QR - разложение матрицы

QR-разложением действительной или комплексной квадратной матрицы A называют ее представление в виде произведения $A = QR$ с ортогональной (унитарной) матрицей Q и верхней треугольной матрицей R.

QR-разложение матрицы можно строить с помощью ортогонализации и нормирования ее столбцов, а также с помощью ортогональных (унитарных) преобразований.

Пусть в матрице $A = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$ столбцы $a_1, a_2, \ldots, a_n$ линейно независимые. Ортогонализируем эту систему векторов, проводя процесс ортогонализации. Затем нормируем каждый вектор полученной ортогональной системы векторов. В результате придем к ортонормированной системе векторов

$$
\begin{aligned}
q_1 &= u_{11} a_1, \\
q_2 &= u_{12} a_1 + u_{22} a_2, \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
q_n &= u_{1n} a_1 + u_{2n} a_2 + \ldots + u_{nn} a_n.
\end{aligned}
$$

В матричной записи это дает равенство

$$Q = AU,$$

где $Q = (q_1, q_2, \ldots, q_n)$ — ортогональная (унитарная) матрица,

$$
U = \begin{pmatrix}
u_{11} & u_{12} & \ldots & u_{1,n-1} & u_{1n} \\
0 & u_{22} & \ldots & u_{2,n-1} & u_{2n} \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\
0 & 0 & \ldots & 0 & u_{nn}
\end{pmatrix}
$$

— верхняя треугольная матрица.

Отсюда получается QR-разложение $A = QR$ с ортогональной (унитарной) матрицей Q и треугольной матрицей $R = U^{-1}$.

Разложения, аналогичные QR-разложению, можно строить и для прямоугольных $(m\times n)$-матриц.
В этом случае множитель Q будет прямоугольной $(m\times n)$-матрицей, у которой столбцы составляют ортонормированную систему. Такое разложение прямоугольной матрицы называют ее qR-разложением. Рассматривают и Qr-разложения, в которых прямоугольной является матрица R.

Если известно QR- или qR-разложение матрицы A, то по столбцам матрицы Q легко выписать ортонормированную систему векторов, полученную из системы столбцов матрицы A. Так как QR- и qR-разложения можно строить либо с помощью процесса ортогонализации и нормирования столбцов матрицы A, либо с помощью ортогональных (унитарных) преобразований, то это означает, что такими же способами можно осуществлять ортонормирование системы векторов.

QR-разложения матриц имеют широкое применение в численных методах линейной алгебры. Например, они являются основой QR-алгоритма для вычисления собственных значений матрицы.

Если известно QR-разложение $A=QR$ матрицы A системы линейных уравнений $AX=b$, то значительно упрощается решение этой системы, поскольку она сводится к системе $RX=Q^*b$ с треугольной матрицей R.

Пример. Построить QR -разложения для матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 5 \\ -2 & 0 & -3 \\ 2 & -1 & -7 \end{pmatrix}$$

Решение. Для построения QR-разложения матрицы A применим сначала процесс ортогонализации и нормирования ее столбцов. Для этого положим $b_1 = a_1$ и по формуле ортогонализации Грама-Шмидта найдем

$$b_2 = a_2 - \frac{(a_2, b_1)}{(b_1, b_1)} b_1 = a_2 + \frac{1}{3} b_1 = \frac{1}{3} a_1 + a_2 =$$

$$= \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} -2 \\ -2 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Далее по той же формуле находим

$$b_3 = a_3 - \frac{(a_3, b_1)}{(b_1, b_1)} b_1 - \frac{(a_3, b_2)}{(b_2, b_2)} b_2 =$$

$$= a_3 + \frac{1}{3} b_1 - b_2 = -a_2 + a_3 =$$

$$= -\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 5 \\ -3 \\ -7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -3 \\ -6 \end{pmatrix}.$$

Система векторов b_1, b_2, b_3 ортогональная. Нормируя векторы этой системы, придем к ортонормированной системе векторов:

$$q_1 = \frac{1}{3}(1, -2, 2)^{\mathrm{T}} = \frac{1}{3} a_1,$$

$$q_2 = \frac{1}{3}(-2, -2, -1)^{\mathrm{T}} = \frac{1}{3} a_1 + a_2,$$

$$q_3 = \frac{1}{3}(2, -1, -2)^{\mathrm{T}} = -\frac{1}{9}a_2 + \frac{1}{9}a_3 .$$

В матричной записи это дает равенство $Q = AU$, где

$$Q = (q_1, q_2, q_3) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 \\ -2 & -2 & -1 \\ 2 & -1 & -2 \end{pmatrix}, \; U = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{9} \\ 0 & 0 & \frac{1}{9} \end{pmatrix}.$$

Из равенства $Q = AU$ получаем искомое QR-разложение $A = QR$ при

$$R = U^{-1} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 9 \end{pmatrix}.$$

Пример Применяя QR-разложение матрицы A, решить систему $Ax = b$ при

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 5 \\ -2 & 0 & -3 \\ 2 & -1 & -7 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 6 \\ -7 \\ -4 \end{pmatrix}.$$

Решение В предыдущем примере для матрицы A получено QR-разложение

$$A = QR = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 \\ -2 & -2 & -1 \\ 2 & -1 & -2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 9 \end{pmatrix}.$$

Оно позволяет от системы $Ax = b$, т. е. от системы $QRx = b$, перейти к системе $Rx = Q^{-1}b$ с треугольной матрицей R, которая в подробной записи имеет вид

$$\begin{cases} 3x_1 - x_2 - x_3 = 4, \\ \qquad\quad x_2 + x_3 = 2, \\ \qquad\qquad\; 9x_3 = 9. \end{cases}$$

Отсюда получаем искомое решение: $x_1 = 2$, $x_2 = 1$, $x_3 = 1$.

QR-РАЗЛОЖЕНИЕ НА ОСНОВЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ГИВЕНСА

Введем в рассмотрение матрицы вида

$$\mathbf{T}_{ij} := \begin{array}{cc}
\left(\begin{array}{ccccccccc}
1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\
 & \ddots & & & & & & & \\
0 & & c & & 0 & & s & & 0 \\
 & & & \ddots & & & & & \\
0 & & 0 & & 1 & & 0 & & 0 \\
 & & & & & \ddots & & & \\
0 & & -s & & 0 & & c & & 0 \\
 & & & & & & & \ddots & \\
0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1
\end{array}\right) &
\begin{array}{c} \\ \\ i \\ \\ \\ \\ j \\ \\ \\ \end{array} \\
\begin{array}{ccccccccc} & & i & & & & j & & \end{array} &
\end{array} , \qquad (1.25)$$

получающиеся из единичной матрицы заменой ее четырех элементов, стоящих на пересечении i-х и j-х строк и столбцов, элементами c и s, расположенными соответствующим образом. Будем всюду далее считать эти числа связанными соотношением

$$c^2 + s^2 = 1 \ . \qquad (1.26)$$

Это позволяет интерпретировать числа c и s в матрице $\mathbf{T}_{ij}$ как косинус и синус некоторого угла α. В таком случае ее 2×2-подматрица

$$\tilde{\mathbf{T}} := \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}, \qquad (1.27)$$

как известно, задает преобразование, геометрический смысл которого состоит в повороте системы координат в декартовой плоскости на угол α в положительном направлении. Следовательно, и $n\times n$-матрицу (1.25) можно считать матрицей преобразования поворотом в определяемой i-й и j-й строками (столбцами) гиперплоскости пространства $\mathbb{R}_n$. Отсюда — ее название ***матрица плоских вращений***, или просто ***матрица вращений***. Иной термин, применяемый для упоминания матрицы вращений, — это ***матрица Гивенса***.

Следует отметить, что матрицами вращений называют не только матрицу вида (1.25), но и другие матрицы подобной структуры, 2×2-подматрицы которых имеют, например, симметричный по отношению к (1.27) вид

$$\tilde{\tilde{\mathbf{T}}} := \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix} ;$$

главное, чтобы при этом элементы c и s удовлетворяли условию нормировки (1.26). Легко проверить, что при выполнении этого условия каждая из таких двумерных матриц обладает свойством ортогональности, что, в свою очередь, влечет ортогональность соответствующих $n\times n$-матриц $\mathbf{T}_{ij}$. Таким образом, осуществляемое с помощью матриц вращения ***преобразование вращения*** можно отнести к ***ортогональным преобразованиям***.

Обратим внимание на то, что матрицы вращения определяются двумя параметрами c и s, на которые наложено лишь одно условие. Следовательно, имеется возможность наложить еще какое-то условие, направленное на достижение определенных целей. Обычно такой целью ставят создание нуля на месте какого-нибудь заданного элемента строки или столбца с номерами i и/или j у матрицы – результата применения преобразования вращения (другие строки и столбцы при таком преобразовании не изменяются). Это осуществляется, условно говоря, выбором подходящего угла поворота α.

Зададим последовательность матриц Гивенса:

$$\mathbf{G}_1 := \mathbf{T}_{12}\ ,\ \ \mathbf{G}_2 := \mathbf{T}_{13}\ ,\ \dots ,\ \mathbf{G}_{n-1} := \mathbf{T}_{1n}\ . \tag{1.28}$$

С их помощью построим последовательность векторов:

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{G}_1\mathbf{x}\ ,\quad \mathbf{x}_2 = \mathbf{G}_2\mathbf{x}_1\ ,\ \dots,\ \mathbf{x}_{n-1} = \mathbf{G}_{n-1}\mathbf{x}_{n-2}\ , \tag{1.29}$$

начинающуюся с некоторого произвольно заданного вектора $\mathbf{x} := (x_1; x_2; \dots; x_n)^T$. При конкретизации матриц вращений $\mathbf{G}_i$ угол поворота α_i будем подбирать так, чтобы при этом преобразовании, называемом ***преобразованием Гивенса***, обращалась в нуль $(i+1)$-я компонента преобразуемого вектора. В итоге $n-1$ таких элементарных преобразований вектор $\mathbf{x}$ с ненулевой первой компонентой должен трансформироваться в вектор, коллинеарный первому орту $\mathbf{e}_1$ пространства $\mathbb{R}_n$ (как и в случае преобразований Хаусхолдера, описанных в предыдущем параграфе).

Итак, имеем:

$$\mathbf{x}_1 := \mathbf{G}_1\mathbf{x} = \begin{pmatrix} c_1 & s_1 & 0 & \cdots & 0 \\ -s_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1x_1 + s_1x_2 \\ -s_1x_1 + c_1x_2 \\ x_3 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} x_1^{(1)} \\ x_2^{(1)} \\ x_3 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

Наложим условие

$$-s_1x_1 + c_1x_2 = 0\,, \tag{1.30}$$

при котором $x_2^{(1)} = 0$ для любых фиксированных значений x_1, x_2. Если компонента x_2 вектора $\mathbf{x}$ равна нулю, то, очевидно, сразу можно принять $c_1 := 1$, $s_1 := 0$, т.е. этот шаг будет представлять собой тождественное преобразование $\mathbf{G}_1 := \mathbf{E}$. При $x_2 \neq 0$, рассматривая равенство (1.30) совместно с условием нормировки (1.26), находим

$$c_1 = \pm\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}\,, \qquad s_1 = \pm\frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}\,.$$

Это две пары (при соответствии верхних и нижних знаков) значений параметров c_1 и s_1, удовлетворяющих поставленным требованиям. Ограничимся фиксированием одной пары, отвечающей повороту на острый угол в положительном направлении:

$$c_1 := \frac{x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}\,, \qquad s_1 := \frac{x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}\,. \tag{1.31}$$

Следующий промежуточный вектор $\mathbf{x}_2$ получаем из вектора $\mathbf{x}_1$ с пересчитанной с помощью вычисленных по формулам (1.31) значений c_1 и s_1 компонентой $x_1^{(1)} := c_1 x_1 + s_1 x_2$. Имеем:

$$\mathbf{x}_2 := \mathbf{G}_2 \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} c_2 & 0 & s_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -s_2 & 0 & c_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1^{(1)} \\ 0 \\ x_3 \\ x_4 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_2 x_1^{(1)} + s_2 x_3 \\ 0 \\ -s_2 x_1^{(1)} + c_2 x_3 \\ x_4 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} x_1^{(2)} \\ 0 \\ x_3^{(2)} \\ x_4 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

Потребовав, чтобы $x_3^{(2)} = 0$, из системы

$$\begin{cases} -s_2 x_1^{(1)} + c_2 x_3 = 0, \\ s_2^2 + c_2^2 = 1 \end{cases}$$

аналогично предыдущему находим значения

$$c_2 = \frac{x_1^{(1)}}{\sqrt{(x_1^{(1)})^2 + x_3^2}}, \quad s_2 = \frac{x_3}{\sqrt{(x_1^{(1)})^2 + x_3^2}}$$

(или полагаем $c_2 := 1$, $s_2 := 0$, т.е. $\mathbf{G}_2 := \mathbf{E}$, если $x_3 = 0$).

На последнем, $(n-1)$-м шаге такого процесса будет получен вектор

$$\mathbf{x}_{n-1} := \mathbf{G}_{n-1} \mathbf{x}_{n-2} = \left(x_1^{(n-1)}; 0; \ldots; 0 \right)^T,$$

где $$c_{n-1} = \frac{x_1^{(n-2)}}{\sqrt{(x_1^{(n-2)})^2 + x_n^2}}, \qquad s_{n-1} = \frac{x_n}{\sqrt{(x_1^{(n-2)})^2 + x_n^2}},$$

$x_1^{(n-1)} = c_{n-1} x_1^{(n-2)} + s_{n-1} x_n$.

Как отмечалось ранее, произведение ортогональных матриц есть матрица ортогональная. Следовательно, преобразование вектора $\mathbf{x} := \left(x_1; x_2; \ldots; x_n\right)^T$ к виду $\mathbf{y} := \left(y_1; 0; \ldots; 0\right)^T = \mathbf{x}_{n-1}$ можно представить как $\mathbf{y} = \mathbf{Gx}$, где матрица $\mathbf{G}$ — произведение матриц элементарных вращений:

$$\mathbf{G} := \mathbf{G}_{n-1} \ldots \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 = \mathbf{T}_{1n} \ldots \mathbf{T}_{13} \mathbf{T}_{12}$$

является ортогональной.

Теперь рассмотрим применение описанной стратегии ортогональных преобразований вращения к произвольной вещественной матрице $\mathbf{A} := (a_{ij})_{i,\,j=1}^{n}$.

Придавая первому столбцу матрицы $\mathbf{A}$ статус вектора $\mathbf{x}$ в предыдущих рассуждениях и выкладках, определяющих формулы для подсчета значений параметров c и s матриц вращения, выполняем $n-1$ последовательных пересчетов элементов данной матрицы.

Именно, на первом шаге первого этапа получаем матрицу

$$\mathbf{A}^{(1)} := \mathbf{T}_{12}\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix},$$

в которой по сравнению с $\mathbf{A}$ изменения претерпели элементы только первых двух строк; очевидно, они должны быть пересчитаны по формулам

$$a_{1j}^{(1)} = c_1 a_{1j} + s_1 a_{2j} \quad (j = 1,\ldots,n), \tag{1.32}$$

$$a_{2j}^{(1)} = -s_1 a_{1j} + c_1 a_{2j} \quad (j = 2,\ldots,n), \tag{1.33}$$

где $c_1 = \dfrac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}{}^2 + a_{21}{}^2}}$, $s_1 = \dfrac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}{}^2 + a_{21}{}^2}}$

$$(c_1 := 1 ,\ s_1 := 0 ,\ \text{если}\ a_{21} = 0).$$

На втором шаге этого этапа имеем

$$\mathbf{A}^{(2)} := \mathbf{T}_{13}\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{T}_{13}\mathbf{T}_{12}\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & \cdots & a_{4n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix},$$

где

$$a_{1j}^{(2)} = c_2 a_{1j}^{(1)} + s_2 a_{3j} \quad (j = 1,\dots,n),$$
$$a_{3j}^{(1)} = -s_2 a_{1j}^{(1)} + c_2 a_{3j} \quad (j = 2,\dots,n),$$

$$c_2 = \frac{a_{11}^{(1)}}{\sqrt{(a_{11}^{(1)})^2 + a_{31}{}^2}}, \quad s_2 = \frac{a_{31}}{\sqrt{(a_{11}^{(1)})^2 + a_{31}{}^2}},$$

и т.д. Первый этап завершается на $(n-1)$-м шаге построением матрицы

$$\mathbf{A}^{(n-1)} := \mathbf{T}_{1n}\mathbf{A}^{(n-2)} = \mathbf{T}_{1n}\dots\mathbf{T}_{13}\mathbf{T}_{12}\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(n-1)} & a_{12}^{(n-1)} & \dots & a_{1n}^{(n-1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}.$$

Второй этап состоит в проведении аналогичных преобразований, производимых над финальной матрицей первого этапа $\mathbf{A}_1 := \mathbf{A}^{(n-1)}$. Цель преобразований этого этапа — создание нулей под вторым элементом главной диагонали. Роль элемента, стоящего в позиции (1, 1) и участвовавшего в процессе получения всех нулей в первом столбце, на втором этапе отдается элементу с индексами 2, 2. Следовательно, теперь нужно выстроить последовательность матриц элементарных вращений вида (1.25) так:

$$\mathbf{T}_{23}\ ,\ \mathbf{T}_{24}\ ,\ldots,\ \mathbf{T}_{2n}, \tag{1.34}$$

а угол поворота (а точнее, параметры c и s) подбирать, опираясь на элементы в позиции (2, 2). При этом первая строка преобразуемой матрицы больше изменяться не будет, поскольку строки и столбцы всех матриц (1.34), имеющие номер 1, являются единичными векторами. Таким образом, результатом второго этапа преобразований вращения, направленных на триангуляризацию данной квадратной матрицы $\mathbf{A}$, будет матрица вида

$$\mathbf{A}_2 := \begin{pmatrix} a_{11}^{(n-1)} & a_{12}^{(n-1)} & a_{13}^{(n-1)} & \cdots & a_{1n}^{(n-1)} \\ 0 & a_{22}^{(n-1)} & a_{23}^{(n-1)} & \cdots & a_{2n}^{(n-1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(2)} & \cdots & a_{4n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix},$$

которую можно рассматривать как результат преобразований

$$\mathbf{A}_2 := \mathbf{A}_1^{(n-2)} = \mathbf{T}_{2n}\ldots\mathbf{T}_{24}\mathbf{T}_{23}\mathbf{A}_1 =$$

$$= (\mathbf{T}_{2n}\ldots\mathbf{T}_{24}\mathbf{T}_{23})(\mathbf{T}_{1n}\ldots\mathbf{T}_{13}\mathbf{T}_{12})\mathbf{A}\,.$$

На следующем этапе с помощью матриц вращения $\mathbf{T}_{34}$, $\mathbf{T}_{35}, \ldots, \mathbf{T}_{3n}$ аналогично создаются нули под третьим диагональным элементом, и, наконец, на последнем, $(n-1)$-м этапе матрица $\mathbf{A}$ приводится к треугольному виду. Обозначим эту матрицу через $\mathbf{R}$. Ее выражение через элементы, верхние индексы которых отражают число шагов преобразований (пересчетов), таково:

$$\mathbf{R} := \mathbf{A}_{n-1} := \begin{pmatrix} a_{11}^{(n-1)} & a_{12}^{(n-1)} & \ldots & a_{1n}^{(n-1)} \\ 0 & a_{22}^{(n-1)} & \ldots & a_{2n}^{(n-1)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}.$$

Представление матрицы $\mathbf{R}$ через матрицы $\mathbf{T}_{ij}$ показывает порядок, в котором производят пересчеты элементов, если обратить внимание на связь индексов матриц вращений и нижних индексов элементов преобразуемых матриц:

$$\mathbf{R} = (\mathbf{T}_{n-1,n})(\mathbf{T}_{n-2,n}\mathbf{T}_{n-2,n-1})\ldots(\mathbf{T}_{2n}\ldots\mathbf{T}_{24}\mathbf{T}_{23})(\mathbf{T}_{1n}\ldots\mathbf{T}_{13}\mathbf{T}_{12})\mathbf{A} \qquad (1.35)$$

(в скобки заключены сомножители, соответствующие одному этапу описанных преобразований).

Из полученной триангуляризации (1.35) легко понять, что собой представляет $\mathbf{QR}$-разложение матрицы $\mathbf{A}$: очевидно, в силу свойств ортогональных матриц $\mathbf{T}_{ij}$ можно записать представление

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

где $\mathbf{Q} := (\mathbf{T}_{1n}\ldots\mathbf{T}_{13}\mathbf{T}_{12})^T(\mathbf{T}_{2n}\ldots\mathbf{T}_{24}\mathbf{T}_{23})^T\ldots(\mathbf{T}_{n-2,n}\mathbf{T}_{n-2,n-1})^T(\mathbf{T}_{n-1,n})^T$.

Замечание

Обратим внимание на следующий факт: ортогональное преобразование не изменяет длины преобразуемого вектора. Следовательно, в описанном процессе приведения произвольной матрицы $\mathbf{A}$ к треугольному виду $\mathbf{R}$ (отображенному формулой (1.35)) не может происходить совокупного роста элементов.

Пример. Построить QR-разложения для матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 5 \\ -2 & 0 & -3 \\ 2 & -1 & -7 \end{pmatrix}$$

Решение.

Для построения QR-разложения матрицы A с помощью вращений сначала матрицу A вращениями приведем к треугольному виду. Для этого начнем с получения нуля в позиции $(2, 1)$ с помощью матрицы вращения

$$T_{21} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Из равенства нулю элемента $\sin\varphi - 2\cos\varphi$ матрицы $T_{21}\,A$ в позиции $(2, 1)$ находим $\mathrm{tg}\varphi = 2$. Поэтому

$$\cos\varphi = \frac{1}{\sqrt{1+\mathrm{tg}^2\varphi}} = \frac{1}{\sqrt{5}}, \qquad \sin\varphi = \frac{\mathrm{tg}\,\varphi}{\sqrt{1+\mathrm{tg}^2\varphi}} = \frac{2}{\sqrt{5}}.$$

Следовательно,

$$T_{21} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} & 0 \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и $T_{21}\,A =$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} & 0 \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 5 \\ -2 & 0 & -3 \\ 2 & -1 & -7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{11}{\sqrt{5}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{7}{\sqrt{5}} \\ 2 & -1 & -7 \end{pmatrix}.$$

Возьмем теперь матрицу вращения

$$T_{31} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & 0 & -\sin\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{pmatrix}.$$

Как в предыдущем случае, из равенства нулю элемента матрицы $T_{31} T_{21} A$ в позиции $(3,1)$, т. е. из равенства $\frac{5}{\sqrt{5}} \sin\varphi + 2\cos\varphi = 0$, найдем $\operatorname{tg}\varphi = -\frac{2}{\sqrt{5}}$. Поэтому

$$\cos\varphi = \frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2\varphi}} = \frac{\sqrt{5}}{3}, \quad \sin\varphi = \frac{\operatorname{tg}\varphi}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2\varphi}} = -\frac{2}{3},$$

$$T_{31} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{5}}{3} & 0 & \frac{2}{3} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{2}{3} & 0 & \frac{\sqrt{5}}{3} \end{pmatrix}$$

и $T_{31}\ T_{21}\ A =$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{5}}{3} & 0 & \frac{2}{3} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{2}{3} & 0 & \frac{\sqrt{5}}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{5}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{11}{\sqrt{5}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{7}{\sqrt{5}} \\ 2 & -1 & -7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{7}{\sqrt{5}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{19}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}.$$

Наконец, применим матрицу вращения

$$T_{32} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & -\sin\varphi \\ 0 & \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}.$$

Как и в предыдущих случаях, из равенства нулю элемента матрицы $T_{32}\,T_{31}\,T_{21}\,A$ в позиции $(3,2)$, т. е. из равенства $-\dfrac{2}{\sqrt{5}}\sin\varphi - \dfrac{1}{\sqrt{5}}\cos\varphi = 0$, найдем $\operatorname{tg}\varphi = -\dfrac{1}{2}$.

Поэтому

$$\cos\varphi = \frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2\varphi}} = \frac{2}{\sqrt{5}}, \qquad \sin\varphi = \frac{\operatorname{tg}\varphi}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2\varphi}} = -\frac{1}{\sqrt{5}},$$

$$T_{32} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}$$

и $T_{32}\,T_{31}\,T_{21}\,A =$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{11}{\sqrt{5}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{7}{\sqrt{5}} \\ 2 & -1 & -7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -9 \end{pmatrix} = R\,.$$

Из равенства $T_{32}\,T_{31}\,T_{21}\,A = R$ получаем искомое QR-разложение $A = QR$, где

$$Q = T_{21}^{-1}\,T_{31}^{-1}\,T_{32}^{-1} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 2 & -2 \\ -2 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \qquad R = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -9 \end{pmatrix}.$$

Процесс ортогонализации Грама-Шмидта

От любой линейно независимой системы векторов $a_1, a_2, \ldots, a_k$ евклидова пространства можно перейти к ортогональной системе ненулевых векторов $b_1, b_2, \ldots, b_k$, состоящей также из k векторов. Такой переход совершается с помощью процесса **ортогонализации Грама–Шмидта:**

Положим $b_1 = a_1$, $b_2 = a_2 + \beta_{21} b_1$ и из условия

$$(b_2, b_1) = (a_2 + \beta_{21} b_1, b_1) = (a_2, b_1) + \beta_{21}(b_1, b_1) = 0$$

найдем коэффициент

$$\beta_{21} = -\frac{(a_2, b_1)}{(b_1, b_1)} = -\frac{(a_2, b_1)}{\left| b_1 \right|^2}.$$

Поэтому

$$b_2 = a_2 - \frac{(a_2, b_1)}{(b_1, b_1)} b_1 = a_2 - \frac{(a_2, b_1)}{\left| b_1 \right|^2} b_1.$$

Пусть уже построена таким способом система попарно ортогональных векторов $b_1, b_2, \ldots, b_{i-1}$. Тогда положим

$$b_i = a_i + \beta_{i1} b_1 + \beta_{i2} b_2 + \ldots + \beta_{i,\, i-1} b_{i-1} \qquad (1)$$

и из условий

$$(b_i, b_j) = (a_i, b_j) + \beta_{ij}(b_j, b_j) = 0, \quad j = 1, 2, \ldots, i-1,$$

найдем коэффициенты

$$\beta_{ij} = -\frac{(a_i, b_j)}{(b_j, b_j)} = -\frac{(a_i, b_j)}{\left| b_j \right|^2}, \quad j = 1, 2, \ldots, i-1. \qquad (2)$$

Поэтому равенство (1) примет вид

$$b_i = a_i - \frac{(a_i, b_1)}{(b_1, b_1)} b_1 - \ldots - \frac{(a_i, b_{i-1})}{(b_{i-1}, b_{i-1})} b_{i-1} =$$

$$= a_i - \frac{(a_i, b_1)}{\left| b_1 \right|^2} b_1 - \ldots - \frac{(a_i, b_{i-1})}{\left| b_{i-1} \right|^2} b_{i-1}. \qquad (3)$$

Так будем продолжать до тех пор, пока не построим систему попарно ортогональных векторов $b_1, b_2, \ldots, b_k$.

Пример Применяя процесс ортогонализации и нормирование векторов, ортонормировать систему векторов

$$a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad a_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad a_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad a_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

считая, что в четырехмерном евклидовом пространстве скалярное произведение определено стандартным образом.

Решение. Положим $b_1 = a_1 = (1, 1, 0, 0)^{\mathrm{T}}$. В соответствии с формулой (3) находим

$$b_2 = a_2 - \frac{(a_2, b_1)}{\left| b_1 \right|^2} b_1 = a_2 - \frac{1}{2} b_1 =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Далее находим b_3:

$$b_3 = a_3 - \frac{(a_3, b_1)}{\left| b_1 \right|^2} b_1 - \frac{(a_3, b_2)}{\left| b_2 \right|^2} b_2 =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 \\ -1/3 \\ -1/3 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Наконец, вычисляем b_4 :

$$b_4 = a_4 - \frac{(a_4, b_1)}{\left|b_1\right|^2} b_1 - \frac{(a_4, b_2)}{\left|b_2\right|^2} b_2 - \frac{(a_4, b_3)}{\left|b_3\right|^2} b_3 =$$

$$= a_4 - 0 \cdot b_1 - 0 \cdot b_2 - \frac{3}{4} b_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1/3 \\ -1/3 \\ -1/3 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}.$$

Нормируя векторы b_1, b_2, b_3, b_4, придем к ортонормированной системе векторов

$$q_1 = \frac{b_1}{\left|b_1\right|} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}},\ \frac{1}{\sqrt{2}},\ 0,\ 0 \right)^{\mathrm{T}},$$

$$q_2 = \frac{b_2}{\left|b_2\right|} = \left(\frac{1}{\sqrt{6}},\ -\frac{1}{\sqrt{6}},\ \frac{2}{\sqrt{6}},\ 0 \right)^{\mathrm{T}},$$

$$q_3 = \frac{b_3}{\left|b_3\right|} = \left(\frac{\sqrt{3}}{6},\ -\frac{\sqrt{3}}{6},\ -\frac{\sqrt{3}}{6},\ \frac{\sqrt{3}}{2} \right)^{\mathrm{T}},$$

$$q_4 = \frac{b_4}{\left|b_4\right|} = \left(-\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2} \right)^{\mathrm{T}}.$$