Ortogonální projekce, ortogonalizace

Petr Olšák

petr@olsak.net

http://petr.olsak.net/

Ortogonální projekce vektoru do $\operatorname{rng}\mathbf{U}$

Na tomto slide $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ značí matici s **ortonormálními sloupci**.

- **Tvrzení:** Nechť $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ je libovolný vektor. Pak vektor $\mathbf{x} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T\mathbf{z}$ leží v $\operatorname{rng}\mathbf{U}$ a má ze všech prvků z $\operatorname{rng}\mathbf{U}$ nejkratší vzdálenost od vektoru $\mathbf{z}$. Takže $(\mathbf{x} - \mathbf{z}) \perp \operatorname{rng}\mathbf{U}$.
- Vektor $\mathbf{x}$ z předchozího bodu je tedy řešením optimalizační úlohy

$$\min\{\|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|;\ \mathbf{x} \in \operatorname{rng}\mathbf{U}\}$$

  a nazýváme ho ortogonální projekce vektoru $\mathbf{z}$ do $\operatorname{rng}\mathbf{U}$
- Souřadnice projekce vzhledem k bázi $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_k$ (sloupce matice $\mathbf{U}$) najdeme ve vektoru $\mathbf{U}^T\mathbf{z}$, tedy jsou to čísla $\mathbf{u}_1^T\mathbf{z},\ \mathbf{u}_2^T\mathbf{z},\ \ldots,\ \mathbf{u}_k^T\mathbf{z}$.
- Matici $\mathbf{U}\mathbf{U}^T$ nazýváme ortogonální projektor do $\operatorname{rng}\mathbf{U}$, protože zobrazení $f\colon \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ definované předpisem $\mathbf{f}(\mathbf{z}) = (\mathbf{U}\mathbf{U}^T)\,\mathbf{z}$ je projekce do $\operatorname{rng}\mathbf{U}$, která promítá na $\operatorname{rng}\mathbf{U}$ své vzory kolmo.
- Obecná lineární projekce je zobrazení $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{P}\mathbf{x}$, kde matice $\mathbf{P}$ má vlastnost idempotence: $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$. Ortogonální projektor je navíc symetrická matice, $\mathbf{P} = \mathbf{P}^T$.

Ortogonální rejekce

I na tomto slide $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ značí matici s **ortonormálními sloupci**.

- Tvrzení: Označme $X = (\operatorname{rng} \mathbf{U})^\perp$. Nechť $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ je libovolný vektor. Pak vektor $\mathbf{y} = (\mathbf{I} - \mathbf{U}\mathbf{U}^T)\,\mathbf{z}$ leží v X a má ze všech prvků z X nejkratší vzdálenost od vektoru $\mathbf{z}$. Takže $(\mathbf{y} - \mathbf{z}) \perp X$, neboli $(\mathbf{y} - \mathbf{z}) \in \operatorname{rng} \mathbf{U}$.
- Vektoru $\mathbf{y}$ z předchozího bodu říkáme ortogonální rejekce.
- Pro každý vektor $\mathbf{z}$ platí, $\mathbf{z} = \mathbf{x} + \mathbf{y}$, kde $\mathbf{x}$ je ortogonální projekce $\mathbf{z}$ na $\operatorname{rng} \mathbf{U}$ a $\mathbf{y}$ je odpovídající rejekce.
- Velikost rejekce je rovna vzdálenosti $\mathbf{z}$ od $\operatorname{rng} \mathbf{U}$, tedy $\|\mathbf{y}\| = \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|$.

Příklady

Projekce na podprostor dimenze 1

Podprostor dimenze 1 je přímka $\mathrm{Span}\{\mathbf{a}\}$, kde $\mathbf{a}$ je nenulový směrový vektor přímky. Vytvoříme jednosloupcovou matici $\mathbf{U} = \frac{1}{\|\mathbf{a}\|}[\mathbf{a}]$. Ta obsahuje ve svém sloupci ortonormální bázi, projekci lze pak spočítat:

$$\mathbf{x} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T\mathbf{z} = \frac{1}{\|\mathbf{a}\|^2}\,\mathbf{a}\,(\mathbf{a}^T\mathbf{z}) = \frac{\mathbf{a}^T\mathbf{z}}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}}\,\mathbf{a}$$

Totéž plyne přímo z geometrické vlastnosti skalárního součinu.

Příklady

Projekce na podprostor dimenze 1

Podprostor dimenze 1 je přímka $\mathrm{Span}\{\mathbf{a}\}$, kde $\mathbf{a}$ je nenulový směrový vektor přímky. Vytvoříme jednosloupcovou matici $\mathbf{U} = \frac{1}{\|\mathbf{a}\|}[\mathbf{a}]$. Ta obsahuje ve svém sloupci ortonormální bázi, projekci lze pak spočítat:

$$\mathbf{x} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T\mathbf{z} = \frac{1}{\|\mathbf{a}\|^2}\,\mathbf{a}\,(\mathbf{a}^T\mathbf{z}) = \frac{\mathbf{a}^T\mathbf{z}}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}}\,\mathbf{a}$$

Totéž plyne přímo z geometrické vlastnosti skalárního součinu.

Vzdálenost bodu $\mathbf{z}$ od afinního prostoru $\mathbf{U}^T\mathbf{x} = \mathbf{b}$

Předpokládáme matici $\mathbf{U}$ s ortonormálními sloupci. Vezmeme nějaké partikulární řešení $\mathbf{p}$, pro které je $\mathbf{U}^T\mathbf{p} = \mathbf{b}$ a hledanou vzdálenost spočítáme jako vzdálenost projekce $\mathbf{z}$ od projekce $\mathbf{p}$. Tedy:

$$d = \|\mathbf{U}\mathbf{U}^T\mathbf{z} - \mathbf{U}\mathbf{U}^T\mathbf{p}\| = \|\mathbf{U}\mathbf{U}^T\mathbf{z} - \mathbf{U}\mathbf{b}\| = \|\mathbf{U}(\mathbf{U}^T\mathbf{z} - \mathbf{b})\| = \|\mathbf{U}^T\mathbf{z} - \mathbf{b}\|.$$

Poslední rovnost plyne z faktu, že $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{U}\mathbf{x}$ je isometrie.

Gram-Schmidtova ortogonalizace

Ke každé bázi $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_k$ nějakého podprostoru existuje ortonormální báze stejného podprostoru $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_k$, pro kterou platí:

$$\mathrm{Span}\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_i\} = \mathrm{Span}\{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_i\} \quad \forall\, i = \{1, 2, \ldots, k\}. \tag{1}$$

- Cílovou bázi $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_k$ můžeme vnímat jako modifikaci zadané báze „v mezích mírného pokroku“ s požadavkem, aby cílová báze byla ortonormální.
- Toto tvrzení je geometricky velmi názorné.
- Postup sestavení báze $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_k$ může být následující:
  - $\mathbf{q}_1$ je normalizovaný $\mathbf{a}_1$.
  - Pro $i > 1$ najdeme kolmou projekci $\mathbf{x}_i$ vektoru $\mathbf{a}_i$ do $\mathrm{Span}\{\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_{i-1}\}$ a dále spočítáme rejekci $\mathbf{q}_i' = \mathbf{a}_i - \mathbf{x}_i$, konečně $\mathbf{q}_i$ je normalizovaný $\mathbf{q}_i'$.
  - Vzoreček pro výpočet projekce $\mathbf{x}_i$ přitom známe z předchozího:

$$\mathbf{x}_i = \sum_{j=1}^{i-1} (\mathbf{q}_j^T \mathbf{a}_i)\, \mathbf{q}_i$$

Protože $\mathbf{q}_i = \mathrm{LK}(\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_{i-1}, \mathbf{a}_i)$, platí pravidlo (1) o obalech.

QR rozklad

QR rozklad není nic jiného, než Gram-Schmidtova ortogonalizace vyjádřená maticovým násobením. Předpokládejme, že $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n]$ je matice s lineárně nezávislými sloupci.

Redukovaný QR rozklad

- Pro matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ existuje $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ s ortonormálními sloupci a $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ horní trojúhelníková tak, že $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$.

  Pozorování: Matice $\mathbf{Q}$ obsahuje ve sloupcích bázi $\mathbf{q}_i$ z Gram-Schmidtovy ortogonalizace báze $\mathbf{a}_i$. Matice $\mathbf{R}$ obsahuje souřadnice vektorů $\mathbf{a}_i$ vzhledem k bázi $\mathbf{q}_j$, viz též pravidlo lineárních obalů (1).

Plný QR rozklad

- Pro $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ existuje $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ ortogonální a $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ horní trojúhelníková tak, že $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$.

  Na rozdíl od předchozího je $\mathbf{Q}$ rozšířena o sloupce s bází ortogonálního doplňku podprostoru $\mathrm{Span}\{\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n\}$ a $\mathbf{R}$ má dolní řádky zcela nulové.

QR rozklad, poznámky

- QR rozklad matice s LN sloupci (ani redukovaný) není jednoznačný: každý jednotlivý sloupec matice $\mathbf{Q}$ může být vynásoben číslem -1 a dostáváme rovněž QR rozklad.
- Při požadavku na kladná čísla na diagonále matice $\mathbf{R}$ je redukovaný QR rozklad matice s LN sloupci již jednoznačný.
- Úplný QR rozklad zobrazí v pravém bloku matice $\mathbf{Q}$ (ve sloupcích $n+1, \ldots, m$) ortonormální bázi řešení soustavy $\mathbf{A}^T\mathbf{x} = \mathbf{0}$ jako „vedlejší efekt výpočtu".
- Jsou-li sloupce matice $\mathbf{A}$ lin. závislé, pak sloupcům, které jsou lineární kombinací předchozích odpovídají nuly v matici $\mathbf{R}$, tj. rozklad také existuje.
- Je-li $\mathbf{A}$ čtvercová, pak $\det \mathbf{A} = \pm \det \mathbf{R}$, protože $\det \mathbf{Q} = \pm 1$. Přitom $\det \mathbf{R}$ spočítáme levně jako součin diagonálních prvků.
- V Matlabu spočítáme úplný QR rozkad pomocí `[Q R] = qr(A)` a redukovaný pomocí `[Q R] = qr(A,0)`.
- Algoritmus na QR rozkad implementovaný v počítačových systémech se opírá obvykle o Householderovy matice a nekopíruje postup při Gram-Schmidtově ortogonalizaci.

Řešení soustav $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ QR rozkladem

Nechť $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ je plný QR rozklad matice $\mathbf{A}$. Pak můžeme řešit soustavu $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ takto:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}\,\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\
\mathbf{Q}\,\mathbf{R}\,\mathbf{x} &= \mathbf{b} \\
\mathbf{Q}^T\mathbf{Q}\,\mathbf{R}\,\mathbf{x} &= \mathbf{Q}^T\mathbf{b} \\
\mathbf{R}\,\mathbf{x} &= \mathbf{Q}^T\mathbf{b}
\end{aligned}
$$

- Soustavu $\mathbf{Rx} = \mathbf{c}$ můžeme řešit zpětnou substitucí.
- Numerická implemetace QR rozkladu je stabilnější než Gaussova eliminace.