Optimalizace

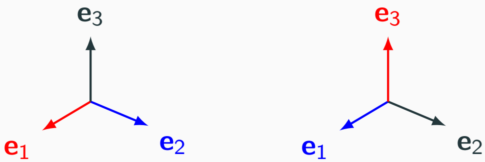
3. Ortogonální matice

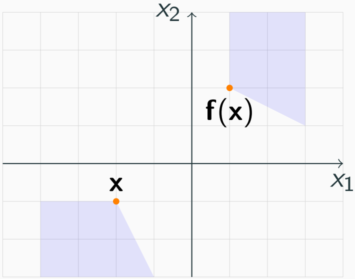
Tomáš Kroupa Tomáš Werner

2022 LS

Fakulta elektrotechnická
ČVUT v Praze

Co mají společného tato lineární zobrazení?





Ortogonalita

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

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

- Eukleidovská metrika

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

Cauchyho-Schwarzova a trojúhelníková nerovnost

$$|\mathbf{x}^{\mathsf{T}}\mathbf{y}| \leq \|\mathbf{x}\|\|\mathbf{y}\| \qquad \|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$$

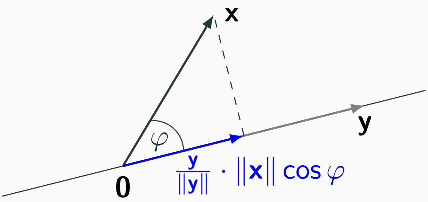
Úhel mezi dvěma vektory

Úhel mezi nenulovými vektory $\mathbf{x}$ a $\mathbf{y}$ je číslo $\varphi \in [0, \pi]$ splňující

$$\cos\varphi = \frac{\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\|\,\|\mathbf{y}\|}.$$

Geometrický význam skalárního součinu $\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{y} = \|\mathbf{x}\|\,\|\mathbf{y}\|\cos\varphi$

Číslo $\|\mathbf{x}\|\cos\varphi$ je orientovaná délka pravoúhlého průmětu vektoru $\mathbf{x}$ na přímku $\operatorname{span}\{\mathbf{y}\}$



Speciálně: pokud $\|\mathbf{y}\| = 1$, ten průmět je vektor $(\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{y})\mathbf{y}$.

Ortogonální vektory

Vektory $\mathbf{x}$ a $\mathbf{y}$ jsou ortogonální (píšeme $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$) pokud $\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{y} = 0$.

Vektory $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_k$ jsou ortogonální pokud $\mathbf{x}_i \perp \mathbf{x}_j$ pro $i \neq j$.

Speciálně: $\mathbf{0} \perp \mathbf{x}$ pro každý vektor $\mathbf{x}$.

Pythagorova věta

Pro vektory $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ platí:

$$\mathbf{x} \perp \mathbf{y} \qquad \Leftrightarrow \qquad \|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|^2 = \|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2.$$

Ortonormální vektory

Ortogonální vektory $\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_k$ jsou ortonormální pokud splňují $\|\mathbf{u}_1\| = \cdots = \|\mathbf{u}_k\| = 1$.

Důležitá fakta

- Ortonormální vektory jsou lineárně nezávislé
- Tedy tvoří tzv. ortonormální bázi
- Fourierovy koeficienty jsou souřadnice vektoru $\mathbf{x} \in \operatorname{span}\{\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_k\}$ v této bázi a platí

$$\mathbf{x} = (\mathbf{u}_1^\top \mathbf{x})\mathbf{u}_1 + \cdots + (\mathbf{u}_k^\top \mathbf{x})\mathbf{u}_k$$

Pozorování: vektor $(\mathbf{u}_i^\top \mathbf{x})\mathbf{u}_i$ je pravoúhlý průmět $\mathbf{x}$ na $\operatorname{span}\{\mathbf{u}_i\}$

Matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ s ortonormálními sloupci

- Ekvivalentně: $\mathbf{U}^\mathsf{T}\mathbf{U} = \mathbf{I}$
- Nutně platí $m \geq n$ díky lineární nezávislosti sloupců

Tvrzení

Uvažujme lineární zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}\mathbf{x}$. Potom $\mathbf{f}$ zachovává:

1. skalární součin, $\mathbf{f}(\mathbf{x})^\mathsf{T}\mathbf{f}(\mathbf{y}) = \mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{y}$,
2. délku vektorů, $\|\mathbf{f}(\mathbf{x})\| = \|\mathbf{x}\|$,
3. úhel mezi nenulovými vektory.

Lineární zobrazení $\mathbf{f}$ splňující $\|\mathbf{f}(\mathbf{x})\| = \|\mathbf{x}\|$ je lineární izometrie.

Ortogonální matice

Definice

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

Následující vlastnosti čtvercové matice $\mathbf{U}$ jsou ekvivalentní:

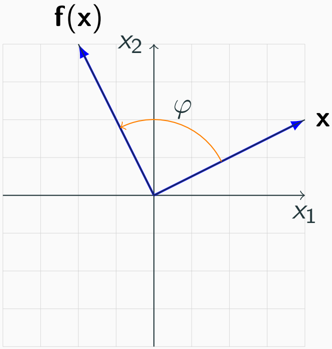
1. $\mathbf{U}$ je ortogonální
2. $\mathbf{U}^\mathsf{T} = \mathbf{U}^{-1}$
3. $\mathbf{U}\mathbf{U}^\mathsf{T} = \mathbf{I}$
4. $\mathbf{U}$ má ortonormální řádky
5. $\mathbf{U}^\mathsf{T}$ je ortogonální

Příklady ortogonálních matic

Rotační matice v $\mathbb{R}^2$

Rotace $\mathbf{f}$ vektoru v rovině kolem počátku o úhel φ proti směru hodinových ručiček je vyjádřena maticí

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



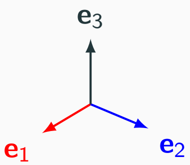
$$\varphi = \frac{\pi}{2}$$

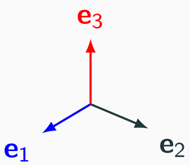
$$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Permutační matice v $\mathbb{R}^n$

Permutační matice je matice, jejíž sloupce jsou permutované vektory standardní báze. Např. v $\mathbb{R}^3$ máme

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

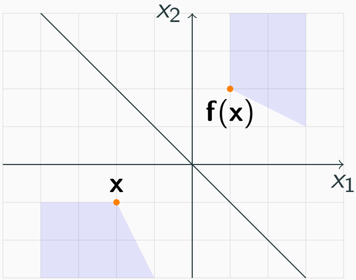




Matice zrcadlení v $\mathbb{R}^2$

Zrcadlení (reflexe) $\mathbf{f}$ vektoru v rovině kolem přímky procházející počátkem a směrnicí $\tan(\frac{\varphi}{2})$ je vyjádřeno maticí

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



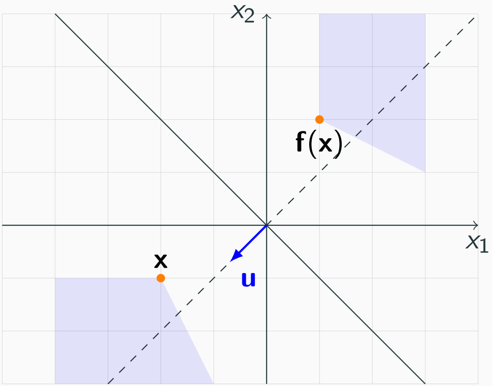
$$\tan(\tfrac{\varphi}{2}) = -1, \quad \varphi = \tfrac{3}{2}\pi$$

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

Householderova matice

Zrcadlení v $\mathbb{R}^n$ kolem nadroviny s jednotkovou normálou $\mathbf{u}$ procházející počátkem vyjadřuje matice

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



QR rozklad a jeho aplikace

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 $\|\mathbf{U}\mathbf{e}\| = \|\mathbf{e}\|$

Gram-Schmidtova ortogonalizace

Pro dané lineárně nezávislé vektory $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^m$ nalezneme vektory $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n \in \mathbb{R}^m$ takové, že

1. $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n$ jsou ortonormální a
2. platí $\operatorname{span}\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k\} = \operatorname{span}\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k\}$ pro každé $k \leq n$.

Algoritmus

- $\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{a}_1}{\|\mathbf{a}_1\|}$
- Pro $k = 2, \dots, n$ spočti

$$\mathbf{q}'_k = \mathbf{a}_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{q}_i^\mathsf{T} \mathbf{a}_k) \mathbf{q}_i \qquad \text{a} \qquad \mathbf{q}_k = \frac{\mathbf{q}'_k}{\|\mathbf{q}'_k\|}$$

QR rozklad matice s plnou sloupcovou hodností

QR rozklad je v tomto případě jen maticová formulace Gram-Schmidtovy ortogonalizace:

Tvrzení

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

- matice $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ s ortonormálními sloupci a
- horní troj. matice $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ s kladnou diagonálou splňující

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

- Tento QR rozklad je pro takovou matici jednoznačně určen
- Sloupce matice $\mathbf{Q}$ tvoří ortonormální bázi pro $\operatorname{rng} \mathbf{A}$

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 troj. matice $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ s nezápornou diagonálou splňující

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

- Tento QR rozklad nemusí být jednoznačný
- Numericky stabilní výpočet QR rozkladu je založen na iterativní aplikaci Householderových reflexí

Plná verze QR rozkladu – příklady

Jedné regulární matice

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

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

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

Řešíme soustavu lineárních rovnic pomocí QR rozkladu

Řešíme soustavu $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ pomocí plného QR rozkladu $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \tag{1}$$

$$\mathbf{QRx} = \mathbf{b} \tag{2}$$

$$\mathbf{Q}^\mathsf{T}\mathbf{QRx} = \mathbf{Q}^\mathsf{T}\mathbf{b} \tag{3}$$

$$\mathbf{Rx} = \mathbf{Q}^\mathsf{T}\mathbf{b} \tag{4}$$

Proč to funguje?

- Násobení ortogonální maticí $\mathbf{Q}^\mathsf{T}$ zleva je ekvivalentní úprava
- Soustava (4) je snadno řešitelná zpětnou substitucí
- Existují numericky stabilnější a přesnější implementace QR rozkladu oproti rychlejší Gaussově eliminaci

QR rozklad a rozšíření na ortonormální bázi

Pro zadaný vektor jednotkové délky $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$ chceme nalézt ortogonální matici $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, jejíž první sloupec je $\mathbf{a}$.

Řešení

- Plný QR rozklad $\mathbf{a} = \mathbf{Q}\mathbf{r}$, kde $\mathbf{r} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \ldots 0 \end{bmatrix}^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ je horní trojúhelníková matice s nezápornou diagonálu
- Z toho odvodíme $\alpha = 1$
- Sloupce $\mathbf{Q}$ představují hledané rozšíření na ortonorm. bázi