Hinatori8

2026 年 1 月 2 日

2. QR Factorization and Least Squares

2.1 Projectors

Projectors

$v \in \mathrm{range}(P)$ の場合、v は自分自身の影の上にあることになる。Mathematically,... は、$v \in \mathrm{range}(P)(v = Px)$ 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、

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

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、

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

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が、$P = P^*$ となる。この時、

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

つまり、直交直和に分解ができるため、

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

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、

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

となるので、Reduced で行うと、

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

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 range$(\hat{Q})$ への直交射影を行う。
これを示したい。

■ **方針**　次の 2 つを示せれば良い

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、$hatQ\hat{Q}^*v$ 各列に対して q^*v 倍したものとと言え、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 $y \in \mathrm{range}(\hat{Q})$ 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、

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

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

q は C^m の正規直交基底であったが、$\mathrm{range}(A)$ 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 $\mathrm{range}(A)$ 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 $\mathrm{span}\{a\}$ 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 range(A) の直交補空間 $\mathrm{range}(A)^{\perp}$ 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。

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

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

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、$q_1, \ldots, q_{j-1}$ に対して直交するベクトル v_j を考えるとなると、

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

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ことが可能となる。

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

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

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

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 $\mathrm{span}\{q_1, q_2, \dots, q_{j-1}\}$ 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、

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

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。