

Hinatori8

2026 年 1 月 3 日

## 2. QR Factorization and Least Squares

### 2.1 Projectors

#### Projectors

$v \in \text{range}(P)$  の場合、 $v$  は自分自身の影の上にあることになる。Mathematically,... は、 $v \in \text{range}(P)(v = Px)$  であるならば、もう一度射影しても何も変わらない ( $Pv = P^2x = v$ )

#### Complementary Projectors

$$(I - P)^2 = I - P$$

は projector  $P$  が満たす、 $P^2 = P$  を満たすため、 $I - P$  も射影である。

Given  $v$ , find vectors  $v_1 \in S_1$  and  $v_2 \in S_2$  such that  $v_1 + v_2 = v$  で、

$$(Pv + v_3) + ((I - P)v - v_3) = v$$

を考える。 $v_1 + v_2 = v$  との比較より、

$$Pv + v_3 \in S_1, \quad (I - P)v - v_3 \in S_2$$

を満たす。つまり、 $v$  を分解したベクトル  $v_1, v_2$  から  $v_3$  だけズレた場合を考えている。しかし、

$$\text{range}(P) = S_1, \text{ null}(P) = S_2 \implies \text{range}(P) \cap \text{null}(P) = \{0\}$$

であるから、 $v_3 = 0$  に違いない。これは、

$$v = v_1 + v_2$$

は一意に定まるという意味である。

射影行列  $P$  が直交射影であるならば、 $P = P^*$  となる。この時、

$$\text{range}(P) \perp \text{range}(I - P) (= \text{null}(P))$$

つまり、直交直和に分解ができるため、

$$\mathbb{F}^n = \text{range}(P) \oplus \text{null}(P)$$

でもある。

## Projectors with an Orthonormal Basis

orthogonal Projectors に対して、Full で特異値分解を行うと、

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ & & & 0 & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (= Q^* P Q)$$

となるので、Reduced で行くと、

$$P = \hat{Q} \hat{Q}^* \quad (\Sigma = I)$$

$C^m$  の正規直交基底  $q_j$  を列ベクトルに持つ行列  $\hat{Q}$  である。この  $\hat{Q}$  は SVD を用いなくても自然に現れる。直交射影  $P$  は

1.  $P^2 = P$
2.  $P^* = P$

を満たす。この  $\hat{Q} \hat{Q}^*$  はそれを満たすため、直交射影である。

$\hat{Q}$  の列が正規直交であるならば、 $\hat{Q} \hat{Q}^*$  は必ず  $\text{range}(\hat{Q})$  への直交射影を行う。

これを示したい。

■ 方針 次の 2 つを示せば良い

1.  $\hat{Q} \hat{Q}^* v \in \text{range}(\hat{Q})$
2.  $y^*(v - \hat{Q} \hat{Q}^* v) = 0$  for  $y \in \text{range}(\hat{Q})$

1.

$$\hat{Q} \hat{Q}^* = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_n \\ | & | & & | \end{bmatrix} \begin{bmatrix} - & q_1^* & - \\ - & q_2^* & - \\ - & \vdots & - \\ - & q_n^* & - \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^n (q_i q_i^*)$$

任意の  $v \in \mathbb{C}^m$  に対し、

$$\hat{Q} \hat{Q}^* v = \sum_{i=1}^n (q_i q_i^*) v = \sum_{i=1}^n q_i (q_i^* v)$$

つまり、 $\hat{Q} \hat{Q}^* v$  各列に対して  $q_i^* v$  倍したものと言え、依然として  $q_i$  を基底ベクトルとして  
いる。

$$\hat{Q} \hat{Q}^* v \in \text{range}(\hat{Q})$$

が示せた。

2.

任意に  $y \in \text{range}(\hat{Q})$  を取ると、ある  $c \in \mathbb{C}^r$  が存在して、 $y = \hat{Q}c$  とかける。この時、

$$\begin{aligned} y^*(v - \hat{Q}\hat{Q}^*v) &= (Qc)^*(v - \hat{Q}\hat{Q}^*v) \\ &= c^*(\hat{Q}^*v - \hat{Q}^*\hat{Q}\hat{Q}^*v) \\ &= c^*(\hat{Q}^*v - \hat{Q}^*v) \\ &= 0 \end{aligned}$$

つまり、

$$v - \hat{Q}\hat{Q}^*v \perp \text{range}(\hat{Q})$$

以上より、 $\hat{Q}\hat{Q}^*$  は  $\text{range}(\hat{Q})$  への直交射影である。

$q$  は  $\mathbb{C}^m$  の正規直交基底であったが、 $\text{range}(A)$  の正規直交基底を列ベクトルとする行列が  $Q$  と考えれば、 $QQ^*$  は  $\text{range}(A)$  への直交射影と言える。 $\|a\| = 1$  ならば、 $(aa^*)a = a$  となるため、 $aa^*$  は  $\text{span}\{a\}$  への直交射影となる。ならば、

$$P = \frac{aa^*}{a^*a}$$

は直交射影となる。

## 2.2 QR Factorization

### Reduced and Full QR Factorizations

Full QR Factorization では行列  $R$  の下側の行は 0 となるが、その行にかけられる  $m - n$  列の  $q$  は 0 であっていいわけではない。Reduced QR Factorization での  $q$  は行列  $A$  の列空間を張る基底となっているが、0 がかけられる  $q$  は  $\text{range}(A)$  の直交補空間  $\text{range}(A)^\perp$  を張る基底となる。つまり、Full QR Factorization での  $q$  は  $\mathbb{R}^m$  全体の基底を張ることになる。

$$\text{range}(A)^\perp = \{x \in \mathbb{R}^m \mid x^T y = 0, \forall y \in \text{range}(A)\}$$

$$\mathbb{R}^m = \text{range}(A) \oplus \text{range}(A)^\perp$$

### Gram-Schmidt Orthogonalization

式 (7.5) について

$$r = x - (q_1^* x)q_1 - \cdots - (q_n^* x)q_n$$

を参考にして作成されている。任意のベクトル  $x$  に対して、表現可能であった。では、 $q_1, \dots, q_{j-1}$  に対して直交するベクトル  $v_j$  を考えると、

$$v_j = x - (q_1^* x)q_1 - \cdots - (q_{j-1}^* x)q_{j-1}$$

となる。 $q_j$  を含むと、 $r = v_j = 0$  となってしまう。 $x$  は任意であるなら、 $a_j$  を用いれば、 $a_j$  を  $v_j$  に変換する式とみるのが可能となる。

$$\|x\|_2 = \sqrt{x^*x}$$

より、

$$\begin{aligned} |r_{jj}| &= \sqrt{r_{jj}^* r_{jj}} = \|r_{jj}\|_2 \\ &= \left\| \frac{a_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij} q_i}{q_j} \right\|_2 \quad (\text{式 (7.6) より}) \\ &= \left\| a_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij} q_i \right\|_2 \end{aligned}$$

この時、 $q$  は式 (7.6) より正規化しているので、 $\|q_j\|_2 = 1$  を満たす。

### When Vectors Become Continuous Functions

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x & x^2 & \cdots & x^{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_0(x) & q_1(x) & \cdots & q_{n-1}(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & & \vdots \\ & & \ddots & \\ & & & r_{nn} \end{bmatrix}$$

より、

$$x^k = \sum_{j=0}^k r_{jk} q_j(x)$$

$q_j$  は次数  $j$  の多項式となる。これらの多項式は **Legendre polynomials**(ルジャンドル多項式)  $P_j$  のスカラー倍となる。 $P$  は互いに直交しているので、数値計算で利点がある。ルジャンドル多項式は行列  $A$  (a continuous analogue of the Vandermonde matrix) に対して QR 分解した際に、導かれた物である。教科書では  $P_j(1) = 1$  になるように正規化している。

例えば、3 次で検証すると、

$$\begin{aligned}
 A = QR &= \begin{bmatrix} q_0(x) & q_1(x) & q_2(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle q_0, 1 \rangle & \langle q_0, x \rangle & \langle q_0, x^2 \rangle \\ 0 & \langle q_1, x \rangle & \langle q_1, x^2 \rangle \\ 0 & 0 & \langle q_2, x^2 \rangle \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}}x & \sqrt{\frac{45}{8}}\left(x^2 - \frac{1}{3}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{8}{45}} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}P_0(x) & \sqrt{\frac{3}{2}}P_1(x) & \frac{2}{3}\sqrt{\frac{45}{8}}P_2(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{8}{45}} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

で確かに、 $P_j$  のスカラー倍となっていることがわかる。

### Solution of $Ax = b$ by QR Factorization

$Rx = Q^*b$  で前進消去を終えた形と同じになる。しかし、QR 分解は標準的な手法ではなく、ガウスの消去法の方が実務では使われる。

## 2.3 Gram-Schmidt Orthogonalization

### Gram-Schmidt Projections

$P_j$  は  $\text{span}\{q_1, q_2, \dots, q_{j-1}\}$  に直交する部分空間への直交射影となるので、

$$P_j = I - \sum_{i=1}^{j-1} q_i q_i^*$$

これより、

$$\begin{aligned}
 P_j a_j &= \left( I - \sum_{i=1}^{j-1} q_i q_i^* \right) a_j \quad (m \times 1) \\
 &= a_j - \sum_{i=1}^{j-1} q_i q_i^* a_j \\
 &= a_j - \sum_{i=1}^{j-1} (q_i^* a_j) q_i \\
 &= a_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij} q_i \quad (q_i^* a_j = r_{ij})
 \end{aligned}$$

これは式 (7.5) と完全に一致する。これを正規化したものが、 $q_j$  の正体である。つまり、 $a_j$  に  $P_j$  を施すと  $a_j$  を  $\{q_1, \dots, q_{j-1}\}$  に対して直交するベクトル  $v_j$  に変換する。

### Modified Gram–Schmidt Algorithm

■  $P_j = P_{\perp q_{j-1}} \cdots P_{\perp q_2} P_{\perp q_1}$  を示す。

$$\begin{aligned}
 P_j &= P_{\perp q_{j-1}} \cdots P_{\perp q_2} P_{\perp q_1} \\
 &= (I - q_{j-1} q_{j-1}^*) \cdots (I - q_2 q_2^*) (I - q_1 q_1^*) \\
 &= \underline{I - \sum_{i=1}^{j-1} q_i q_i^*}
 \end{aligned}$$

■ (8.4)-(8.6) を繋げる

$$\begin{aligned}
 v_j &= P_j a_j \\
 &= \left( I - \sum_{i=1}^{j-1} q_i q_i^* \right) a_j \\
 &= P_{\perp q_{j-1}} \cdots P_{\perp q_2} P_{\perp q_1} a_j
 \end{aligned}$$

つまり、式 (7.5) を以下のように考えられるということである。

$$\begin{aligned}
 v_j &= v_j = a_j - (q_1^* a_j) q_1 - \cdots - (q_{j-1}^* a_j) q_{j-1} \\
 &= P_{\perp q_{j-1}} \cdots P_{\perp q_2} P_{\perp q_1} a_j
 \end{aligned}$$

#### Algorithm 7.1. Classical Gram–Schmidt (unstable)

```

for j = 1 to n
  v_j = a_j
  for i = 1 to j - 1
    r_ij = q_i^* a_j
    v_j = v_j - r_ij q_i
  r_jj = ||v_j||_2
  q_j = v_j / r_jj

```

#### Algorithm 8.1. Modified Gram–Schmidt

```

for i = 1 to n
  v_i = a_i
  for j = i + 1 to n
    r_ij = ||v_i||
    q_i = v_i / r_ij
  for j = i + 1 to n
    r_ij = q_i^* v_j
    v_j = v_j - r_ij q_i

```

Modified Gram–Schmidt 法は以下の通り、

$$\begin{aligned}
 v_j &= a_j \\
 &= P_{\perp q_1} a_j \\
 &= P_{\perp q_2} P_{\perp q_1} a_j \\
 &\vdots \\
 &= P_{\perp q_{j-1}} \cdots P_{\perp q_2} P_{\perp q_1} a_j
 \end{aligned}$$

と掛け合わせていくアルゴリズムである。2 行目の計算結果に、 $P_{\perp q_2}$  を掛けてと逐次的に行っていく。

$$\begin{aligned}
v_j^{(1)} &= a_j \\
v_j^{(2)} &= P_{\perp q_1} v_j^{(1)} = v_j^{(1)} - q_1 q_1^* v_j^{(1)} \\
v_j^{(3)} &= P_{\perp q_2} v_j^{(2)} = v_j^{(2)} - q_2 q_2^* v_j^{(2)} \\
&\vdots \\
v_j &= v_j^{(j)} = P_{\perp q_{j-1}} v_j^{(j-1)} = v_j^{(j-1)} - q_{j-1} q_{j-1}^* v_j^{(j-1)}
\end{aligned}$$

Classical では

$$v_n = a_n - \sum_{i=1}^{n-1} q_i^* a_j q_i$$

と一気に、 $a_n$  に対して  $n-1$  回分の減算を行ってから、 $|v_n|$  を割ることで、 $q_n$  を求めている。