13. 그람-슈미트 직교화와 QR 분해

1) Gram-Schmidt Orthogonalization

- Gram-Schmidt Orthogonalization 과정

-> Orthogonal하지 않은 vector를 orthogonal하게 만들 수 있다.

3개의 vector a, b, c 가 있다고 하자.

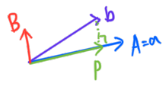
원하는 것은 orthogonal vector A, B, C이다. q_1, q_2, q_3는 각각 A, B, C의 unit-vector이다.

$$q_1 = \frac{A}{\|A\|},\ q_2 = \frac{B}{\|B\|},\ q_3 = \frac{C}{\|C\|}$$

(1) $A=a$로 정하자. B는 $A(a)$에 perpendicular이 되어야 한다.

'b의 A에 대한 projection을 b에서 뺀다.

$$B = b - \frac{A^Tb}{A^TA}A$$



(2) C는 다음과 같이 구한다.

$$C = c - \frac{A^Tc}{A^TA}A - \frac{B^Tc}{B^TB}B$$

(3) 이렇게 구한 A, B, C를 각각 normalize하면 q_1, q_2, q_3를 구할 수 있다.

e.g. $a = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix},\ b = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix},\ c = \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ 3 \end{bmatrix}$

$A=a$ 라 하자.

$$B = b - \frac{A^Tb}{A^TA}A = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} - \frac{2}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix}$$ $\Rightarrow A^Tb=0$ 이다.

$$C = c - \frac{A^Tc}{A^TA}A - \frac{B^Tc}{B^TB}B = \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ 3 \end{bmatrix} - \frac{6}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} - \frac{(-6)}{6}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

A, B, C를 각각 normalize 하자.

$$q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix},\ q_2 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix},\ q_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

2) QR Factorization

- Matrix A가 linearly independent한 column들을 가진 m by n의 matrix라면 $A = QR$로 분해될 수 있다.
- 이때, Q는 column이 $ColA$의 orthogonal basis인 m by n matrix이다.
- R는 n by n의 upper triangular invertible matrix이다. 대각에는 양의 entry들이 위치한다.

- QR Factorization 과정

(1) Gram-Schmidt Orthogonalization을 이용해서 A의 orthonormal basis를 만든다. 이 matrix가 Q이다.

(2) QR의 결과가 원래 A가 되도록 R을 채워준다. 최종 결과는 다음과 같다.

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a & b & c \end{bmatrix}}_{A} = \underbrace{\begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix}}_{Q} \underbrace{\begin{bmatrix} q_1^T a & q_1^T b & q_1^T c \\ & q_2^T b & q_2^T c \\ & & q_3^T c \end{bmatrix}}_{R}$$

- e.g. $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$

$$q_1 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$B = b - \frac{a^T b}{a^T a} a = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{3}{4}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{3}{4} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{bmatrix}$$

$$C = c - \frac{a^T c}{a^T a} a - \frac{B^T c}{B^T B} B = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{2}{4}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{\frac{2}{4}}{\frac{12}{16}}\begin{bmatrix} -\frac{3}{4} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

$$q_2 = \frac{1}{\sqrt{12}}\begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad q_3 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{3}{\sqrt{12}} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -\frac{3}{2} & 1 \\ 0 & -\frac{3}{\sqrt{12}} & \frac{2}{\sqrt{12}} \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{bmatrix}$$