Optimalizace

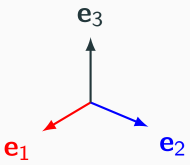
3. Ortogonální matice

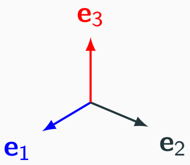
Tomáš Kroupa Tomáš Werner

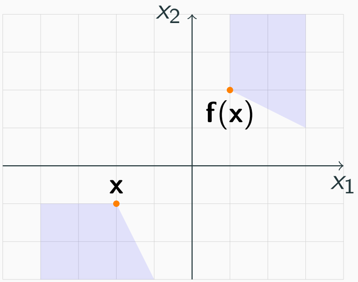
2021 LS

Fakulta elektrotechnická
ČVUT v Praze

Co mají společného tato lineární zobrazení?







Eukleidovský prostor $\mathbb{R}^n$

- Standardní skalární součin

$$\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{y} = x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n$$

- Eukleidovská norma

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^T\mathbf{x}} = \sqrt{x_1^2 + \cdots + x_n^2}$$

- Eukleidovská metrika

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$$

Definice

Ortogonální vektory $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ splňují $\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{y} = 0$. Píšeme $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$.

Ortonormální množina vektorů

Ortonormální množina vektorů $\{\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_n\}$ splňuje

$$\mathbf{u}_i^\mathsf{T}\mathbf{u}_j = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases} \qquad i, j = 1, \ldots, n$$

Důležité postřehy

- Ortonormální množina je lineárně nezávislá
- Souřadnice vektoru $\mathbf{x} \in \operatorname{span}\{\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_n\}$ v ortonormální bázi $\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_n$ se spočítají snadno:

$$\mathbf{x} = (\mathbf{u}_1^\mathsf{T}\mathbf{x})\mathbf{u}_1 + \cdots + (\mathbf{u}_n^\mathsf{T}\mathbf{x})\mathbf{u}_n$$

Matice s ortonormálními sloupci

Matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ má ortonormální sloupce, pokud splňuje

$$\mathbf{U}^\mathsf{T}\mathbf{U} = \mathbf{I}.$$

Základní vlastnosti

Lineární zobrazení $\mathbf{f}\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ definované jako $\mathbf{f}(\mathbf{x}) := \mathbf{U}\mathbf{x}$ je tzv. izometrie (zachovává skalární součin a délky vektorů):

1. $(\mathbf{U}\mathbf{x})^\mathsf{T}(\mathbf{U}\mathbf{y}) = \mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{y}$
2. $\|\mathbf{U}\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|$

Ortogonální matice

Definice

Ortogonální matice je matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ s ortonormálními sloupci.

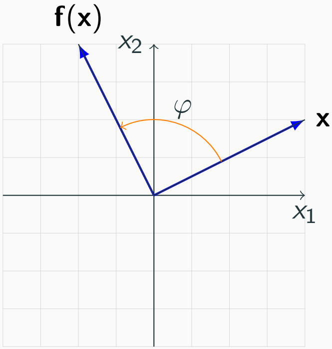
Ekvivalentně:

1. $\mathbf{U}^\mathsf{T} = \mathbf{U}^{-1}$
2. $\mathbf{U}\mathbf{U}^\mathsf{T} = \mathbf{I}$
3. $\mathbf{U}$ má ortonormální řádky
4. $\mathbf{U}^\mathsf{T}$ je ortogonální matice

Rotační matice v $\mathbb{R}^2$

Rotace vektoru kolem počátku o úhel φ proti směru hodinových ručiček je vyjádřena maticí

$$\begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix}$$



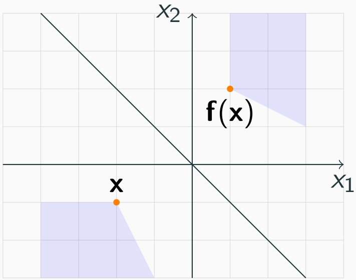
$$\varphi = \frac{\pi}{2}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Matice zrcadlení v $\mathbb{R}^2$

Zrcadlení (reflexe) vektoru v $\mathbb{R}^2$ podle přímky procházející počátkem a směrnicí $\tan(\frac{\varphi}{2})$ je vyjádřeno maticí

$$\begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ \sin\varphi & -\cos\varphi \end{bmatrix}$$



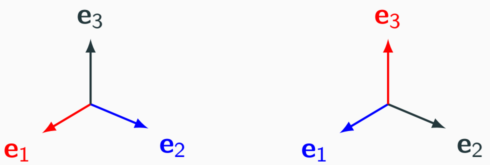
$$\tan(\tfrac{\varphi}{2}) = -1, \quad \varphi = \tfrac{3}{2}\pi$$

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

Permutační matice v $\mathbb{R}^3$

Permutační matice je matice, jejíž sloupce jsou permutované vektory standardní báze. Např.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{e}_3 & \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$



Proč jsou ortogonální matice preferovány ve výpočtech?

Princip

Výstup numerického algoritmu by neměl být zatížen dodatečnou neurčitostí nad neurčitost vstupních dat.

- Ortogonální matice $\mathbf{U}$ zachovává chyby na vstupu
- Pokud je přesná hodnota $\mathbf{x} = \mathbf{x}' + \mathbf{e}$, kde $\mathbf{x}'$ je přibližně spočítaná hodnota a $\mathbf{e}$ je chyba, pak

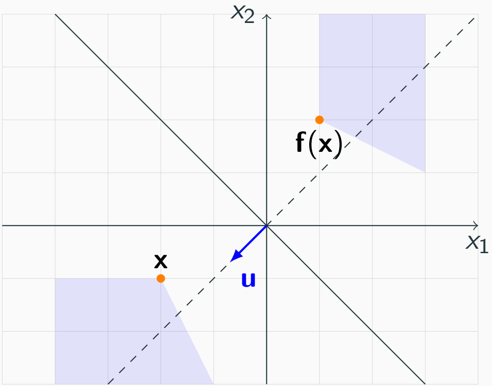
$$\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{U}(\mathbf{x}' + \mathbf{e}) = \mathbf{U}\mathbf{x}' + \mathbf{U}\mathbf{e}$$

- Velikost chyby zůstane stejná, protože $\|\mathbf{U}\mathbf{e}\| = \|\mathbf{e}\|$

Householderova matice

Zrcadlení podle nadroviny procházející počátkem s normálovým jednotkovým vektorem $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ reprezentuje Householderova matice

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



QR rozklad – plná verze

Věta

Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ existuje

- ortogonální matice $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ a
- horní trojúhelníková matice $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ splňující

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

- Jeden z algoritmů na výpočet QR rozkladu je založen na iterativní aplikaci Householderových reflexí
- QR rozklad nemusí být jednoznačný

QR rozklad – příklady

QR rozklad jedné regulární matice

$$\begin{bmatrix} 0 & -20 & -14 \\ 3 & 27 & -4 \\ 4 & 11 & -2 \end{bmatrix} = \frac{1}{25} \begin{bmatrix} 0 & -20 & -15 \\ 15 & 12 & -16 \\ 20 & -9 & 12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 25 & -4 \\ 0 & 25 & 10 \\ 0 & 0 & 10 \end{bmatrix}$$

QR rozklad matice s LN sloupci

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 4 \\ 1 & 4 & -2 \\ 1 & 4 & 2 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 3 & 2 \\ 0 & 5 & -2 \\ 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

QR rozklad – redukovaná verze pro $m > n$

Vynecháme posledních $m - n$ nulových řádků matice $\mathbf{R}$, posledních $m - n$ sloupců matice $\mathbf{Q}$ a dostaneme $\mathbf{A} = \mathbf{Q}'\mathbf{R}'$:

- matice $\mathbf{Q}' \in \mathbb{R}^{m \times n}$ má ortonormální sloupce
- čtvercová matice $\mathbf{R}' \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je horní trojúhelníková

Redukovaný QR rozklad matice s LN sloupci

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 4 \\ 1 & 4 & -2 \\ 1 & 4 & 2 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 3 & 2 \\ 0 & 5 & -2 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

Jednoznačnost redukovaného QR rozkladu

Tvrzení

Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ s LN sloupci, kde $m \geq n$, existuje jediná dvojice matic $\mathbf{Q}$ a $\mathbf{R}$ taková, že $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$, přičemž

- $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ má ortonormální sloupce a
- $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je horní trojúhelníková matice s kladnými prvky na diagonále.

Ortogonalizace pomocí redukovaného QR rozkladu

Hledáme ortonormální bázi prostoru $\operatorname{span}\{\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n\}$:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \ldots & \mathbf{a}_n \end{bmatrix} = \mathbf{QR}$$

kde matice $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ má ortonormální sloupce a matice $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je horní trojúhelníková a regulární.

Proč to funguje?

- Díky regularitě $\mathbf{R}$ platí $\operatorname{rng} \mathbf{QR} = \operatorname{rng} \mathbf{Q}$
- Tedy sloupce $\mathbf{Q}$ tvoří ortonormální bázi pro $\operatorname{span}\{\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n\}$

Řešíme soustavu lineárních rovnic pomocí QR rozkladu

Řešíme soustavu $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ pomocí plného QR rozkladu $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{1}$$
$$\mathbf{Q}\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{2}$$
$$\mathbf{Q}^{\mathsf{T}}\mathbf{Q}\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{Q}^{\mathsf{T}}\mathbf{b} \tag{3}$$
$$\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{Q}^{\mathsf{T}}\mathbf{b} \tag{4}$$

Proč to funguje?

- Soustava (4) je snadno řešitelná zpětnou substitucí
- Násobení regulární maticí $\mathbf{Q}^{\mathsf{T}}$ zleva je ekvivalentní úprava
- QR rozklad je numericky stabilní

Reference

- T. Werner. *Optimalizace* (kapitola 4). Elektronická skripta. FEL ČVUT, 2020.
- C. D. Meyer. *Matrix analysis and applied linear algebra.* SIAM, 2000.
- J.D. Tebbens, I. Hnětynková, M. Plešinger, Z. Strakoš, P. Tichý. *Analýza metod pro maticové výpočty.* Matfyzpress, 2012.