

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が、 $P = P^*$ 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、

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

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 $\text{range}(\hat{Q})$ 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.

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

任意の $v \in C^m$ 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、

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

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

q は 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

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

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、

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

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、

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

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。

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

■ (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||
    q_j = v_j / r_jj
```

Algorithm 8.1. Modified Gram–Schmidt

```
for i = 1 to n
    v_i = a_i
for i = 1 to n
    r_ii = ||v_i||
    q_i = v_i / r_ii
    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。

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

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。