Osječki matematički list 14 (2014), 117-141

QR dekompozicija koristeći Givensove rotacije i primjene

Zoran Tomljanović[*] Matea Ugrica [†]

Sažetak

U ovom članku ćemo opisati Givensove rotacije i njihove primjene. Predstavit ćemo osnovna svojstva Givensovih rotacijskih matrica i njihovu primjenu na izračun QR dekompozicije dane matrice što se može koristiti za rješavanje sustava linearnih jednadžbi ili rješavanje linearnog problema najmanjih kvadrata. Givensove rotacije imaju važnu ulogu ako je promatrana matrica specijalne strukture, stoga smo opisali korištenje Givensovih rotacija kod strukturiranih matrica poput tridijagonalnih ili Hessenbergovih matrica. Na primjerima su ilustrirane Givensove rotacije i njihova primjena.

Ključne riječi: *Givensove rotacije, QR dekompozicija, linearni problem najmanjih kvadrata*

QR decomposition using Givens rotations and applications

Abstract

In this paper, we describe Givens rotations and their applications. We present basic properties of Givens rotation matrices and their application to calculation of QR decomposition of the given matrix which can be used for solving linear systems or the least squares problem. Givens rotations play an important role if the matrix considered has a special structure; thus, we additionally describe usage of Givens rotations for structured matrices such as tridiagonal or Hessenberg matrices. Givens rotations and their application are illustrated by examples.

Keywords: *Givens rotations, QR decomposition, linear least squares problem*

[*]Odjel za matematiku, Sveučilište u Osijeku, email: `ztomljan@mathos.hr`
[†]student, Odjel za matematiku, Sveučilište u Osijeku, email: `mugrica@gmail.com`

1 Uvod

Rastav matrice na produkt jednostavnijih matrica vrlo je proučavana tema iz područja numeričke linearne algebre. Osnovna ideja rastava je da se matrica zapiše kao produkt jednostavnijih (strukturiranih) matrica čime se ubrzava rješavanje raznih problema, poput problema određivanja svojstvenih vrijednosti, rješavanja sustava linearnih jednadžbi i rješavanja linearnog problema najmanjih kvadrata.

U ovom radu posebno ćemo promatrati rastav matrice na produkt ortogonalne i gornje trokutaste matrice. Ako je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ matrica, tada rastav matrice na produkt ortogonalne matrice $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ i gornje trokutaste matrice $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, tako da vrijedi $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ nazivamo QR dekompozicija (rastav) matrice $\mathbf{A}$.

Napomenimo da je realna kvadratna matrica $\mathbf{Q}$ ortogonalna ako vrijedi $\mathbf{Q^T} \cdot \mathbf{Q} = \mathbf{I}$, a matricu $\mathbf{R}$ zovemo gornje trokutastom ako su joj elementi ispod glavne dijagonale jednaki nula. Za ne-kvadratnu matricu $\mathbf{R}$ reda $m \times n$ s elementima r_{ij}, kažemo da se elementi r_{ii}, $i = 1, \dots, \min\{m, n\}$ nalaze na glavnoj dijagonali.

QR dekompozicija može se izračunati na više različitih načina. Gram–Schmidtov postupak ortogonalizacije jedan je od tih načina, ali je numerički nestabilan, zato se za QR dekompoziciju najčešće koriste Householderove transformacije (za oba načina vidi [4]). Givensove rotacije su još jedna metoda dobivanja QR dekompozicije koja je posebno korisna kod strukturiranih matrica i upravo ta metoda bit će obrađena u ovom radu, zajedno sa nekim njenim primjenama.

Jednom kada je izračunata QR dekompozicija matrice tada se mnogi problemi mogu vrlo efikasno riješiti. Na primjer, rješavanje sustava linearnih jednadžbi i rješavanje linearnog problema najmanjih kvadrata može se bazirati na QR dekompoziciji matrice sustava. U poglavlju s primjenama ilustrirat ćemo primjenu QR dekompozicije kod navedenih problema te ćemo pokazati kako se Givensove rotacije mogu iskoristiti kod nekih strukturiranih matrica.

U ovom radu, a posebno u algoritmima ćemo koristiti oznake kao u programskom paketu Matlab. Konkretno, za matricu $\mathbf{A}$ oznaka $\mathbf{A}([i,k],:)$ predstavljat će matricu sa dva retka koja se sastoji od i-tog i k-tog retka matrice $\mathbf{A}$. Analogno oznaka $\mathbf{A}(:,[i,k])$ predstavljat će matricu sa dva stupca koja se sastoji od i-tog i k-tog stupca matrice A.

2 Givensove rotacije

U ovom poglavlju uvest ćemo pojam matrice rotacije u ravnini i Givensove rotacije te ćemo pokazati neka od osnovnih svojstava.

2.1 Matrice rotacije

Matrica $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ je matrica rotacije u ravnini za koju vrijedi

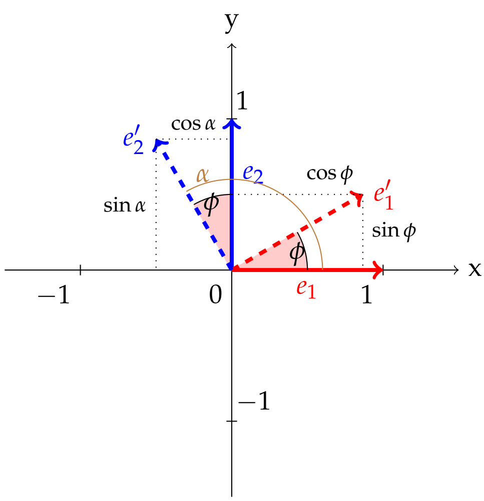
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix},$$

gdje je ϕ kut rotacije suprotan smjeru rotacije kazaljke na satu.

Pokažimo da je ovako zadana matrica $\mathbf{A}$ stvarno matrica rotacije. Neka je s

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$$

zadana matrica rotacije. Promotrimo što dobijemo rotiranjem vektora kanonske baze za kut ϕ u pravokutnom koordinatnom sustavu (Slika 1).



Slika 1. Rotacija u koordinatnom sustavu

Primijetimo da će vektor e_2 nakon rotacije biti $e_2' = \begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \end{bmatrix}^T$, a da bi ga zapisali pomoću kuta ϕ koristimo adicijske formule i vrijedi sljedeće:

$$\begin{aligned} \cos\alpha &= \cos\left(\frac{\pi}{2}+\phi\right) = \cos\frac{\pi}{2}\cos\phi - \sin\frac{\pi}{2}\sin\phi = -\sin\phi \\ \sin\alpha &= \sin\left(\frac{\pi}{2}+\phi\right) = \cos\frac{\pi}{2}\sin\phi + \sin\frac{\pi}{2}\cos\phi = \cos\phi. \end{aligned}$$

Iz Slike 1 vidimo da rotacijom vektora $e_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}^T$, dobivamo vektor $e_1' = \begin{bmatrix} \cos\phi & \sin\phi \end{bmatrix}^T$, a rotacijom vektora $e_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix}^T$, dobivamo vektor $e_2' = \begin{bmatrix} -\sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}^T$ iz čega slijedi da matrica $\mathbf{A}$ mora zadovoljavati sljedeće:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\phi \\ \sin\phi \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sin\phi \\ \cos\phi \end{bmatrix}.$$

Pa lako vidimo da je $a_{11} = \cos\phi$, $a_{21} = \sin\phi$, $a_{12} = -\sin\phi$, $a_{22} = \cos\phi$, tj.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}.$$

Za matricu rotacije $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ vrijedi:

1. Matrica $\mathbf{A}$ je regularna.

$$\det\mathbf{A} = \begin{vmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{vmatrix} = \cos^2\phi + \sin^2\phi = 1 \neq 0.$$

2. Matrica $\mathbf{A}$ je ortogonalna, tj. vrijedi $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$.

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{A}^T\mathbf{A}.$$

3. Matrica $\mathbf{A}$ čuva euklidsku vektora.
Neka je $x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}^T$, tada je euklidska norma dana sa $||x|| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$. Naime, djelovanjem matrice $\mathbf{A}$ na vektor x dobivamo vektor

$$Ax = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1\cos\phi - x_2\sin\phi \\ x_1\sin\phi + x_2\cos\phi \end{bmatrix},$$

te vrijedi:

$$\begin{aligned}
||Ax||^2 &= (x_1 \cos\phi - x_2 \sin\phi)^2 + (x_1 \sin\phi + x_2 \cos\phi)^2 \\
&= x_1^2 \cos^2\phi - 2x_1x_2 \cos\phi \sin\phi + x_2^2 \sin^2\phi \\
&\quad + x_1^2 \sin^2\phi + 2x_1x_2 \sin\phi \cos\phi + x_2^2 \cos^2\phi \\
&= x_1^2(\cos^2\phi + \sin^2\phi) + x_2^2(\cos^2\phi + \sin^2\phi) \\
&= x_1^2 + x_2^2 = ||x||^2.
\end{aligned}$$

4. Produkt matrica rotacije je opet matrica rotacije.
   Neka su $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ matrice rotacije za kut ϕ i ψ, redom. Pogledajmo kako će izgledati njihov produkt.

$$\begin{aligned}
\mathbf{AB} &= \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\psi & -\sin\psi \\ \sin\psi & \cos\psi \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \cos\phi\cos\psi - \sin\phi\sin\psi & -\cos\phi\sin\psi - \sin\phi\cos\psi \\ \sin\phi\cos\psi + \cos\phi\sin\psi & -\sin\phi\sin\psi + \cos\phi\cos\psi \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \cos(\phi+\psi) & -\sin(\phi+\psi) \\ \sin(\phi+\psi) & \cos(\phi+\psi) \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

Dobivena matrica je matrica rotacije za kut $\phi + \psi$.

Jednako tako možemo pokazati da je matrica $\mathbf{M}(i,k,\phi) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ matrica rotacije za kut ϕ (u ravnini određenoj kanonskim vektorima i i k) ukoliko je zadana na sljedeći način:

$$\mathbf{M}(i,k,\phi) = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cos\phi & \cdots & -\sin\phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sin\phi & \cdots & \cos\phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix},$$

pri čemu se podmatrica $\begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}$ nalazi na presjeku i-tog i k-tog retka odnosno stupca.

Za ovako zadanu matricu vrijede ista svojstva kao i za matrice rotacije iz $\mathbb{R}^{2\times 2}$.

2.2 Givensove rotacije

Givensove rotacije $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ su matrice rotacije koje rotiraju vektore u ravnini tako da drugu komponentu ponište ili postave na nulu, tj. ako imamo vektor $x = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^2$ matrica $\mathbf{G}$ će na njega djelovati na sljedeći način:

$$\mathbf{G}x = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Iz ovog sustava određujemo koliki su $\sin\phi$ i $\cos\phi$.

$$x_1\cos\phi - x_2\sin\phi = y_1, \tag{1}$$
$$x_1\sin\phi + x_2\cos\phi = 0. \tag{2}$$

Iz (1) i (2) slijedi da je u slučaju kada je $x_2 = 0$ matrica $\mathbf{G}$ jednaka jediničnoj matrici $\mathbf{I}$, inače imamo da je

$$x_2\cos\phi = -x_1\sin\phi \tag{3}$$

i iskoristimo li jednu od osnovnih trigonometrijskih jednakosti $\sin^2\phi + \cos^2\phi = 1$ imamo:

$$x_2\cos\phi = -x_1\sin\phi = -x_1\sqrt{1-\cos^2\phi}.$$

Kvadriranjem dobivamo:

$$\begin{aligned} x_2^2\cos^2\phi &= x_1^2 - x_1^2\cos^2\phi \\ x_1^2 &= (x_1^2 + x_2^2)\cos^2\phi, \end{aligned}$$

te za $x_1^2 + x_2^2 \neq 0$, tj. $|| \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}^T || \neq 0$ vrijedi

$$\cos^2\phi = \frac{x_1^2}{x_1^2 + x_2^2}, \text{ tj. } \cos\phi = \frac{\pm x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}.$$

Ukoliko želimo da y_1 bude pozitivan uzimamo da je $\cos\phi = \dfrac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}$, a tada je iz (3) $\sin\phi = \dfrac{-x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}$, tj. $y_1 = \dfrac{x_1^2 + x_2^2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}$ i dobivamo vektor $y = \begin{bmatrix} y_1 & 0 \end{bmatrix}^T$.

Jednako tako i za matrice iz $\mathbb{R}^{n\times n}$ možemo konstruirati odgovarajuće Givensove rotacije. To bi bile matrice oblika

$$\mathbf{G}(i,k,\phi) = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cos\phi & \cdots & -\sin\phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sin\phi & \cdots & \cos\phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix},$$

pri čemu se podmatrica $\begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}$ nalazi na presjeku i-tog i k-tog retka odnosno stupca, ostali dijagonalni elementi su jednaki 1, a preostali elementi izvan dijagonale su jednaki 0. Vrijednosti $\sin\phi$ i $\cos\phi$ računaju se na prethodno opisani način, tj. za $x \in \mathbb{R}^n$

$$\cos\phi = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_k^2}}, \quad \sin\phi = \frac{-x_k}{\sqrt{x_i^2 + x_k^2}}. \tag{4}$$

Tada djelovanjem Givensove rotacije $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ na vektor x dobivamo vektor $y \in \mathbb{R}^n$ oblika:

$$y_j = \begin{cases} x_j, & \text{za } j \neq i, j \neq k, \\ 0, & \text{za } j = k, \\ \dfrac{x_i^2 + x_k^2}{\sqrt{x_i^2 + x_k^2}}, & \text{za } j = i, \end{cases}$$

odnosno poništavamo k-tu komponentu vektora x, i-tu mijenjamo dok ostale komponente ostaju nepromijenjene.

U praksi postoje i efikasniji načini računanja $\sin\phi$ i $\cos\phi$ od (4). Primjer je i sljedeći algoritam koji nam osigurava da neće doći do "overflow-a". Za više detalja vidjeti [4].

Možemo primijetiti da se u algoritmu 1 zapravo $\cos\phi = \dfrac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_k^2}}$ dijeli većim od brojeva x_i i x_k kako bismo osigurali da nećemo imati dijeljenje s nekim jako malim brojem.

Također primijetimo da prvi i drugi korak algoritma 1 obuhvaćaju slučaj

Algoritam 1 (za izračunavanje kuta rotacije)

Ulaz: x_i, x_k
Izlaz: $\cos\phi$, $\sin\phi$
1: **if** $x_k = 0$ **then**
2: $\quad\cos\phi = 1, \sin\phi = 0$
3: **else if** $|x_k| > |x_i|$ **then**
4: $\quad\tau = \dfrac{-x_i}{x_k}, \sin\phi = \dfrac{1}{\sqrt{1+\tau^2}}, \cos\phi = \sin\phi\tau$
5: **else**
6: $\quad\tau = \dfrac{-x_k}{x_i}, \cos\phi = \dfrac{1}{\sqrt{1+\tau^2}}, \sin\phi = \cos\phi\tau$
7: **end if**

kada je $x_k = 0$, tj. kada se nema što poništavati pa je matrica $\mathbf{G}$ jednaka jediničnoj matici $\mathbf{I}$.

2.2.1 Množenje matrica Givensovim rotacijama

Kao što smo pokazali u prethodnom poglavlju matrica Givensovih rotacija se samo u dva retka, odnosno stupca razlikuje od jedinične matrice. Zbog te strukture kad množimo s takvim matricama slijeva (zdesna) mijenjaju se samo odgovarajući redci (stupci), a to se može efikasno implementirati kao što ćemo ilustrirati u ovom poglavlju.

Neka je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ i $\mathbf{G}_l(i,k,\phi) \in \mathbb{R}^{m\times m}$ pri čemu s $\mathbf{G}_l(i,k,\phi)$ označavamo Givensovu matricu koja u l-tom stupcu poništava k-ti element, a samo i-ti mijenja u l-tom stupcu. Zbog jednostavne strukture matrice $\mathbf{G}$ vidimo da množenjem matrice $\mathbf{A}$ slijeva matricom $\mathbf{G}$ utječemo samo na dva retka

$$\mathbf{G}_l(i,k,\phi)\mathbf{A}([i,k],:) = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kn} \end{bmatrix}.$$

Neka su $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ neka općenita matrica i $\mathbf{G}_i(i,k,\phi) \in \mathbb{R}^{m\times m}$ Givensova matrica rotacije gdje je ϕ računat za zadane a_{ii} i a_{ki}, što znači da ćemo poništavanje u ovom primjeru vršiti u i-tom stupcu. Tada imamo

$\mathbf{G}_i(i,k,\phi)\mathbf{A} =$

$$= \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cos\phi & \cdots & -\sin\phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sin\phi & \cdots & \cos\phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} & \cdots & a_{ik} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{ki} & \cdots & a_{kk} & \cdots & a_{kn} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mi} & \cdots & a_{mk} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a'_{i1} & \cdots & a'_{ii} & \cdots & a'_{ik} & \cdots & a'_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a'_{k1} & \cdots & a'_{ki} & \cdots & a'_{kk} & \cdots & a'_{kn} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mi} & \cdots & a_{mk} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a'_{i1} & \cdots & a'_{ii} & \cdots & a'_{ik} & \cdots & a'_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a'_{k1} & \cdots & 0 & \cdots & a'_{kk} & \cdots & a'_{kn} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mi} & \cdots & a_{mk} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix},$$

pri čemu su

$$a'_{ij} = a_{ij}\cos\phi - a_{kj}\sin\phi, \quad j = 1, \dots, n, \tag{5}$$

$$a'_{kj} = a_{ij}\sin\phi + a_{kj}\cos\phi, \quad j = 1, \dots, n. \tag{6}$$

Vidimo da se poništava komponenta koja se zadaje kao druga pri izračunavanju kuta ϕ.
Ovaj postupak zahtijeva $6n$ operacija. Imamo 2 retka sa n stupaca matrice **A** koji sudjeluju u množenju. U 4. redu algoritma imamo dva množenja i oduzimanje, a u 5. redu imamo dva množenja i zbrajanje, što je 6 operacija za svaki stupac. Djelovanjem na svih n stupaca dobivamo $6n$ operacija.

Vrlo slično, množenjem matrice **A** zdesna s $\mathbf{G}_l^T(i,j,\phi)$ utječemo samo na dva stupca

$$\mathbf{A}(:,[i,k])\mathbf{G}_l^T(i,j,\phi) = \begin{bmatrix} a_{1i} & a_{1k} \\ a_{2i} & a_{2k} \\ \vdots & \vdots \\ a_{mi} & a_{mk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}$$

i ono zahtijeva $6m$ operacija. Do broja računskih operacija dolazimo kao i u prethodnom algoritmu, samo što u ovom slučaju imamo 2 stupca s m

redaka.

Analogno množenju slijeva možemo organizirati množenje zdesna. U tu svrhu neka je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ neka općenita matrica. Matrica $\mathbf{G}_l^T(i,k,\phi)$ će u l-tom retku poništavati k-ti element, a mijenjati i-ti gdje je ϕ računat za zadane a_{ii} i a_{ik}. Tada vrijedi

$$
\mathbf{A}\mathbf{G}_i(i,k,\phi)^T =
$$

$$
= \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} & \cdots & a_{ik} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{ki} & \cdots & a_{kk} & \cdots & a_{kn} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mi} & \cdots & a_{mk} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cos\phi & \cdots & \sin\phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & -\sin\phi & \cdots & \cos\phi & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a'_{1i} & \cdots & a'_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a'_{ii} & \cdots & a'_{ik} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a'_{ki} & \cdots & a'_{kk} & \cdots & a_{kn} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a'_{mi} & \cdots & a'_{mk} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a'_{1i} & \cdots & a'_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a'_{ii} & \cdots & 0 & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a'_{ki} & \cdots & a'_{kk} & \cdots & a_{kn} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a'_{mi} & \cdots & a'_{mk} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix},
$$

pri čemu su

$$
a'_{ji} = a_{ji}\cos\phi - a_{jk}\sin\phi, \quad j = 1,\ldots,m, \tag{7}
$$

$$
a'_{jk} = a_{ji}\sin\phi + a_{jk}\cos\phi. \quad j = 1,\ldots,m. \tag{8}
$$

Možemo zaključiti da se množenjem slijeva poništavanje vrši po stupcima dok se množenjem zdesna poništavanje vrši po redcima.
Također primijetimo da smo uveli oznaku stupca u kojem poništavamo kada množimo slijeva (tj. retka kada množimo zdesna), s obzirom da imamo djelovanje na matricu, a ne na jedan vektor.

Opisana množenja mogu se jednostavno implementirati u Matlabu koristeći naredbu ":" jer ona jednostavno pristupa odgovarajućim stupcima ili redcima matrice.

2.3 QR dekompozicija koristeći Givensove rotacije

Kako smo već spomenuli u uvodu, QR dekompozicija je rastav matrice $\mathbf{A}$ na dvije matrice $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$, za koje vrijedi da je $\mathbf{Q}$ ortogonalna, a $\mathbf{R}$ gornje trokutasta.

Teorem 2.1. Za bilo koju matricu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, gdje je $m \geq n$ postoje matrice $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ i $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ takve da je $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$, pri čemu je $\mathbf{Q}$ ortogonalna, a $\mathbf{R}$ gornje trokutasta matrica.

Dokaz ovog teorema pomoću Gram-Schimidtovog postupka ortogonalizacije možete naći u [4, str. 84], a u ovom poglavlju ćemo pokazati kako se QR dekompozicija može izračunati pomoću Givensovih rotacija.

Neka je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ matrica, gdje je $m \geq n$. Pomoću Givensovih rotacija odredimo QR rastav matrice, odnosno odredimo ortogonalnu matricu $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ i gornje trokutastu $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ tako da vrijedi $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$.

Kako Givensove rotacije poništavaju samo jedan element u matrici koju množimo mi ćemo s $\mathbf{G}_l(i,k,\phi) \in \mathbb{R}^{m\times m}$ označiti matricu koja poništava element a_{kl} (element u k-tom retku i l-tom stupcu), a kut ϕ izračunava za zadane a_{il} i a_{kl}. Poništavanje ćemo vršiti po sljedećem algoritmu:

Algoritam 2 (QR dekompozicija pomoću Givensovih rotacija)

Ulaz: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$
Izlaz: $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ gornje trokutasta, $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ ortogonalna

```
1: R = A, Q = I
2: for l = 1,...,n do
3:     for i = 1,...,l+1 do
4:         izračunati kut φ (tj. elemente Givensove rotacije G_l(i−1, i, φ))
5:         R = G_l(i−1, i, φ)R (poništava element a_il)
6:         Q = QG_l(i−1, i, φ)^T
7:     end for
8: end for
```

Napomena 2.1. Istaknimo da se u koraku 5 i 6 množenje Givensovim matricama treba implementirati tako da se mijenjaju samo odgovarajući redci, odnosno stupci, kao što je opisano u formulama (5), (6), (7) i (8).

Koristeći ovaj algoritam za poništavanje elemenata u prvom stupcu matrice

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

potrebno je pomnožiti matricu $\mathbf{A}$ redom matricama $\mathbf{G}_1(m-1, m, \phi)$,$\mathbf{G}_1(m-2, m-1, \phi)$,..., $\mathbf{G}_1(1, 2, \phi)$. Na taj način ćemo dobiti matricu $\mathbf{A}'$.

$$\mathbf{A}' = \mathbf{G}_1(1,2,\phi)\cdots\mathbf{G}_1(m-1,m,\phi)\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} \\ 0 & a'_{22} & \cdots & a'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a'_{m2} & \cdots & a'_{mn} \end{bmatrix}.$$

Analogno, za poništavanje elemenata u j-tom stupcu množit ćemo prethodno dobivenu matricu redom matricama $\mathbf{G}_j(m-1, m, \phi)$,$\mathbf{G}_j(m-2, m-1, \phi)$,..., $\mathbf{G}_j(j, j+1, \phi)$.

U zadnjem koraku imamo poništavanje elemenata u zadnjem stupcu i to množeći matricama $\mathbf{G}_n(m-1, m, \phi)$, $\mathbf{G}_n(m-2, m-1, \phi)$, ..., $\mathbf{G}_n(n, n+1, \phi)$ i na taj način smo dobili gornje trokutastu matricu $\mathbf{R}$.

$$\begin{aligned} \mathbf{R} = \mathbf{G}_n(n,n+1,\phi)\cdots\mathbf{G}_n(m-1,m,\phi)\cdots\mathbf{G}_j(j,j+1,\phi)\cdots \\ \mathbf{G}_j(m-1,m,\phi)\cdots\mathbf{G}_1(1,2,\phi)\cdots\mathbf{G}_1(m-1,m,\phi)\mathbf{A} \end{aligned}$$

$$= \mathbf{Q}^T\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1,n-1} & a'_{1n} \\ 0 & a'_{22} & \cdots & a'_{2,n-1} & a'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a'_{n-1,n-1} & a'_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a'_{nn} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Napomenimo da se navedena struktura nula javlja u zadnjih $m-n$ redaka ako je $m > n$, a u slučaju $m = n$ je matrica R kvadratna gornje trokutasta.

S obzirom da su Givensove matrice rotacije ortogonalne matrice vidimo da je matrica $\mathbf{Q}$ koja zadovoljava jednakost $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ jednaka

$$\begin{aligned}\mathbf{Q} &= (\mathbf{G}_n(n, n+1, \phi) \cdots \mathbf{G}_n(m-1, m, \phi) \cdots \mathbf{G}_j(j, j+1, \phi) \cdots \\ &\quad \mathbf{G}_j(m-1, m, \phi) \cdots \mathbf{G}_1(1, 2, \phi) \cdots \mathbf{G}_1(m-1, m, \phi))^T \\ &= \mathbf{G}_1(m-1, m, \phi)^T \cdots \mathbf{G}_1(1, 2, \phi)^T \cdots \mathbf{G}_j(m-1, m, \phi)^T \\ &\quad \cdots \mathbf{G}_j(j, j+1, \phi)^T \cdots \mathbf{G}_n(m-1, m, \phi)^T \cdots \mathbf{G}_n(n, n+1, \phi)^T\end{aligned}$$

Na taj način dobili smo tražene matrice $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ i $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Napomena 2.2. Svaka matrica $\mathbf{G}_i$ ima "svoj" kut ϕ, tj. ne radi se o istom kutu, ali radi jednostavnosti pisanja smo koristili istu oznaku.

Izračunavanje matrice $\mathbf{R}$ u ovom primjeru zahtijeva $3n^2(m - \frac{n}{3})$ operacija, vidi [2] (bez obzira što u množenju sudjeluju samo dva stupca matrice koju poništavamo). Zbog toga se Givensove rotacije puno češće primjenjuju kada su u pitanju strukturirane matrice s puno nula ispod glavne dijagonale, ali o tome više u sljedećem poglavlju.

3 Primjena

QR dekompozicija ima velik broj primjena, a u ovom poglavlju ćemo ilustrirati primjenu na rješavanje sustava linearnih jednadžbi i linearni problem najmanjih kvadrata te ćemo pokazati kako se Givensove rotacije mogu iskoristiti kod strukturiranih matrica.

Sustavi linearnih jednadžbi i problem najmanjih kvadrata imaju široku primjenu. Neke od tih primjena su: obrada digitalnog signala, aproksimacija nelinearnih problema u numeričkoj matematici, linearno programiranje i različite procjene i predviđanja. Pripadni algoritmi su važan dio numeričke linearne algebre i imaju istaknutu ulogu u fizici, kemiji, inžinjerstvu, računarstvu i ekonomiji.

3.1 Rješavanje sustava linearnih jednadžbi

Kao što je u uvodu ilustrirano, rješavanje sustava linearnih jednadžbi je važan matematički problem koji se u primjeni javlja vrlo često, stoga je važno imati algoritme koji efikasno rješavaju ovaj problem. Rješavanje sustava linearnih jednadžbi jedan je od najstarijih matematičkih problema, ali i u današnje vrijeme taj problem se vrlo intenzivno proučava sa stajališta efikasnih algoritama koji rješavaju sustave velikih dimenzija. U ovom poglavlju pokazat ćemo kako se sustav može rješavati koristeći QR faktorizaciju koja je izračunata pomoću Givensovih rotacija.

Sustav n linearnih jednadžbi s n nepoznanica oblika

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ \vdots \qquad & \quad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned}$$

jednostavnije zapisujemo $\mathbf{A}x = b$, gdje je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ kvadratna matrica reda n, a $x, b \in \mathbb{R}^n$ n-dimenzionalni vektori. Dakle, sustav linearnih jednadžbi možemo zapisati kao produkt matrica

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

Ukoliko promatramo problem $\mathbf{A}x = b$, tada rješavanje možemo podijeliti u nekoliko koraka. Prvi korak odgovara QR dekompoziciji matrice $\mathbf{A}$ koja se može izračunati koristeći Givensove rotacije. Uočimo da ako je matrica $\mathbf{A}$ regularna tada je regularna i matrica $\mathbf{R}$. Tada se rješavanje sustava svodi na rješavanje gornje trokutastog sustava

$$\mathbf{R}x = \mathbf{Q}^T b$$

koji se lako rješava metodom povratnih supstitucija.

Metoda povratnih supstitucija se bazira na činjenici da je matrica sustava trokutasta pa se rješavanje sustava s n jednadžbi s n nepoznanica svodi na n jednadžbi s jednom nepoznanicom koje se rješavaju sukcesivno od "kraja prema početku".
Naime, budući da je sustav trokutast možemo jednostavno odrediti zadnju komponentu kao rješenje jedne jednadžbe s jednom nepoznanicom, tada možemo odrediti predzadnju komponentu sustava itd. Na kraju ćemo izračunati cijelo rješenje sustava. Budući da je matrica $\mathbf{R}$ regularna takav sustav će imati jedinstveno rješenje.

Algoritam povratnih supstitucije zapisan je u algoritmu 3, a više detalja o rješavanju trokutastih sustava može se pronaći u [3] i [4].
Istaknimo također da pri izračunu desne strane u promatranom sustavu $\mathbf{Q}^T b$, formiranje matrice $\mathbf{Q}$ nije potrebno jer možemo automatski množiti i vektor b s Givensovim rotacijama. Ukoliko se pri izračunu QR faktorizacije matrica $\mathbf{A}$ množi matricama $\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2, \ldots, \mathbf{Q}_k$, odnosno

$$\mathbf{R} = \mathbf{Q}_k \cdots \mathbf{Q}_2 \mathbf{Q}_1 \mathbf{A},$$

Algoritam 3 (Povratne supstitucije)

Ulaz: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gornje trokutasta matrica i vektor $b \in \mathbb{R}^n$
Izlaz: rješenje jednadžbe $Ax = b$

```
x_n = b_n / a_nn
for j = n − 1, . . . , 1 do
    x_j = (1 / a_jj) (b_j − Σ_{k=j+1}^{n} a_jk x_k)
end for
```

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$
for $j = n-1, \ldots, 1$ **do**
$$x_j = \frac{1}{a_{jj}}\left(b_j - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk}x_k\right)$$
end for

tada direktno množeći jednakost $\mathbf{A}x = b$ slijeva s $\mathbf{Q}_k \cdots \mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_1$ dobivamo

$$\mathbf{R}x = \mathbf{Q}_k \cdots \mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_1 b$$

što je trokutasti sustav, a poznavanje same matrice $\mathbf{Q}$ nije ni potrebno. Stoga, u algoritmu 2 liniju 6 možemo zamijeniti linijom $b = \mathbf{G}_l(i-1, i, \phi)^T b$ i time ćemo automatski dobiti gornje trokutasti sustav koji se rješava povratnim supstitucijama.
Ilustrirajmo navedeno sljedećim primjerom.

Primjer 1. Riješite sustav $\mathbf{A}x = b$ pomoću QR dekompozicije koristeći Givensove rotacije, gdje je

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 3 \\ 2 & 8 & 4 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

Odredimo najprije QR dekompoziciju matrice $\mathbf{A}$. Da bismo to napravili prvo trebamo izračunati matricu $\mathbf{G}_1(2, 3, \phi_1)$ koja poništava treći element prvog stupca matrice $\mathbf{A}$. Primjenom algoritma 1. na $x_k = 2$ i $x_i = 2$, dobijemo traženu matricu, a kada njome pomnožimo matricu $\mathbf{A}$ dobivamo

$$\begin{aligned} A_1 = \mathbf{G}_1(2,3,\phi_1)\mathbf{A} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 3 \\ 2 & 8 & 4 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 2\sqrt{2} & \frac{9\sqrt{2}}{2} & \frac{7\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{7\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Sada u novonastaloj matrici poništavamo drugi element u prvom stupcu pomoću matrice $\mathbf{G}_1(1,2,\phi_2) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{3} & -\frac{2\sqrt{2}}{3} & 0 \\ \frac{2\sqrt{2}}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ te dobivamo

$$A_2 = \mathbf{G}_1(1,2,\phi_2)A_1 = \mathbf{G}_1(1,2,\phi_2)\begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 2\sqrt{2} & \frac{9\sqrt{2}}{2} & \frac{7\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{7\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} -3 & -7 & -6 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{3\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{7\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}.$$

Za matricu $\mathbf{G}_2(2,3,\phi_3)$ dobivamo

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\sqrt{50}}{50} & -\frac{7\sqrt{50}}{50} \\ 0 & \frac{7\sqrt{50}}{50} & -\frac{\sqrt{50}}{50} \end{bmatrix},$$

koja poništava treći element u drugom stupcu pa množenjem matrice $\mathbf{A}_2$ s matricom $\mathbf{G}_2(2,3,\phi_3)$ dobivamo

$$\mathbf{G}_2(2,3,\phi_3)\mathbf{G}_1(1,2,\phi_2)\mathbf{G}_1(2,3,\phi_1)\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -3 & -7 & -6 \\ 0 & -5 & -1 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} = \mathbf{R}.$$

Tada je matrica $\mathbf{Q} = (\mathbf{G}_2(2,3,\phi_3)\mathbf{G}_1(1,2,\phi_2)\mathbf{G}_1(2,3,\phi_1))^T$, a rješenje sustava dobijemo povratnim supstitucijama jer smo dobili gornje trokutasti sustav

$$\mathbf{R}x = \mathbf{Q}^T b = \begin{bmatrix} -\frac{19}{3} \\ -\frac{44}{15} \\ \frac{8}{15} \end{bmatrix},$$

a ono iznosi $x = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{8}{15} & \frac{4}{15} \end{bmatrix}^T$.

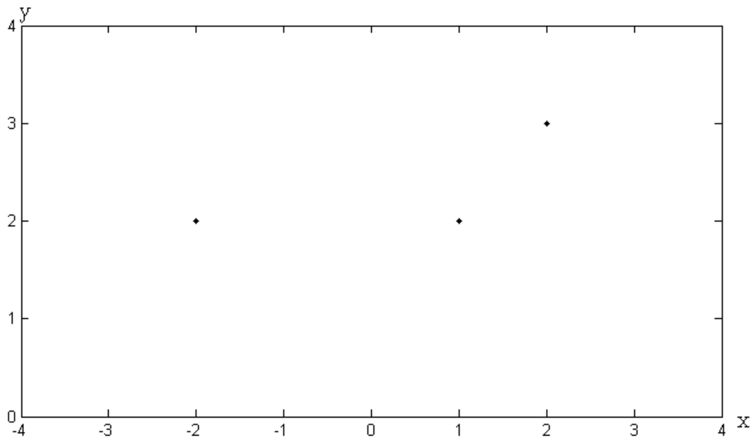
3.2 Linearni problem najmanjih kvadrata

U ovom poglavlju objasnit ćemo ukratko što je linearni problem najmanjih kvadrata te kako se za njegovo rješavanje koriste Givensove rotacije, tj. QR dekompozicija. Metoda najmanjih kvadrata se koristi kada u sustavu $\mathbf{A}x = b$ ima više jednadžbi nego nepoznanica što ćemo ilustrirati u sljedećem primjeru.

Primjer 2. Neka su zadane tri točke u ravnini

x	-2	1	2
y	2	2	3

kao na slici 2. Kada bi imali jedinstveni pravac koji prolazi kroz sve zadane točke, tada bi za svaku točku (x_i, y_i), $i = 1, 2, 3$ vrijedilo $kx_i + l = y_i$.



Slika 2. Zadane točke u ravnini

U navedenom primjeru to bi nam dalo sljedeći sustav:

$$\begin{aligned} -2k + l &= 2, \\ 1k + l &= 2, \\ 2k + l &= 3. \end{aligned}$$

Ovaj sustav s tri jednadžbi i dvije nepoznanice k i l ima sljedeći matrični oblik

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k \\ l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

odnosno imamo sustav $\mathbf{A}x = b$, gdje je

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} k \\ l \end{bmatrix}, \quad b = y = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Kada bi ovaj sustav imao rješenje, tada bi vrijedio $\mathbf{A}x - b = 0$, tj. $||\mathbf{A}x - b|| = 0$. No, kako ovaj sustav nema rješenje cilj nam je minimizirati rezidual $r = \mathbf{A}x - b$, tj. minimizirati normu $||\mathbf{A}x - b||$ i na taj način dobiti pravac koji "najbolje" aproksimira zadane podatke.
Minimizacija norme $||\mathbf{A}x - b||$, ekvivalentna je minimizaciji kvadrata te iste norme, tj. minimiziramo $||\mathbf{A}x - b||^2 = \sum\limits_{i=1}^{3}(kx_i + l - y_i)^2$. Naziv problem najmanjih kvadrata slijedi iz činjenice da minimiziramo sumu kvadrata razlike dobivenih vrijednosti $kx_i + l$ i pravih vrijednosti y_i.
Primjer ćemo riješiti u nastavku rada.

Navedeni problem iz prethodnog primjera može biti i višedimenzionalan. Tada imamo matricu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, takvu da je $m \geq n$ ("dugačka" matrica) i vektor $b \in \mathbb{R}^m$, a tražimo $x \in \mathbb{R}^n$ koji minimizira normu reziduala $r = \mathbf{A}x - b$, tj. normu $||Ax - b||$.

Postoje različiti načini rješavanja linearnog problema najmanjih kvadrata (LPNK). Neki od njih koriste sustav normalnih jednadžbi i rješavanje pomoću dekompozicije na singularne vrijednosti (vidi [4]), ali u nastavku ćemo pokazati kako se LPNK rješava pomoću QR dekompozicije.

Kako smo već rekli, rješavanje LPNK svodi se na minimizaciju norme reziduala, tj. na minimizaciju norme $||\mathbf{A}x - b||$, gdje su $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, i $b \in \mathbb{R}^m$. Neka je $\text{rang}(\mathbf{A}) = r_A \leq n \leq m$ rang matrice $\mathbf{A}$, te neka je $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$, QR dekompozicija matrice $\mathbf{A}$ dobivena pomoću Givensovih rotacija.

Kako matrica $\mathbf{A}$ ne mora biti punog ranga stupaca ($r_A < n$), razlikujemo dva slučaja. U slučaju kada matrica nije punog ranga stupaca rješenje x LPNK nije jedinstveno, za više pogledati u [1], a u ovom radu promatrat ćemo samo slučaj kada je matrica $\mathbf{A}$ punog ranga stupaca.

Matrica $\mathbf{A}$ je punog ranga po stupcima, ali ne mora biti kvadratna, stoga za nju računamo reduciranu QR dekompoziciju

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR} = [\mathbf{Q}' \quad \mathbf{Q}''] \begin{bmatrix} \mathbf{R}' \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{Q}'\mathbf{R}'.$$

To znači da smo za matricu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, gdje je $m \geq n$, dobili $\mathbf{A} = \mathbf{Q}'\mathbf{R}'$, gdje je $\mathbf{Q}' \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ortogonalna (sadrži prvih n stupaca matrice $\mathbf{Q}$), a $\mathbf{R}' \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gornje trokutasta matrica (sadrži prvih n redaka matrice $\mathbf{R}$).

Napomena 3.1. U Matlabu bismo reducirane $\mathbf{Q}'$ i $\mathbf{R}'$ zapisali na sljedeći način:

$$\mathbf{Q}' = \mathbf{Q}(:, 1:n),$$
$$\mathbf{R}' = \mathbf{R}(1:n, 1:n).$$

Kako smo rekli da promatramo matrice koje su punog ranga po stupcima, neka je $r_A = n$ i $x \in \mathbb{R}^n$. Kako je $\mathbf{Q}$ matrica rotacije ona čuva normu vektora, pa stoga možemo pisati

$$||r|| = ||\mathbf{A}x - b|| = ||\mathbf{QR}x - b|| = ||\mathbf{Q}(\mathbf{R}x - \mathbf{Q}^T b)|| = ||\mathbf{R}x - \mathbf{Q}^T b||.$$

Zapišimo vektor $\mathbf{Q}^T b$ na sljedeći način:

$$\mathbf{Q}^T b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix},$$

gdje je b_1 r_A - dimenzionalni vektor, tj. $b_1 = \mathbf{Q}'^T b$. Tada imamo

$$\begin{aligned} ||\mathbf{A}x - b||^2 =& ||\mathbf{R}x - \mathbf{Q}^T b||^2 = || \begin{bmatrix} \mathbf{R}'x \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} ||_2^2 \\ =& ||\mathbf{R}'x - b_1||^2 + ||b_2||^2, \end{aligned}$$

iz čega slijedi da će rezidual biti minimalan kada je $\mathbf{R}'x = b_1 = \mathbf{Q}'^T b$. Tada se rješenje x LPNK dobije rješavanjem trokutastog sustava $\mathbf{R}'x = \mathbf{Q}'^T b$.

Sljedeći algoritam služi za rješavanje LPNK u slučaju matrice punog ranga stupaca.

Algoritam 4

Ulaz: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ranga n, $m \geq n$, $b \in \mathbb{R}^m$
Izlaz: $x \in \mathbb{R}^n$ koji minimizira $||\mathbf{A}x - b||$

1: izračunaj reduciranu **QR** dekompoziciju matrice $\mathbf{A} = \mathbf{Q}'\mathbf{R}'$
2: izračunaj $\mathbf{Q}'^T b \in \mathbb{R}^n$
3: riješi $\mathbf{R}'x = \mathbf{Q}'^T b$ pomoću povratnih supstitucija.

Riješimo sada Primjer 2.
Imamo za riješiti sustav $\mathbf{A}x = b$, gdje je

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} k \\ l \end{bmatrix}, \quad b = y = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Prvo ćemo poništiti element a_{13} i to pomoću matrice $\mathbf{G}_1(2,3,\phi)$, koja glasi

$$\mathbf{G}_1(2,3,\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0.4472 & -0.8944 \\ 0 & 0.8944 & -0.4472 \end{bmatrix}.$$

Množenjem matrice $\mathbf{A}$ i vektora b s $\mathbf{G}_1(2,3,\phi)$ dobivamo

$$\mathbf{A}' = \mathbf{G}_1(2,3,\phi)\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2.0000 & 1.0000 \\ -2.2361 & -1.3416 \\ 0 & 0.4472 \end{bmatrix},$$

$$b' = \mathbf{G}_1(2,3,\phi)b = \begin{bmatrix} 2.0000 \\ -3.5777 \\ 0.4472 \end{bmatrix}.$$

Zatim želimo poništiti element a_{12} i za to poništavanje ćemo koristiti matricu $\mathbf{G}_1(1,2,\phi) = \begin{bmatrix} -0.6667 & -0.7454 & 0 \\ 0.7454 & -0.6667 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ te dobivamo

$$\mathbf{A}'' = \mathbf{G}_1(1,2,\phi)\mathbf{G}_1(2,3,\phi)\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3.0000 & 0.3333 \\ 0 & 1.6398 \\ 0 & 0.4472 \end{bmatrix},$$

$$b'' = \mathbf{G}_1(1,2,\phi)\mathbf{G}_1(2,3,\phi)b = \begin{bmatrix} 1.3333 \\ 3.8759 \\ 0.4472 \end{bmatrix}.$$

Preostalo nam je još jedno poništavanje i to elementa a_{23}. Givensova matrica koju ćemo koristiti za to poništavanje glasi

$$\mathbf{G}_2(2,3,\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.9648 & 0.2631 \\ 0 & -0.2631 & 0.9648 \end{bmatrix},$$

te dobivamo

$$\mathbf{R} = \mathbf{G}_2(2,3,\phi)\mathbf{G}_1(1,2,\phi)\mathbf{G}_1(2,3,\phi)\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3.0000 & 0.3333 \\ 0 & 1.6997 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{Q}^T b = \mathbf{G}_2(2,3,\phi)\mathbf{G}_1(1,2,\phi)\mathbf{G}_1(2,3,\phi)b = \begin{bmatrix} 1.3333 \\ 3.8570 \\ -0.5883 \end{bmatrix}.$$

Sada povratnim supstitucijama riješimo sustav $\mathbf{R}'x = b_1 = \mathbf{Q}'^T b$, gdje je

$$\mathbf{R}' = \begin{bmatrix} 3.0000 & 0.3333 \\ 0 & 1.6997 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Q}'^T b = \begin{bmatrix} 1.3333 \\ 3.8570 \end{bmatrix}$$

Traženo rješenje ovog LPNK je

$$x = \begin{bmatrix} 0.1923 \\ 2.2692 \end{bmatrix}.$$

3.3 Računanje QR dekompozicije strukturiranih matrica

U ovom poglavlju ćemo prikazati kako se Givensove rotacije koriste u izračunavanju QR dekompozicije strukturiranih matrica kao što su matrice u Hessenbergovoj formi i tridijagonalne matrice. Prednost Givensovih rotacija u odnosu na metodu koja koristi Householderove transformacije je u tome što se možemo posvetiti poništavanju konkretnih ne-nul elemenata što ubrzava postupak računanja QR dekompozicije.

Definicija 1. Za matricu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ćemo reći da je u gornjoj Hessenbergovoj formi ako vrijedi $a_{ij} = 0$, za $i - j \geq 2$, tj. matrica $\mathbf{A}$ je gornje trokutasta i ima još jednu sporednu dijagonalu ispod glavne.

Ilustrirajmo primjerom ideju za izračunavanje QR dekompozicije.

Primjer 3. Neka je $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{5\times 5}$ matrica u gornjoj Hessenbergovoj formi. Tada je ona sljedećeg oblika

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ 0 & 0 & 0 & a_{54} & a_{55} \end{bmatrix}.$$

S obzirom da trebamo poništiti samo elemente na sporednoj dijagonali ispod glavne, poništavanje ćemo vršiti dijagonalno, te na taj način izbjeći nepotrebna množenja.
Množenjem matrice A slijeva, redom Givensovim matricama $\mathbf{G}_1(1,2,\phi)$ i $\mathbf{G}_2(2,3,\phi)$ dobivamo matricu

$$\mathbf{G}_2(2,3,\phi)\mathbf{G}_1(1,2,\phi)A = \begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} & a'_{14} & a'_{15} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & a'_{25} \\ 0 & 0 & a'_{33} & a'_{34} & a'_{35} \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ 0 & 0 & 0 & a_{54} & a_{55} \end{bmatrix}.$$

Stoga množenjem još s matricama $\mathbf{G}_3(3,4,\phi)$ i $\mathbf{G}_4(4,5,\phi)$, dobivamo gornje trokutastu matricu

$$\begin{aligned}\mathbf{R} &= \mathbf{G}_4(4,5,\phi)\mathbf{G}_3(3,4,\phi)\mathbf{G}_2(2,3,\phi)\mathbf{G}_1(1,2,\phi)\mathbf{A}\\ &= \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & r_{15}\\ 0 & r_{22} & r_{23} & r_{24} & r_{25}\\ 0 & 0 & r_{33} & r_{34} & r_{35}\\ 0 & 0 & 0 & r_{44} & r_{45}\\ 0 & 0 & 0 & 0 & r_{55}\end{bmatrix}.\end{aligned}$$

Tada je matrica $\mathbf{Q}$ iz QR dekompozicije jednaka

$$\begin{aligned}\mathbf{Q} &= (\mathbf{G}_4(4,5,\phi)\mathbf{G}_3(3,4,\phi)\mathbf{G}_2(2,3,\phi)\mathbf{G}_1(1,2,\phi))^T\\ &= \mathbf{G}_1(1,2,\phi)^T\mathbf{G}_2(2,3,\phi)^T\mathbf{G}_3(3,4,\phi)^T\mathbf{G}_4(4,5,\phi)^T\end{aligned}$$

te smo QR dekompoziciju dobili s četiri jednostavna množenja.

Možemo primijetiti razliku između ove strategije da dijagonalno poništavamo elemente i strategije primijenjene u algoritmu 4 gdje su se elementi poništavali po stupcima odozdo prema gore, počevši od zadnjeg elementa u prvom stupcu. Stoga u slučaju kada imamo matricu $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ u gornjoj Hessenbergovoj formi koristimo sljedeći algoritam za računanje QR dekompozicije:

Algoritam 5 (QR dekompozicija za matrice u gornjoj Hessenbergovoj formi)

Ulaz: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ matrica u gornjoj Hessenbergovoj formi
Izlaz: $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ gornje trokutasta i $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ortogonalna

```
R = A, Q = I
for j = 1, ..., n − 1 do
    izračunati φ za matricu G_j(j, j + 1, φ_j)
    R = G_j(j, j + 1, φ_j) R
    Q = Q G_j(j, j + 1, φ_j)^T
end for
```

Primjer 4. Matrica

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0 & 12 & 5 & 3 & 0\\ 1 & 3 & 9 & 0 & 31\\ 0 & 4 & 4 & 7 & 17\\ 0 & 0 & 3 & 8 & 5\\ 0 & 0 & 0 & 6 & 11\end{bmatrix}$$

je u gornjoj Hessenbergovoj formi. Odredite njenu QR dekompoziciju.

Koristeći algoritam za QR dekompoziciju matrica u gornjoj Hessenbergovoj formi uz pomoć Givensovih rotacija kao rezultat dobijemo $\mathbf{H} = \mathbf{QR}$, gdje su

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 0 & 0.9487 & 0.1878 & -0.0072 & -0.2544 \\ -1.0000 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3162 & -0.5633 & 0.0216 & 0.7631 \\ 0 & 0 & -0.8047 & -0.0168 & -0.5935 \\ 0 & 0 & 0 & -0.9996 & 0.0283 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} -1.0000 & -3.0000 & -9.0000 & 0 & -31.0000 \\ 0 & 12.6491 & 6.0083 & 5.0596 & 5.3759 \\ 0 & 0.0000 & -3.7283 & -9.8169 & -13.5988 \\ 0 & 0 & -0.0000 & -6.0024 & -10.7127 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10.3155 \end{bmatrix}$$

pri čemu smo zaokruživali na četiri decimale.

Osim određivanja QR dekompozicije pomoću Givensovih rotacija, općenite matrice se mogu svoditi na gornju Hessenbergovu formu. Tada u algoritmu 4 u 3. koraku umjesto **for** $i = m : -1 : l + 1$ pišemo **for** $i = m : -1 : l + 2$ i na taj način će se poništavanje vršiti do elementa ispod dijagonale i matricu ćemo svesti na gornju Hessenbergovu formu.

Definicija 2. Kažemo da je matrica $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tridijagonalna ako je $t_{ij} = 0$ za $|i - j| > 1$, tj. matrica $\mathbf{T}$ ima glavnu i obje sporedne dijagonale.

Primjer 5. Matrica

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 12 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & 2 & 9 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 3 & 7 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 13 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 11 \end{bmatrix}$$

je tridijagonalna. Odredite QR dekompoziciju.

Primjenom istog koda kao u prethodnom primjeru, za matrice $\mathbf{Q}$ i $\mathbf{R}$ dobivamo

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} -0.1240 & 0.9386 & -0.2349 & -0.1550 & 0.1564 \\ -0.9923 & -0.1173 & 0.0294 & 0.0194 & -0.0196 \\ 0 & 0.3245 & 0.6900 & 0.4554 & -0.4595 \\ 0 & 0 & 0.6840 & -0.5135 & 0.5182 \\ 0 & 0 & 0 & -0.7103 & -0.7039 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} -8.0623 & -3.4730 & -8.9305 & 0 & 0 \\ 0 & 12.3263 & -0.0824 & 2.2716 & 0 \\ 0 & 0 & 4.3863 & 13.7217 & 3.4198 \\ 0 & 0 & 0 & -7.0395 & -10.3807 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -5.1523 \end{bmatrix}$$

pri čemu smo zaokruživali na četiri decimale.

Primijetimo da se izračunavanje QR dekompozicije tridijagonalnih matrica provodi na isti način kao i kod Hessenbergovih matrica.

4 Zaključak

U ovom članku smo obradili osnovna svojstva Givensovih rotacijskih matrica i njihovu primjenu. Givensove rotacije smo koristili za izračun QR dekompozicije dane matrice pri čemu smo posebno promatrali strukturirane matrice poput tridijagonalnih i Hessenbergovih matrica. Obradili smo primjenu QR dekompozicije na rješavanje sustava linearnih jednadžbi i rješavanje linearnog problema najmanjih kvadrata. Na primjerima smo ilustrirali Givensove rotacije, a potrebne algoritme smo napisali u formi pseudokoda koji se jednostavno mogu implementirati u programskim paketima poput Matlaba ili Mathematica-e.

Literatura

[1] J. W. Demmel, *Applied Numerical Linear Algebra*, SIAM 1997.

[2] G. Golub, C. F. Van Loan, *Matrix Computations*, Johns Hopkins Univ Pr., 3rd edition, 1996.

[3] R. Scitovski, *Numerička matematika*, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku, Odjel za matematiku, Osijek, 2000.

[4] N. Truhar, *Numerička linearna algebra*, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku, Odjel za matematiku, Osijek, 2010.

[5] http://www.mathos.unios.hr/geometrija/Materijali/Geo_2.pdf (2012.)

[6] http://web.math.pmf.unizg.hr/∼drmac/NA1-2.pdf (22.12.2008.)

[7] http://web.math.pmf.unizg.hr/∼singer/num_mat/NM_0809/08.pdf (2009.)