \frac{16}{35}$$

$$r_{33} = 1$$

$$r_{31} = 0$$

$$r_{32} = 0$$

$$\boldsymbol{a}_1^{(3)} = \boldsymbol{a}_1^{(2)} - r_{31} \boldsymbol{q}_3 = (0,0,0)^T$$

$$\boldsymbol{a}_2^{(3)} = \boldsymbol{a}_2^{(2)} - r_{32} \boldsymbol{q}_3 = (0,0,0)^T$$

$$\boldsymbol{a}_3^{(3)} = \boldsymbol{a}_3^{(2)} - r_{33} \boldsymbol{q}_3 = \left(\left(-\frac{4}{7}\right) - 1 \cdot \left(-\frac{4}{7}\right), \frac{12}{35} - 1 \cdot \frac{12}{35}, \frac{4}{35} - 1 \cdot \frac{4}{35}\right) =$$

$$= (0,0,0)^T$$

5. V posledním kroku sestavíme ze získaných hodnot matice $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$.

   Proto

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -\frac{4}{7} \\ 3 & \frac{1}{2} & \frac{12}{35} \\ 1 & -\frac{3}{2} & \frac{4}{35} \end{pmatrix}$$

   a

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{9}{7} \\ 0 & 1 & \frac{8}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Závěr: Na rozdíl od Příkladu 2.1, kde je matice $\boldsymbol{Q}$ sestavena z vektorů ortonormálních, jsme v tomto příkladě matici $\boldsymbol{Q}$ vytvořili z vektorů ortogonálních. Pokud bychom každý sloupcový vektor matice $\boldsymbol{Q}$ z Příkladu 2.2 vydělili jeho normou, bude nově vytvořená matice s maticí z Příkladu 2.1 totožná. Je zřejmé, že matice $\boldsymbol{R}$ z předchozího a tohoto příkladu jsou různé. Avšak když každý řádkový vektor matice $\boldsymbol{R}$ z Příkladu 2.1 vydělíme odpovídajícím diagonálním prvkem, tak prvky na hlavní diagonále budou rovny 1 a obě matice $\boldsymbol{R}$ budou stejné.

Nyní provedeme kontrolu tím, že dokážeme rovnost $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$.
Tedy

$$\boldsymbol{QR} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -\frac{4}{7} \\ 3 & \frac{1}{2} & \frac{12}{35} \\ 1 & -\frac{3}{2} & \frac{4}{35} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{9}{7} \\ 0 & 1 & \frac{8}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}.$$

2.1.3. QR rozklad pomocí Gram-Schmidtova ortogonalizačního procesu v Matlabu

Nyní vytvoříme v matematickém softwaru Matlab vlastní zdrojové kódy pro nalezení matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$. Nejprve sestavíme funkce pro postup uvedený v podkapitole 2.1.1, tj. hledáme ortonormální matici $\boldsymbol{Q}$ a horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{R}$ s kladnými reálnými diagonálními prvky. Ukážeme sestavení matice $\boldsymbol{R}$ jak podle (2.1), tak podle (2.2).

Tedy:

$function\ [Q, R] = qr1\_rozklad(A)$

$[m, n] = size(A);$

$Q = zeros(m, n);$

$R = zeros(n, n);$

$hodnost = rank(A);$

$if\ m < n$

  error('Není splněna podmínka: $m >= n$.')

end

$if\ hodnost\ \sim= n$

  error('Sloupcové vektory nejsou lineárně nezávislé.')

$else$

* $R(1, 1) = norm(A(:, 1));$

  $Q(:, 1) = A(:, 1)/(norm(A(:, 1)));$

  $for\ k = 2 : n$

    $c = Q(:, 1 : k - 1)' * A(:, k);$

    $q(:, k) = A(:, k) - Q(:, 1 : k - 1) * c;$

    $Q(:, k) = q(:, k)/(norm(q(:, k)));$

* $R(k, k) = norm(q(:, k));$

* $R(1 : k - 1, k) = c;$

  end

end

V tomto zdrojovém kódu jsme horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{R}$ s kladnými reálnými diagonáními prvky vytvořili pomocí (2.1). V kódu jsme nejprve ověřili podmínku $m \geq n$ a podmínku lineární nezávislosti vektorů. Jsou-li tyto podmínky splněny, pokračuje program v postupu dále.

Kdybychom požadovali, aby matice $\boldsymbol{R}$ byla sestavena podle (2.2), tak by stačilo, abychom z řádků označených symbolem * první vypustili a zbylé dva nahradili příkazem $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{Q}' * \boldsymbol{A}$;, viz kód *qr2_rozklad* na přiloženém CD. Avšak tento způsob je pro praxi nevýhodný, protože zbytečně počítáme nulové prvky matice $\boldsymbol{R}$. Obecně násobení matice maticí je neefektivní hlavně pro matice velkých rozměrů, neboť má za následek rychlé šíření a nárůst numerických chyb.

Pro druhý způsob určení QR rozkladu, který je uveden v podkapitole 2.1.2, tj. hledáme ortogonální matici $\boldsymbol{Q}$ a horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{R}$ s diagonálními prvky rovny 1, jsem vytvořila funkci:

```
function [Q, R, D] = qr3_rozklad(A)
[m, n] = size(A);
Q = zeros(m, n);
R = zeros(n, n);
Q = A;
hodnost = rank(A);
if m < n
    error('Není splněna podmínka: m >= n.')
end
if hodnost ~= n
    error('Sloupcové vektory nejsou lineárně nezávislé.')
else
    for k = 1 : n
        R(k, k) = 1;
        d(k) = (Q(:, k))' * (Q(:, k));
        for i = k + 1 : n
            R(k, i) = (Q(:, k))' * (Q(:, i))/d(k);
            Q(:, i) = Q(:, i) - R(k, i) * (Q(:, k));
        end
```

D = diag(d);

end

end

Zde jsme položili $\boldsymbol{Q}$=$\boldsymbol{A}$, avšak neznamená to, že matice $\boldsymbol{Q}$ je totožná s maticí $\boldsymbol{A}$. Příkaz jsme použili proto, abychom se vyhnuli složitému zadefinování posloupnosti matic uvedených ve Větě 2.3. Ve zdrojovém kódu funguje příkaz $\boldsymbol{Q}$=$\boldsymbol{A}$ tak, že pro každý k-tý krok je matice $\boldsymbol{A}^{(k)}$ nahrazena maticí $\boldsymbol{Q}$. Na konci kódu jsme nadefinovali diagonální matici $\boldsymbol{D}$, čehož využijeme později při řešení soustav lineárních rovnic. Samozřejmě jsme na začátku zkontrolovali, že $m \geq n$ a lineární nezávislost dané matice.

2.2. QR rozklad pomocí Householderovy matice zrcadlení

Nyní uvedeme druhou metodu pro nalezení QR rozkladu dané matice.
K nastudování této problematiky jsme využili literatury [3],[2],[7],[8]. Nejdříve zadefinujeme Householderovu matici zrcadlení a poté vysvětlíme princip této metody. Proces získání Householderovy matice nazýváme Householderovo zrcadlení nebo také Householderova transformace.

Definice 2.2 (Householderova matice)
Matice tvaru

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{I} - \frac{2}{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T, \tag{2.3}$$

kde $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ *je nenulový vektor, se nazývá Householderova matice zrcadlení.*

Z právě uvedené definice plyne, že

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})^T = \left(\boldsymbol{I} - \frac{2}{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T \right)^T = \boldsymbol{I}^T - \left(\frac{2}{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T \right)^T = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})$$

a

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})^T = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{I} - \frac{2}{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T)(\boldsymbol{I} - \frac{2}{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T) =$$

$$= \boldsymbol{I} - \frac{4}{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T + \frac{4}{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle} \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T = \boldsymbol{I},$$

tj. čtvercová matice $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})$ je symetrická a ortonormální.

Nechť je dána matice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m,n}$. Naším úkolem je určit QR rozklad této matice s využitím Householderovy matice zrcadlení, tj. nalézt matice $\boldsymbol{Q}$, $\boldsymbol{R}$ podle následujícího postupu:

V první řadě ověříme lineární nezávislost sloupců matice $\boldsymbol{A}$. Je-li tato podmínka splněna, začneme se věnovat samotnému procesu hledání matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$. Označme $\overline{\boldsymbol{A}}^{(0)} = \boldsymbol{A}$ a položíme $k = 1$.

1. Spočteme normu prvního sloupce matice $\overline{\boldsymbol{A}}^{(k-1)} \in \mathbb{R}^{m-k+1,n-k+1}$, který

   označíme $\overline{\boldsymbol{a}}^{(k-1)} = \left(\overline{a}_1^{(k-1)}, \ldots, \overline{a}_m^{(k-1)}\right)^T$.

   Pak vypočteme vektor $\boldsymbol{x}_k \in \mathbb{R}^{m-k+1}$, dle vztahu:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_k &= \overline{\boldsymbol{a}}^{(k-1)} + sgn\left(\overline{a_1}^{(k-1)}\right) \left\|\overline{\boldsymbol{a}}^{(k-1)}\right\| \boldsymbol{e}^{(k)} = \\ &= \left(\overline{a}_1^{(k-1)} + sgn\left(\overline{a}_1^{(k-1)}\right) \left\|\overline{\boldsymbol{a}}^{(k-1)}\right\|, \overline{a}_2^{(k-1)}, \ldots, \overline{a}_m^{(k-1)}\right)^T, \end{aligned} \tag{2.4}$$

   kde $\overline{a}_1^{(k-1)}$ je první prvek sloupcového vektoru $\overline{\boldsymbol{a}}^{(k-1)}$ a

   $\boldsymbol{e}^{(k)} = (1, 0, \ldots, 0)^T \in \mathbb{R}^{m-k+1}$.

   Poté dle vztahu (2.3) vypočítáme Householderovu matici

   $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_k) \in \mathbb{R}^{m-k+1,n-k+1}$ a sestavíme

$$\boldsymbol{T}_k = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_{k-1} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_{k-1}) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m,n}.$$

   Poznamenejme, že pro $k = 1$ je $\boldsymbol{I}_0$ prázdná matice, tedy $\boldsymbol{T}_1 = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_0)$.

2. Nyní položíme

$$\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{T}_k \overline{\boldsymbol{A}}^{(k-1)}, \tag{2.5}$$

tedy

$$\boldsymbol{A}^{(k)} = \left(\begin{array}{ccc|ccc} \times & \dots & \times & \times & \dots & \times \\ & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & & \times & \times & \dots & \times \\ \hline & & & a^{(k)}_{k+1,k+1} & \dots & a^{(k)}_{k+1,n} \\ & \boldsymbol{0} & & \vdots & & \vdots \\ & & & a^{(k)}_{m,k+1} & \dots & a^{(k)}_{m,n} \end{array} \right) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{C} & \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{0} & \overline{\boldsymbol{A}}^{(k)} \end{pmatrix},$$

kde $\times$ značí nenulový prvek, $\boldsymbol{0}$ symbolizuje nulovou matici, matice $\boldsymbol{C} \in \mathbb{R}^{k,k}$ má tvar horní trojúhelníkové matice, matice $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{m-k,k}$ je plná a podmatice $\overline{\boldsymbol{A}}^{(k)} \in \mathbb{R}^{m-k,n-k}$ je taktéž plná. Položíme $k = k + 1$ a jdeme do kroku 1.

Tyto dva kroky opakujeme dokud $k = n - 1$.

3. Po $n - 1$ krocích obdržíme horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{A}^{(n-1)}$ a položíme

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{A}^{(n-1)}. \tag{2.6}$$

4. V posledním kroku spočítáme matici $\boldsymbol{Q}^T$ takto:

$$\boldsymbol{Q}^T = \boldsymbol{T}_{n-1} \cdots \boldsymbol{T}_1 \tag{2.7}$$

a pomocí získané matice $\boldsymbol{Q}^T$ vytvoříme matici $\boldsymbol{Q}$.

Nyní na konkrétním příkladě ukážeme, jak touto metodou nalezneme QR rozklad matice $\boldsymbol{A}$.

Příklad 2.3 Pro danou matici

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix}$$

nalezneme s využitím Householderovy matice zrcadlení její QR rozklad.

Řešení:

Z předchozích příkladů víme, že je podmínka lineární nezávislosti sloupců matice $\boldsymbol{A}$ splněna, viz např. Příklad 1.2.

Pro $k = 1$ položíme $\overline{\boldsymbol{A}}^{(0)} = \boldsymbol{A}$, pak tedy

$$\overline{\boldsymbol{a}}^{(0)} = (2, 3, 1)^T, \left\|\overline{\boldsymbol{a}}^{(0)}\right\| = \sqrt{2^2 + 3^2 + 1^2} = \sqrt{14}.$$

S volbou znaménka +, díky kladné první složce vektoru $\overline{\boldsymbol{a}}^{(0)}$, vypočteme podle (2.4) vektor

$$\boldsymbol{x}_1 = (2, 3, 1)^T + \sqrt{14}(1, 0, 0)^T = (2 + \sqrt{14}, 3, 1)^T,$$

pro něj máme

$$\langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1 \rangle = (2 + \sqrt{14})^2 + 3^2 + 1^2 = 4(7 + \sqrt{14})$$

a součin tohoto vektoru s jeho transpozicí je

$$\boldsymbol{x}_1 {\boldsymbol{x}_1}^T = \begin{pmatrix} 18 + 4\sqrt{14} & 6 + 3\sqrt{14} & 2 + \sqrt{14} \\ 6 + 3\sqrt{14} & 9 & 3 \\ 2 + \sqrt{14} & 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Potom Householderovu matici, dle vztahu (2.3), vypočítáme takto:

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{7 - \sqrt{14}}{70} \begin{pmatrix} 18 + 4\sqrt{14} & 6 + 3\sqrt{14} & 2 + \sqrt{14} \\ 6 + 3\sqrt{14} & 9 & 3 \\ 2 + \sqrt{14} & 3 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{14}}{7} & -\frac{3\sqrt{14}}{14} & -\frac{\sqrt{14}}{14} \\ -\frac{3\sqrt{14}}{14} & \frac{1}{70}(7 + 9\sqrt{14}) & -\frac{3}{70}(7 - \sqrt{14}) \\ -\frac{\sqrt{14}}{14} & -\frac{3}{70}(7 - \sqrt{14}) & \frac{1}{70}(63 + \sqrt{14}) \end{pmatrix},$$

kde jsme rozšířením zlomku $\frac{1}{2(7+\sqrt{14})}$ získali zlomek $\frac{7-\sqrt{14}}{70}$, s kterým jsme pracovali.

Nyní podle (2.5) spočítáme matici $\boldsymbol{A}^{(1)}$, avšak pracovat budeme jen s její podmaticí $\overline{\boldsymbol{A}}^{(1)}$. Proto

$$\boldsymbol{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{14}}{7} & -\frac{3\sqrt{14}}{14} & -\frac{\sqrt{14}}{14} \\ -\frac{3\sqrt{14}}{14} & \frac{1}{70}(7+9\sqrt{14}) & -\frac{3}{70}(7-\sqrt{14}) \\ -\frac{\sqrt{14}}{14} & -\frac{3}{70}(7-\sqrt{14}) & \frac{1}{70}(63+\sqrt{14}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -\sqrt{14} & \frac{\sqrt{14}}{2} & -\frac{9\sqrt{14}}{7} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{28+6\sqrt{14}}{35} \\ 0 & -\frac{3}{2} & \frac{-84+2\sqrt{14}}{35} \end{pmatrix}$$

a

$$\overline{\boldsymbol{A}}^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{28+6\sqrt{14}}{35} \\ -\frac{3}{2} & \frac{-84+2\sqrt{14}}{35} \end{pmatrix}.$$

Pro $k = 2$ vypočítáme $\boldsymbol{x}_2$ analogicky jako v bodě 1. Tudíž

$$\overline{\boldsymbol{a}}^{(1)} = \left(\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T, \|\overline{\boldsymbol{a}}^{(1)}\| = \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(-\frac{3}{2}\right)^2} = \frac{\sqrt{10}}{2},$$

dle (2.4)

$$\boldsymbol{x}_2 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T + \frac{\sqrt{10}}{2}(1,0,0)^T = \left(\frac{1+\sqrt{10}}{2}, -\frac{3}{2}\right)^T,$$

skalární součin

$$\langle \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_2 \rangle = \left(\frac{1+\sqrt{10}}{2}\right)^2 + \left(-\frac{3}{2}\right)^2 = \frac{10+\sqrt{10}}{2}$$

a

$$\boldsymbol{x}_2\boldsymbol{x}_2^T = \begin{pmatrix} \frac{11+2\sqrt{10}}{4} & -\frac{3}{4}(1+\sqrt{10}) \\ -\frac{3}{4}(1+\sqrt{10}) & \frac{9}{4} \end{pmatrix}.$$

Dále spočítáme Householderovu matici vektoru $\boldsymbol{x}_2$,

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{4}{10+\sqrt{10}} \begin{pmatrix} \frac{11+2\sqrt{10}}{4} & -\frac{3}{4}(1+\sqrt{10}) \\ -\frac{3}{4}(1+\sqrt{10}) & \frac{9}{4} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \\ \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{10}} \end{pmatrix}.$$

Nyní jsme došli na konec cyklu, tj. provedli jsme výpočty až po $k = n - 1$. Nakonec, s využitím matic $\boldsymbol{T}_1$ a $\boldsymbol{T}_2$, vypočítáme matici $\boldsymbol{A}^{(2)}$ a sestavíme horní troúhelníkovou matici $\boldsymbol{R}$. Dle (2.5) je

$$\boldsymbol{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \\ 0 & \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{10}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sqrt{14} & \frac{\sqrt{14}}{2} & -\frac{9\sqrt{14}}{7} \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{28+6\sqrt{14}}{35} \\ 0 & -\frac{3}{2} & \frac{-84+2\sqrt{14}}{35} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -\sqrt{14} & \frac{\sqrt{14}}{2} & -\frac{9\sqrt{14}}{7} \\ 0 & -\frac{\sqrt{10}}{2} & -\frac{4\sqrt{10}}{5} \\ 0 & 0 & \frac{2\sqrt{140}}{35} \end{pmatrix}$$

a s využitím (2.6) vypadá matice $\boldsymbol{R}$ následovně

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} -\sqrt{14} & \frac{\sqrt{14}}{2} & -\frac{9\sqrt{14}}{7} \\ 0 & -\frac{\sqrt{10}}{2} & -\frac{4\sqrt{10}}{5} \\ 0 & 0 & \frac{2\sqrt{140}}{35} \end{pmatrix}.$$

Podle (2.7) spočteme matici $\boldsymbol{Q}^T$, z které posléze vytvoříme matici $\boldsymbol{Q}$. Proto

$$\boldsymbol{Q}^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \\ 0 & \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{10}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{14}}{7} & -\frac{3\sqrt{14}}{14} & -\frac{\sqrt{14}}{14} \\ -\frac{3\sqrt{14}}{14} & \frac{1}{70}(7+9\sqrt{14}) & -\frac{3}{70}(7-\sqrt{14}) \\ -\frac{\sqrt{14}}{14} & -\frac{3}{70}(7-\sqrt{14}) & \frac{1}{70}(63+\sqrt{14}) \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{14}}{7} & -\frac{3\sqrt{14}}{14} & -\frac{\sqrt{14}}{14} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \\ -\frac{\sqrt{140}}{14} & \frac{3\sqrt{140}}{70} & \frac{\sqrt{140}}{70} \end{pmatrix},$$

a tedy

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{14}}{7} & 0 & -\frac{\sqrt{140}}{14} \\ -\frac{3\sqrt{14}}{14} & -\frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3\sqrt{140}}{70} \\ -\frac{\sqrt{14}}{14} & \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{\sqrt{140}}{70} \end{pmatrix}.$$

Závěr: Vidíme, že horní trojúhelníková matice $\boldsymbol{R}$ má na hlavní diagonále kladná i záporná čísla a matice $\boldsymbol{Q}$ je ortonormální, je tedy zřejmé, že Householderova metoda dává matice, které odpovídají Větě 2.1. Při srovnání s předchozími příklady zjistíme, že hodnoty matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$ jsou až na znaménka totožné s maticemi nalezenými v Příkladu 2.1.

Pro kontrolu, zda jsou matice $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$ nalezeny správně, dokážeme formuli $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$. Tudíž

$$\boldsymbol{QR} = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{14}}{7} & 0 & -\frac{\sqrt{140}}{14} \\ -\frac{3\sqrt{14}}{14} & -\frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3\sqrt{140}}{70} \\ -\frac{\sqrt{14}}{14} & \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{\sqrt{140}}{70} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sqrt{14} & \frac{\sqrt{14}}{2} & -\frac{9\sqrt{14}}{7} \\ 0 & -\frac{\sqrt{10}}{2} & -\frac{4\sqrt{10}}{5} \\ 0 & 0 & \frac{2\sqrt{140}}{35} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}.$$

2.2.1. QR rozklad pomocí Householderovy matice zrcadlení v Matlabu

Nyní, s využitím Householderovy matice zrcadlení, sestavíme v matematickém programu Matlab vlastní kód pro nalezení matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$. Námi vytvořená funkce vypadá takto:

```
function [Q, R] = qr4_rozklad(A)
[m, n] = size(A);
Q = eye(m);
R = A;
hodnost = rank(A);
if m < n
    error('Není splněna podmínka: m >= n.')
end
if hodnost ~= n
    error('Sloupcové vektory nejsou lineárně nezávislé.')
else
    for k = 1 : n
```

$a = R(k : m, k);$

$x = a + sign(a(1)) * norm(a) * eye(m - k + 1, 1);$

$if\ norm(x)\hat{}2 > 0$

$H = eye(m);$

$H(k : m, k : m) = H(k : m, k : m) - 2 * x * x'/norm(x)\hat{}2;$

$R = H * R;$

$Q = Q * H;$

end

end

end

Jako ve všech matlabovských funkcích jsme nejprve zkontrolovali podmínku $m \geq n$ a lineární nezávislost sloupců zadané matice $\boldsymbol{A}$. Na rozdíl od postupu uvedeného při řešení příkladů, kde jsme využívali matice $\boldsymbol{T}_k$, jsme v algoritmu tuto matici nezaváděli a místo toho jsme na začátku zadefinovali matici $\boldsymbol{Q}$ jako jednotkovou.

2.3. QR rozklad pomocí Givensovy rotace

Poslední metodou pro nalezení matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$, kterou v této bakalářské práci vysvětlíme, je Givensova rotace. Nejprve zadefinujeme Givensovu rotační matici $\boldsymbol{G}$, poté uvedeme princip Givensovy metody a nakonec vše ukážeme na konkrétním příkladě. K pochopení této problematiky jsme využili literatury [1] a [3].

Definice 2.3 (Givensova rotační matice)
Matice $\boldsymbol{G}$=(g_{ij}), která se od jednotkové matice $\boldsymbol{I}$ liší v nejvýše čtyřech prvcích, které jsou tvaru

$$g_{ii} = g_{jj} = cos\theta \quad a \quad g_{ij} = -g_{ji} = sin\theta,$$

pro nějaký úhel θ a nějaké $i \neq j$, se nazývá Givensova rotační matice.

Givensovu rotační matici lze tedy zapsat takto:

$$\boldsymbol{G} = \begin{pmatrix} 1 \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots 0 \\ \vdots \ \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 \cdots & cos\theta & \cdots & sin\theta & \cdots 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 \cdots & -sin\theta & \cdots & cos\theta & \cdots 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \vdots \\ 0 \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots 1 \end{pmatrix}. \tag{2.8}$$

Z definice plyne, že $\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^T = \boldsymbol{I}$, tj. každá matice $\boldsymbol{G}$ je ortonormální. Lze také ukázat, že součin matic $\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}$ se od matice $\boldsymbol{A}$ odlišuje pouze v i-tém a j-tém sloupci a obdobně matice $\boldsymbol{G}\boldsymbol{A}$ a $\boldsymbol{A}$ jsou rozdílné v i-tém a j-tém řádku. Úhel θ, zmíněný v právě uvedené definici, volíme tak, aby pro každé $i \neq j$ byl prvek matice $(\boldsymbol{G}\boldsymbol{A})_{ij}$ nulový.

Pomocí Givensových rotačních matic je možné nalézt QR rozklad matice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$, která má lineárně nezávislé sloupce. Při hledání ortonormální matice $\boldsymbol{Q}$ a horní trojúhelníkové matice $\boldsymbol{R}$ se budeme držet následujícího postupu: Označme $\boldsymbol{A}^{(0)} = \boldsymbol{A}$ a pro $k = 1$ vybereme Givensovu rotační matici.

1. Pro $i = 1$ je nejprve potřeba $j = i+1$ sestavit podle vztahu (2.8) Givensovu matici $\boldsymbol{G}_k$ s prvky $g_{ii}^{(k)} = g_{jj}^{(k)} = cos\theta$ a $g_{ij}^{(k)} = -g_{ji}^{(k)} = sin\theta$, kde za pomoci matice $\boldsymbol{A}^{(k-1)} = (a_{ij}^{(k-1)})_{i,j=1}^{n}$ vypočítáme
$$cos\theta = \frac{a_{ii}{}^{(k-1)}}{\sqrt{(a_{ii}{}^{(k-1)})^2 + (a_{ji}{}^{(k-1)})^2}} \quad a \quad sin\theta = \frac{a_{ji}{}^{(k-1)}}{\sqrt{(a_{ii}{}^{(k-1)})^2 + (a_{ji}{}^{(k-1)})^2}}. \tag{2.9}$$
   Poté spočítáme
$$\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{G}_k \boldsymbol{A}^{(k-1)}, \tag{2.10}$$
   položíme $k = k+1$, $j = j+1$ a sestavíme další Givensovu matici. Index j zvyšujeme až po $j = n$.
   Na konci i-tého kroku budeme mít vynulovaný sloupec pod i-tým diagonálním prvkem matice $\boldsymbol{A}^{(k)}$.
   Dále položme $i = i+1$ a tento krok zopakujeme až po $i = n-1$.
   Poznamenejme, že celkem dostaneme $\boldsymbol{G}_1, \boldsymbol{G}_2, \ldots, \boldsymbol{G}_{\frac{n(n-1)}{2}}$ Givensových rotačních matic.

2. Na závěr obdržíme horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{A}^{\left(\frac{n(n-1)}{2}\right)}$, tedy

$$\boldsymbol{A}^{\left(\frac{n(n-1)}{2}\right)} = \boldsymbol{G}_{\frac{n(n-1)}{2}} \cdots \boldsymbol{G}_2 \boldsymbol{G}_1 \boldsymbol{A}^{(0)}$$

   a položíme

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{A}^{\left(\frac{n(n-1)}{2}\right)}.$$

3. Zbývá vypočítat matici $\boldsymbol{Q}$, která je dána vztahem

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{G}_1^T \boldsymbol{G}_2^T \cdots \boldsymbol{G}_{\frac{n(n-1)}{2}}^T. \tag{2.11}$$

   Ortonormalitu matice $\boldsymbol{Q}$ lze s využitím ortonormality Givensových matic ověřit následovně:

$$\boldsymbol{Q}^T \boldsymbol{Q} = \left(\boldsymbol{G}_1^T \boldsymbol{G}_2^T \cdots \boldsymbol{G}_{\frac{n(n-1)}{2}}^T\right)^T \left(\boldsymbol{G}_1^T \boldsymbol{G}_2^T \cdots \boldsymbol{G}_{\frac{n(n-1)}{2}}^T\right) = \boldsymbol{I}.$$

Snadno také dokážeme platnost vztahu $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$, neboť

$$\boldsymbol{QR} = \left(\boldsymbol{G}_1^T \boldsymbol{G}_2^T \cdots \boldsymbol{G}_{\frac{n(n-1)}{2}}^T\right) \left(\boldsymbol{G}_{\frac{n(n-1)}{2}} \cdots \boldsymbol{G}_2 \boldsymbol{G}_1 \boldsymbol{A}\right) = \boldsymbol{A}.$$

Nyní tento postup předvedeme na konkrétním příkladě.

Příklad 2.4 Pro danou matici

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix}$$

vypočítáme s využitím Givensovy rotace její QR rozklad.

Řešení:

Lineární nezávislost sloupcových vektorů matice $\boldsymbol{A}$ je ověřena v Příkladě 2.1, proto ji nebudeme znovu kontrolovat.

Položíme $\boldsymbol{A}^{(0)} = \boldsymbol{A}$. Pro $k = 1$, $i = 1$ a $j = 2$ vypočítáme podle (2.9)

$$cos\theta = \frac{a_{11}^{(0)}}{\sqrt{(a_{11}^{(0)})^2 + (a_{21}^{(0)})^2}} = \frac{2}{\sqrt{2^2+3^2}} = \frac{2}{\sqrt{13}},$$

$$sin\theta = \frac{a_{21}^{(0)}}{\sqrt{(a_{11}^{(0)})^2 + (a_{21}^{(0)})^2}} = \frac{3}{\sqrt{2^2+3^2}} = \frac{3}{\sqrt{13}}.$$

Pomocí právě získaných hodnot sestavíme podle (2.8) rotační matici $\boldsymbol{G}_1$, tudíž

$$\boldsymbol{G}_1 = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{13}} & \frac{3}{\sqrt{13}} & 0 \\ -\frac{3}{\sqrt{13}} & \frac{2}{\sqrt{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dle (2.10) vypočítáme

$$\boldsymbol{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{13}} & \frac{3}{\sqrt{13}} & 0 \\ -\frac{3}{\sqrt{13}} & \frac{2}{\sqrt{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{13} & -\frac{5}{\sqrt{13}} & \frac{19}{\sqrt{13}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{13}} & \frac{4}{\sqrt{13}} \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix}.$$

Dále pro $k = 2$, $i = 1$ a $j = 3$ a

$$cos\theta = \frac{a_{11}^{(1)}}{\sqrt{(a_{11}^{(1)})^2 + (a_{31}^{(1)})^2}} = \frac{\sqrt{13}}{\sqrt{\sqrt{13}^2 + 1^2}} = \frac{\sqrt{13}}{\sqrt{14}},$$

$$sin\theta = \frac{a_{31}^{(1)}}{\sqrt{(a_{11}^{(1)})^2 + (a_{31}^{(1)})^2}} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{13}^2 + 1^2}} = \frac{1}{\sqrt{14}},$$

a proto

$$\boldsymbol{G}_2 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{13}}{\sqrt{14}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{14}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{14}} & 0 & \frac{\sqrt{13}}{\sqrt{14}} \end{pmatrix}.$$

Opět s využitím (2.10)

$$\boldsymbol{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{13}}{\sqrt{14}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{14}} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{14}} & 0 & \frac{\sqrt{13}}{\sqrt{14}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{13} & -\frac{5}{\sqrt{13}} & \frac{19}{\sqrt{13}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{13}} & \frac{4}{\sqrt{13}} \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{14} & -\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{2}} & \frac{9\sqrt{2}}{\sqrt{7}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{13}} & \frac{4}{\sqrt{13}} \\ 0 & -\frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{26}} & -\frac{16\sqrt{2}}{\sqrt{91}} \end{pmatrix}.$$

Také pro $k = 3$, $i = 2$, $j = 3$ s využitím (2.9) spočteme

$$cos\theta = \frac{a_{22}^{(2)}}{\sqrt{(a_{22}^{(2)})^2 + (a_{32}^{(2)})^2}} = \frac{\frac{1}{\sqrt{13}}}{\sqrt{(\frac{1}{\sqrt{13}})^2 + (-\frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{26}})^2}} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{65}},$$

$$sin\theta = \frac{a_{32}^{(2)}}{\sqrt{(a_{22}^{(2)})^2 + (a_{32}^{(2)})^2}} = \frac{-\frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{26}}}{\sqrt{(\frac{1}{\sqrt{13}})^2 + (-\frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{26}})^2}} = -\frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{65}}$$

a potom

$$\boldsymbol{G}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{65}} & -\frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{65}} \\ 0 & \frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{65}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{65}} \end{pmatrix}.$$

Nakonec vypočítáme poslední matici $\boldsymbol{A}^{(n)}=\boldsymbol{A}^{(3)}$, která odpovídá hledané matici $\mathbf{R}$, proto

$$\boldsymbol{A}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{65}} & -\frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{65}} \\ 0 & \frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{65}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{65}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{14} & -\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{2}} & \frac{9\sqrt{2}}{\sqrt{7}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{13}} & \frac{4}{\sqrt{13}} \\ 0 & -\frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{26}} & -\frac{16\sqrt{2}}{\sqrt{91}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{14} & -\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{2}} & \frac{9\sqrt{2}}{\sqrt{7}} \\ 0 & \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{2}} & \frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{5}} \\ 0 & 0 & \frac{4}{\sqrt{35}} \end{pmatrix} = \boldsymbol{R}.$$

Nyní za pomoci zjištěných matic $\boldsymbol{G}_1$, $\boldsymbol{G}_2$, $\boldsymbol{G}_3$ a jejich transpozice vypočítáme podle (2.11) ortonormální matici $\boldsymbol{Q}$.

Tudíž

$$\boldsymbol{G}_1{}^T \boldsymbol{G}_2{}^T \boldsymbol{G}_3{}^T = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{13}} & -\frac{3}{\sqrt{13}} & 0 \\ \frac{3}{\sqrt{13}} & \frac{2}{\sqrt{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{13}}{\sqrt{14}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{14}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{14}} & 0 & \frac{\sqrt{13}}{\sqrt{14}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{65}} & \frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{65}} \\ 0 & -\frac{3\sqrt{7}}{\sqrt{65}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{65}} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{7}} & 0 & -\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{7}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{35}} \\ \frac{1}{\sqrt{14}} & -\frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{35}} \end{pmatrix} = \boldsymbol{Q}.$$

Nakonec ověříme správnost nalezených matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$, a to tak, že ukážeme platnost výrazu $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$.

Tedy

$$\boldsymbol{QR} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{7}} & 0 & -\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{7}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{35}} \\ \frac{1}{\sqrt{14}} & -\frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{35}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{14} & -\frac{\sqrt{7}}{\sqrt{2}} & \frac{9\sqrt{2}}{\sqrt{7}} \\ 0 & \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{2}} & \frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{5}} \\ 0 & 0 & \frac{4}{\sqrt{35}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}.$$

Závěr: Na rozdíl od Příkladu 2.2 je stejně jako v Příkladě 2.1 a 2.3 vzniklá matice $\boldsymbol{Q}$ tvořená ortonormálními vektory, přesto však nejsou nalezené ortonormální

matice ve všech případech totožné. Po elementárních úpravách zjistíme, že matice z Příkladu 2.1 a 2.4 jsou shodné, kdežto matice v Příkladu 2.3 má opačná znaménka. Taktéž matice $\boldsymbol{R}$ je v Příkladech 2.1, 2.4 stejná a v Příkladu 2.3 se liší o znaménka.
Z výše uvedeného je zřejmé, že QR rozklad pomocí Givensovy rotace vyhovuje Větě 2.2.

Poznámka 2.1
Zdůrazněme, že tato metoda je použitelná pouze pro čtvercové matice.

Poznámka 2.2
Poznamenejme, že Givensova metoda se od Householderovy metody liší v množství vynulovaných prvků horní trojúhelníkové matice v daném kroku. Na rozdíl od Givensovy metody, která nuluje prvky pod hlavní diagonálou po jednom, Householderova metoda vynuluje všechny prvky v daném sloupcovém vektoru najednou, což jsme dokázali v předchozích dvou příkladech.

2.3.1. QR rozklad pomocí Givensovy rotace v Matlabu

Opět vytvoříme vlastní zdrojový kód pro nalezení matic $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$, který však tentokrát bude postupovat podle Givensovy rotace. Tento kód může vypadat takto:

$function\ [Q, R] = qr5\_rozklad(A)$

$[m, n] = size(A);$

$Q = eye(n);$

$R = eye(n);$

$hodnost = rank(A);$

$if\ m \sim= n$

error('Matice A není čtvercová.')

end

$if\ hodnost\ \sim= n$

```
        error('Sloupcové vektory nejsou lineárně nezávislé.')
    else
        for i = 1 : n − 1
            for j = i + 1 : n
                a = A(:, i);
                cos = a(i)/(a(i)^2 + a(j)^2)^(1/2);
                sin = a(j)/(a(i)^2 + a(j)^2)^(1/2);
                G = eye(n);
                G([i, j], [i, j]) = [cos, sin; −sin, cos];
                A = G ∗ A;
                Q = Q ∗ G';
            end
        end
        R = A;
    end
```

Ve zmíněném algoritmu jsme nejprve ověřili, zda je matice $\boldsymbol{A}$ čtvercová a zda jsou její sloupcové vektory lineárně nezávislé. Poté jsme sestavili *for* cyklus, pomocí něhož nalezneme matice $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$. Poznamenejme, že pro usnadnění přepočítáváme matici $\boldsymbol{Q}$ na konci každého j-tého kroku, místo toho, abychom ji nalezli na konci celého cyklu po sestavení všech Givensových matic $\boldsymbol{G}$.

3. Použití QR rozkladu

V této kapitole ukážeme, jak QR rozklad zadané matice $\boldsymbol{A}$ využijeme při řešení soustavy lineárních rovnic a při výpočtu vlastních čísel.

3.1. QR rozklad při řešení soustavy lineárních rovnic

Nejprve ukážeme, jak využít QR rozklad matice $\boldsymbol{A}$ při řešení soustavy lineárních rovnic. K nastudování této problematiky jsme využili literatury [4] a [8].

Nechť je dána soustava lineárních rovnic

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \tag{3.1}$$

kde $\boldsymbol{b} = (b_1, \ldots, b_n)^T$, $\boldsymbol{A} = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{n,n}$ je regulární a QR rozklad matice $\boldsymbol{A}$, tj.

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}.$$

Tohoto vztahu využijeme při hledání jediného řešení soustavy (3.1) takto

$$\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}.$$

Po vynásobení maticí $\boldsymbol{Q}^T$ zleva obdržíme rovnici ve tvaru

$$\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b}. \tag{3.2}$$

Další úprava právě uvedené rovnice je možná dvěma způsoby:

A) Je-li $\boldsymbol{Q}$ ortonormální matice, pak $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}$ a z (3.2) je

$$\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b}. \tag{3.3}$$

B) V případě ortogonální matice $\boldsymbol{Q}$ obdržíme

$$\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b}, \tag{3.4}$$

neboť $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{D}$, kde $\boldsymbol{D} = diag\ (d_1,\ \ldots,\ d_n)$ a prvky d_i jsou kladné.

Nakonec využijeme toho, že $\boldsymbol{R}$ je horní trojúhelníková matice a zpětným chodem, který je daný vztahem

$$x_i = \frac{c_i - \sum_{k=i+1}^{n} r_{ik}x_k}{r_{ii}},$$

kde $i = n, \dots, 1$, $r_{ii} \neq 0$, $\boldsymbol{c}{=}\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b}$ v (3.3) nebo $\boldsymbol{c}{=}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b}$ v (3.4), můžeme velice efektivně vypočítat řešení zadané soustavy.

Poznamenejme, že díky regularitě a čtvercovému tvaru matice $\boldsymbol{A}$ víme, že existuje jediné řešení daného systému.

Nyní využití QR rozkladu při řešení systému lineárních rovnic ukážeme na konkrétním příkladě.

Příklad 3.1 Pro danou soustavu lineárních rovnic

$$\begin{aligned} 2x_1 - x_2 + 2x_3 &= 3 \\ 3x_1 - x_2 + 5x_3 &= 7 \\ x_1 - 2x_2 - x_3 &= -2 \end{aligned}$$

nalezneme s využitím QR rozkladu řešení tohoto systému.

Řešení:

Této soustavě odpovídá

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix} \quad a \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 7 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

Prvně vyřešíme zadaný systém podle (3.3).

1. Soustavu rovnic vyřešíme za pomoci matic $\boldsymbol{Q}$, $\boldsymbol{R}$ z Příkladu 2.1.

   Připomeňme

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{14}} & 0 & -\frac{5}{\sqrt{35}} \\ \frac{3}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{35}} \\ \frac{1}{\sqrt{14}} & -\frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{35}} \end{pmatrix}, \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \sqrt{14} & -\frac{7}{\sqrt{14}} & \frac{18}{\sqrt{14}} \\ 0 & \frac{\sqrt{10}}{2} & \frac{8}{\sqrt{10}} \\ 0 & 0 & \frac{4}{\sqrt{35}} \end{pmatrix}.$$

   Řešíme soustavu (3.3), kde

$$\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{14}} & \frac{3}{\sqrt{14}} & \frac{1}{\sqrt{14}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{10}} & -\frac{3}{\sqrt{10}} \\ -\frac{5}{\sqrt{35}} & \frac{3}{\sqrt{35}} & \frac{1}{\sqrt{35}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 7 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{25}{\sqrt{14}} \\ \frac{13}{\sqrt{10}} \\ \frac{4}{\sqrt{35}} \end{pmatrix},$$

a potom

$$\begin{pmatrix} \sqrt{14} & -\frac{7}{\sqrt{14}} & \frac{18}{\sqrt{14}} \\ 0 & \frac{\sqrt{10}}{2} & \frac{8}{\sqrt{10}} \\ 0 & 0 & \frac{4}{\sqrt{35}} \end{pmatrix} \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \frac{25}{\sqrt{14}} \\ \frac{13}{\sqrt{10}} \\ \frac{4}{\sqrt{35}} \end{pmatrix}.$$

Odtud zpětným chodem dostáváme

$$\boldsymbol{x} = (1, 1, 1)^T.$$

Stejným způsobem bychom postupovali u Příkladů 2.3 a 2.4 a nakonec bychom obdrželi totožný vektor $\boldsymbol{x}$.

Nyní vyřešíme zadanou soustavu rovnic dle (3.4).

2. Systém rovnic vypočítáme za pomoci matic $\boldsymbol{Q}$, $\boldsymbol{R}$ a prvků d_1, d_2 a d_3, které tvoří hlavní diagonálu matice $\boldsymbol{D}$ převzaté z Příkladu 2.2. Připomeňme

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -\frac{4}{7} \\ 3 & \frac{1}{2} & \frac{12}{35} \\ 1 & -\frac{3}{2} & \frac{4}{35} \end{pmatrix}, \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{9}{7} \\ 0 & 1 & \frac{8}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{D} = \begin{pmatrix} 14 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{16}{35} \end{pmatrix}.$$

Poté řešíme soustavu (3.4), tedy

$$\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} \frac{1}{14} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{5} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{35}{16} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{3}{2} \\ -\frac{4}{7} & \frac{12}{35} & \frac{4}{35} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 7 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{25}{14} \\ \frac{13}{5} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Proto

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{9}{7} \\ 0 & 1 & \frac{8}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} \frac{25}{14} \\ \frac{13}{5} \\ 1 \end{pmatrix}$$

a odtud opět zpětným chodem dostáváme

$$\boldsymbol{x} = (1, 1, 1)^T.$$

Pro kontrolu správnosti vypočítaného vektoru $\boldsymbol{x}$ dosadíme nalezené hodnoty do zadaných rovnic a zjistíme, že získaný vektor $\boldsymbol{x}$ =(1,1,1)^T je správný.

3.1.1. QR rozklad při řešení soustavy lineárních rovnic v Matlabu

Nyní vytvoříme s využitím matematického softwaru Matlab krátké zdrojové kódy pro řešení soustavy lineárních rovnic, které je možné připojit k již vytvořeným matlabovským funkcím. Předpokládáme, že soustava lineárních rovnic je do programu zadána maticově.

Prvně uvedeme kód, který použijeme v případě, že získaná matice $\boldsymbol{Q}$ je ortonormální, tj. využijeme funkce $qr1\_rozklad$, $qr2\_rozklad$, $qr4\_rozklad$ a $qr5\_rozklad$. Uvedeme kód využívající matlabovskou funkci $qr1\_rozklad$, avšak lze ji nahradit kteroukoliv z již zmíněných funkcí, tedy

$function\ [x] = qr6\_soustava(A, b)$

$[Q, R] = qr1\_rozklad(A);$

$if\ (norm(Q' * Q - eye(m)) < 1e - 12)$

$\quad c = Q' * b;$

$\quad x = zeros(n, 1);$

$\quad for\ i = n : -1 : 1$

$\qquad x(i) = (c(i) - R(i, (i + 1) : n) * x((i + 1) : n))/R(i, i);$

$\quad end$

$else$

$\quad$ error('Matice Q není ortonormální.')

end

V tomto kódu jsme ortonormální podmínku $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}$ nezapsali přímo v tomto tvaru, neboť musíme zohlednit numerické chyby. Proto jsme využili normu a připustili určitou možnou odchylku, tj. získaná matice $\boldsymbol{I}$ nemusí být s ohledem na desetinná místa striktně jednotková. Ze stejného důvodu jsme rovnici (3.3) neřešili pomocí inverze nebo podílu, ale vytvořili jsme jednoduchý cyklus.

Druhou matlabovskou funkci, kterou právě uvedeme, využíváme pro ortogonální matici $\boldsymbol{Q}$, tj. při získání hledané matice pomocí kódu $qr3\_rozklad$.

Tudíž

$$function\ [x] = qr7\_soustava(A, b)$$

$$[Q, R, D] = qr3\_rozklad(A);$$

$$if\ (norm(Q' * Q - D) < 1e - 12)$$

$$c = Q' * b;$$

$$G = D * R;$$

$$x = zeros(n, 1);$$

$$for\ i = n : -1 : 1$$

$$x(i) = (c(i) - G(i, (i + 1) : n) * x((i + 1) : n))/G(i, i);$$

$$end$$

$$else$$

error('Matice Q není ortogonální.')

$$end$$

V tomto zdrojovém kódu, jak už jsme dříve avizovali, jsme využili vytvořenou diagonální matici $\boldsymbol{D}$. Stejně jako v předchozím kódu jsme podmínku $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q}$=$\boldsymbol{D}$ zapsali pomocí normy a určité tolerance a opět jsme vektor x z rovnice (3.4) obdrželi pomocí *for* cyklu, nikoliv díky inverzi nebo podílu.

3.2. QR rozklad při výpočtu vlastních čísel

Nyní vysvětlíme, jak QR rozklad matice $\boldsymbol{A}$ použijeme při výpočtu vlastních čísel. Pro pochopení této problematiky jsme využili literaturu [2] a [3].

Nechť je dána symetrická matice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n,n}$. Naším úkolem je nalézt vlastní čísla matice $\boldsymbol{A}$. Označme $\boldsymbol{A}^{(0)}$=$\boldsymbol{A}$ a položme $k = 1$.

1. Nejprve, s využitím některé z metod pro nalezení QR rozkladu, kde $\boldsymbol{Q}^{(k-1)} \in \mathbb{R}^{n,n}$ je ortonormální matice a $\boldsymbol{R}^{(k-1)} \in \mathbb{R}^{n,n}$ má horní trojúhelníkový tvar, nalezneme QR rozklad matice $\boldsymbol{A}^{(k-1)}$, tj.

$$\boldsymbol{A}^{(k-1)} = \boldsymbol{Q}^{(k-1)}\boldsymbol{R}^{(k-1)}.$$

2. Spočteme matici $\boldsymbol{A}^{(k)}$ takto:

$$\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{R}^{(k-1)}\boldsymbol{Q}^{(k-1)} \tag{3.5}$$

Poté položíme $k = k{+}1$ a vracíme se do kroku 1.

Tyto dva kroky opakujeme do té doby, dokud matice $\boldsymbol{A}^{(k)}$, získaná vztahem (3.5), nemá podobu diagonální matice $\boldsymbol{D} = diag(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$, kde $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ jsou vlastní čísla původní matice $\boldsymbol{A}$.

Poznamenejme, že z důvodu velkého počtu iterací tento postup neukážeme na ručně vypočítaném příkladě. Po sestavení matlabovského kódu však s jeho využitím vygenerujeme vlastní čísla z konkrétní matice.

3.2.1. QR rozklad při výpočtu vlastních čísel v Matlabu

V této podkapitole uvedeme v matematickém programu Matlab námi vytvořený zdrojový kód pro výpočet vastních čísel matice $\boldsymbol{A}$, využívající matlabovskou funkci *qr1_rozklad*, *qr2_rozklad*, *qr4_rozklad* nebo *qr5_rozklad*. Připomeňme, že v tomto kódu nelze využít *qr3_rozklad*, neboť získaná matice $\boldsymbol{Q}$ není ortonormální. Jestliže v kódu využijeme funkci *qr1_rozklad*, kterou však lze nahradit kteroukoliv z již zmíněných funkcí, bude zdrojový kód vypadat takto:

```
function [A] = qr8_vlastc(A)
[n, n] = size(A);
if norm(A − A')
    error('Matice A není symetrická.')
end
nondiagonal = true;
iter = 0;
while nondiagonal
    [Q, R] = qr1_rozklad(A);
    A = R ∗ Q;
    nondiagonal = false;
```

```
for i = 1 : n
    for j = 1 : n
        if (i > j) && (abs(A(i, j)) > 1e − 5)
            nondiagonal = true;
        end
    end
end
iter = iter + 1;
end
```

Celý zdrojový kód funguje tak, že nejprve ověří symetričnost matice $\boldsymbol{A}$, poté nalezne její QR rozklad, matici $\boldsymbol{A}$ přepočítá vynásobením $\boldsymbol{R}^*\boldsymbol{Q}$ a nakonec zkontroluje, zda je nově vzniklá matice nediagonální. Kvůli přesnosti výpočtů a malým změnám hodnot prvků jsme v kódu použili omezení *1e-5*, avšak toto omezení je možné měnit podle našich požadavků na přesnost výpočtu. V kódu jsme také použili příkaz *iter*, jehož vypsáním zjistíme počet iterací, po kterých obdržíme vlastní čísla původní matice $\boldsymbol{A}$.

Vzhledem k tomu, že jsme v kapitole 3.2. QR rozklad při výpočtu vlastních čísel neuvedli příklad, aplikujeme právě uvedený kód na konkrétním příkladě.

Příklad 3.2 Pro danou matici

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 & 5 \\ -1 & 3 & 5 & -1 \\ 2 & 5 & -3 & 2 \\ 5 & -1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

nalezneme s využitím QR rozkladu její vlastní čísla.

Řešení:

Po 124 iteracích bychom díky uvedenému zdrojovému kódu obdrželi diagonální matici ve tvaru

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 7.3007 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -6.5973 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5.8140 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3.5175 \end{pmatrix}.$$

Tedy vlastní čísla matice $\boldsymbol{A}$ jsou $\lambda_1 = 7.3007$, $\lambda_2 = -6.5973$, $\lambda_3 = 5.8140$ a $\lambda_4 = -3.5175$. Poznamenejme, že hodnoty jsme zaokrouhlili na čtyři desetinná čísla.

4. QR rozklad v Matlabu

Matematický software Matlab nabízí, kromě možnosti vytvořit vlastní zdrojový kód, funkci pro nalezení QR rozkladu matice $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m,n}, m \geq n$. Příkaz vypadá takto: $[\boldsymbol{Q},\boldsymbol{R}] = \mathrm{qr}(\boldsymbol{A})$, kde $\boldsymbol{A}$ je maticí čtvercovou.
Kdybychom jako vstup zvolili například matici

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix},$$

tak výstupem by byly matice $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$ ve tvaru:

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{\sqrt{14}} & 0 & -\frac{5}{\sqrt{35}} \\ -\frac{3}{\sqrt{14}} & -\frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{35}} \\ -\frac{1}{\sqrt{14}} & \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{35}} \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} -\sqrt{14} & \frac{7}{\sqrt{14}} & -\frac{18}{\sqrt{14}} \\ 0 & -\frac{\sqrt{10}}{2} & -\frac{8}{\sqrt{10}} \\ 0 & 0 & \frac{4}{\sqrt{35}} \end{pmatrix}.$$

Pomocí tohoto kódu dostaneme ortonormální matici $\boldsymbol{Q}$ a horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{R}$. Vidíme, že na hlavní diagonále matice $\boldsymbol{R}$ jsou záporná čísla, proto je jasné, že tento příkaz odpovídá pouze Větě 2.1. Pokud bychom matice získané pomocí Matlabu porovnali s vypočítanými maticemi odpovídajícími Větě 2.1, tak zjistíme, že jsou naprosto totožné s prvky matic z Příkladu 2.3, je tedy zřejmé, že tento kód využívá Householderovy matice zrcadlení.

Existují zde také různé modifikace tohoto kódu, například:
a)$[\boldsymbol{Q},\boldsymbol{R}] = \mathrm{qr}(\boldsymbol{A},0)$, který využíváme v případě, kdy $m > n$, tedy pro obdélníkové matice. Pro $m = n$ se příkaz chová stejně jako $[\boldsymbol{Q},\boldsymbol{R}] = \mathrm{qr}(\boldsymbol{A})$.
Tedy pro matici

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \\ 3 & 5 & -3 \end{pmatrix}$$

získáváme:

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} -0.4170 & -0.3192 & -0.0425 \\ -0.6255 & -0.3847 & 0.5293 \\ -0.2085 & -0.4420 & -0.8159 \\ -0.6255 & 0.7448 & -0.2290 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} -4.7958 & -1.6681 & -1.8766 \\ 0 & 5.3120 & -4.3544 \\ 0 & 0 & 4.0642 \end{pmatrix}.$$

Kdybychom pro matici $\boldsymbol{A}$ použili zdrojový kód využívající Householderovu metodu, tak zjistíme, že výsledné matice $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$ se liší jen v rozměrech, neboť tento příkaz vypustí lineárně závislé sloupce a řádky.

b)$[\boldsymbol{Q},\boldsymbol{R},\boldsymbol{P}] = \mathrm{qr}(\boldsymbol{A})$ vytváří ortonormální matici $\boldsymbol{Q}$, horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{R}$, permutační matici $\boldsymbol{P}$, a to tak, že $\boldsymbol{AP}$=$\boldsymbol{QR}$. Matice $\boldsymbol{P}$ přeskláda matici $\boldsymbol{A}$ tak, aby absolutní hodnota diagonálních prvků matice $\boldsymbol{R}$ klesala.

Proto v případě matice

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \end{pmatrix}$$

by výstup vypadal následovně:

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} -0.3651 & 0.2933 & -0.8835 \\ -0.9129 & 0.0733 & 0.4016 \\ 0.1826 & 0.9532 & 0.2410 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} -5.4772 & 0.9129 & -3.2863 \\ 0 & -2.2730 & 1.7598 \\ 0 & 0 & -0.3213 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Tento kód nalezne matice $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$ se zcela odlišnými prvky než jsou uvedeny ve výsledných maticích původní verze tohoto kódu. A to díky permutační matici $\boldsymbol{P}$, která po vynásobení s maticí $\boldsymbol{A}$ přehází sloupcové vektory matice $\boldsymbol{A}$, tedy vznikne nová matice. Kdybychom pro nově vzniklou matici použili příkaz [$\boldsymbol{Q}$,$\boldsymbol{R}$]=qr($\boldsymbol{A}$), byly by výsledné matice $\boldsymbol{Q}$, $\boldsymbol{R}$ takto vytvořené totožné s maticemi získanými pomocí modifikovaného kódu [$\boldsymbol{Q}$,$\boldsymbol{R}$,$\boldsymbol{P}$]=qr($\boldsymbol{A}$) původní matice $\boldsymbol{A}$. Obdobně, pokud bychom pro nově vzniklou matici použili námi vytvořenou matlabovskou funkci využívající Householderovu metodu, pak nalezený QR rozklad bude stejný jako QR rozklad obdržený tímto příkazem. Stejně jako v původním příkazu je matice $\boldsymbol{Q}$ ortonormální a matice $\boldsymbol{R}$ nemusí mít na hlavní diagonále kladné prvky.

c)[$\boldsymbol{Q}$,$\boldsymbol{R}$,$\boldsymbol{P}$] = qr($\boldsymbol{A}$,0) vyprodukuje QR rozklad, který vypustí lineárně závislé sloupce a řádky, a to tak, že platí $\boldsymbol{A}$(:,$\boldsymbol{P}$)=$\boldsymbol{Q}$ *$\boldsymbol{R}$, kde $\boldsymbol{P}$ je permutační vektor. Tedy v případě matice

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 3 & -1 & 5 \\ 1 & -2 & -1 \\ 3 & 5 & -3 \end{pmatrix}$$

by výstup vypadal takto:

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} -0.3203 & -0.3363 & -0.2488 \\ -0.8006 & -0.4036 & 0.1244 \\ 0.1601 & -0.2691 & -0.8980 \\ 0.4804 & -0.8072 & 0.3408 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} -6.2450 & -1.4412 & 3.2026 \\ 0 & -4.5742 & -2.7580 \\ 0 & 0 & 3.6245 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{P} = (3, 1, 2).$$

Jak již bylo zmíněno, namísto permutační matice obdržíme v tomto kódu permutační vektor, jehož hodnoty udávají, jakým způsobem se přemístí v matici $\boldsymbol{A}$ její sloupcové vektory. Proto ve srovnání s maticemi $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$ získanými z příkazu [Q,R]=qr(A,0) dostaneme tímto kódem zcela odlišný QR rozklad, neboť je v podstatě hledaný pro dvě odlišné matice. Kdybychom pro matici $\boldsymbol{AP}$ použili příkaz [Q,R]=qr(A,0), budou nalezené matice $\boldsymbol{Q}$ a $\boldsymbol{R}$ totožné s maticemi právě získanými z kódu [Q,R,P]=qr(A,0).

Tyto a jiné modifikace nalezneme při zadání příkazu „help qr“ v programu Matlab.

Závěr

V této bakalářské práci jsme se zabývali metodami pro nalezení QR rozkladu a jeho využitím při řešení soustav lineárních rovnic a při výpočtu vlastních čísel. Dále jsme pracovali s matematickým programem Matlab, který jsme využili pro vytvoření vlastních zdrojových kódů řešících problematiku dané kapitoly. Také jsme ukázali příkaz [Q,R]=qr(A) a některé jeho modifikace pro nalezení QR rozkladu, které program Matlab nabízí.

Nejprve jsme v této práci uvedli definice jednotlivých pojmů a vysvětlili Gram-Schmidtův ortogonalizační/ortonormalizační proces, což by mělo usnadnit pochopení celé problematiky.

V druhé kapitole jsme vysvětlili dva způsoby využívající Gram-Schmidtův ortogonalizační proces, jejichž pomocí je možné nalézt QR rozklad. Oba způsoby jsme aplikovali na konkrétním příkladu. Zjistili jsme, že zatímco prvním způsobem obdržíme matici ortonormální, matice získaná způsobem druhým je pouze ortogonální. Proto můžeme říci, že první způsob je vhodnější, neboť ho můžeme využít jednak při řešení soustav lineárních rovnic a jednak při výpočtu vlastních čísel, což u druhého způsobu neplatí, neboť jednou z podmínek při výpočtu vlastních čísel je požadavek ortonormality matice, který u tohoto způsobu není splněn. Poté jsme uvedli ještě dvě metody pro získání QR rozkladu, a to metodu využívající Householderovu matici zrcadlení a metodu využívající Givensovy rotace. Díky konkrétním příkladům jsme dokázali odlišnost těchto metod, protože zatímco Householderova metoda vynuluje všechny prvky v daném sloupci pod hlavní diagonálou najednou, Givensova metoda je nuluje postupně. Po uvedení všech těchto metod vyplynulo, že způsobem využívajícím Gram-Schmidtův ortogonaliazční proces a Givensovou metodou obdržíme stejný QR rozklad, který se od QR rozkladu získaného pomocí Householderovy metody liší jen o znaménka.

Ve třetí kapitole jsme ukázali, jak obdržený QR rozklad efektivně využít při řešení soustav lineárních rovnic a při výpočtu vlastních čísel.

V závěru této bakalářské práce jsme prostudovali v matematickém softwaru Matlab příkaz [Q,R]=qr(A) a jeho modifikace a po srovnání s našimi kódy jsme zjistili, že příkaz [Q,R]=qr(A) je s největší pravděpodobností založen na metodě využívající Householderovu matici zrcadlení, neboť výsledné matice tohoto příkazu a našeho kódu jsou totožné.

Literatura

[1] Burden R. L., Faires J.: Numerical analysis, Cengage Learning, 2010.

[2] Bulirsch R., Stoer J.: Introduction to Numerical Analysis, Third Edition, 2002, 1980, 1993.

[3] Demmel J.: Applied numerical linear algebra, Oxford, MIT, 1996.

[4] Fiedler M.: Speciální matice a jejich použití v numerické matematice, SNTL,Praha, 1981.

[5] Golub G. H., Van Loan C. F.: Matrix computation, Johns Hopkins University Press Baltimore, USA, 1996.

[6] Havel V. a Holenda J.: Lineární algebra, SNTL/ALFA, Praha, 1984.

[7] Holenda J.: O maticích, Plzeň, 2007.

[8] Kubíček M., Dubcová M., Janovská D.: Numerické metody a algoritmy, VŠCHT, Praha, 2005.

[9] Zemánek P.: QR rozklad, Brno, 2006, seminární práce.

[10] Barto L. a Tůma J.: Lineární algebra, [cit. 26. 10. 2016], $http : //www.karlin.mff.cuni.cz/\ tuma/LinAlg14-15/skripta_la4.pdf$.