

数値計算：射影

平井 慎一

立命館大学 ロボティクス学科

講義の流れ

- 1 正規方程式と射影行列
- 2 正規直交系への射影
- 3 グラム・シュミットの直交化
- 4 QR 分解とその応用
- 5 まとめ

変数の個数より式の数が多い連立一次方程式

変数の個数が 2, 式の数 が 3 である連立一次方程式

$$\begin{cases} 1x + 0y = 1 \\ 2x - 1y = 6 \\ -1x + 1y = -2 \end{cases}$$

⇓

解を持たない

変数の個数より式の数が多い連立一次方程式

行列表現

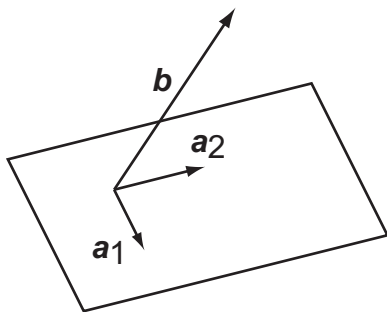
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 6 \\ -2 \end{bmatrix}$$

⇓

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} y = \begin{bmatrix} 1 \\ 6 \\ -2 \end{bmatrix}$$

を満たす x, y が存在しない

変数の個数より式の数が多い連立一次方程式

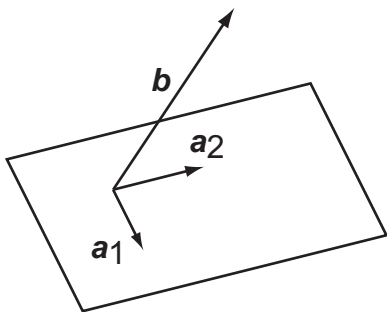


係数行列の第1列と第2列のベクトル

$$\mathbf{a}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

⇒ 三次元空間内のベクトル

変数の個数より式の数が多い連立一次方程式

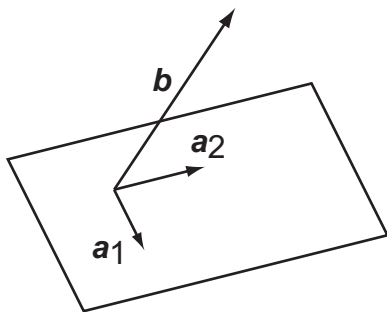


一次結合

$$\mathbf{a}_1 x + \mathbf{a}_2 y = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} x + \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} y$$

\Rightarrow 二つのベクトル \mathbf{a}_1 と \mathbf{a}_2 を含む平面内

変数の個数より式の数が多い連立一次方程式



定数ベクトル

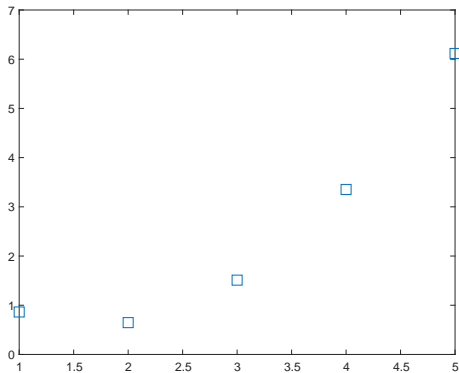
$$b = \begin{bmatrix} 1 \\ 6 \\ -2 \end{bmatrix}$$

⇒ 平面上にない

⇒ 左辺と右辺が等しくなる x, y は存在しない ⇒ 解が無い

曲線のフィッティング

t	1	2	3	4	5
x	1.1333	0.4667	1.6000	3.5333	5.6667



曲線のフィッティング

2次式 $x = a + bt + ct^2$ で近似

$$a + b \cdot 1 + c \cdot 1^2 = 1.1333$$

$$a + b \cdot 2 + c \cdot 2^2 = 0.4667$$

$$a + b \cdot 3 + c \cdot 3^2 = 1.6000$$

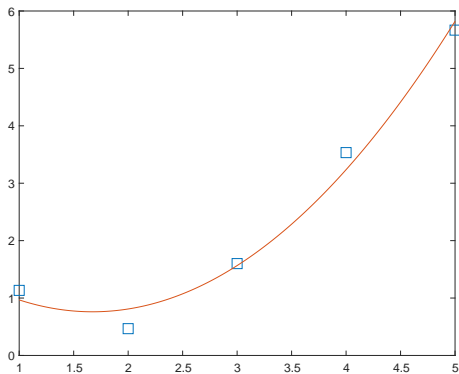
$$a + b \cdot 4 + c \cdot 4^2 = 3.5333$$

$$a + b \cdot 5 + c \cdot 5^2 = 5.6667$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1^2 \\ 1 & 2 & 2^2 \\ 1 & 3 & 3^2 \\ 1 & 4 & 4^2 \\ 1 & 5 & 5^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.1333 \\ 0.4667 \\ 1.6000 \\ 3.5333 \\ 5.6667 \end{bmatrix}$$

曲線のフィッティング

t	1	2	3	4	5
x	1.1333	0.4667	1.6000	3.5333	5.6667

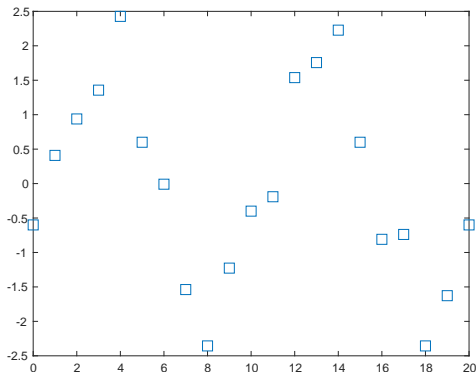


曲線のフィッティング

t	0	1	2	3	4
x	-0.6000	0.4091	0.9383	1.3563	2.4271
	5	6	7	8	9
	0.6000	-0.0091	-1.5383	-2.3563	-1.2271
	10	11	12	13	14
	-0.4000	-0.1909	1.5383	1.7563	2.2271
	15	16	17	18	19
	0.6000	-0.8091	-0.7383	-2.3563	-1.6271
	20				
	-0.6000				

曲線のフィッティング

t	0	1	2	3	4	...
x	-0.6000	0.4091	0.9383	1.3563	2.4271	...



曲線のフィッティング

$x = A \sin((2\pi/10)t - \delta)$ で近似

$$\begin{aligned}x &= A \sin((2\pi/10)t - \delta) \\&= A \{ \sin(2\pi/10)t \cos \delta - \cos(2\pi/10)t \sin \delta \} \\&= A \cos \delta \sin(2\pi/10)t - A \sin \delta \cos(2\pi/10)t\end{aligned}$$

$p = A \cos \delta$, $q = A \sin \delta$ とおくと

$$x = p \sin(2\pi/10)t - q \cos(2\pi/10)t$$

曲線のフィッティング

$$p \sin((2\pi/10)0) - q \cos((2\pi/10)0) = -0.6000$$

$$p \sin((2\pi/10)1) - q \cos((2\pi/10)1) = 0.4091$$

$$p \sin((2\pi/10)2) - q \cos((2\pi/10)2) = 0.9383$$

$$p \sin((2\pi/10)3) - q \cos((2\pi/10)3) = 1.3563$$

$$p \sin((2\pi/10)4) - q \cos((2\pi/10)4) = 2.4271$$

...

$$\begin{bmatrix} \sin((2\pi/10)0) & -\cos((2\pi/10)0) \\ \sin((2\pi/10)1) & -\cos((2\pi/10)1) \\ \sin((2\pi/10)2) & -\cos((2\pi/10)2) \\ \sin((2\pi/10)3) & -\cos((2\pi/10)3) \\ \sin((2\pi/10)4) & -\cos((2\pi/10)4) \\ \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.6000 \\ 0.4091 \\ 0.9383 \\ 1.3563 \\ 2.4271 \\ \dots \end{bmatrix}$$

曲線のフィッティング

p, q の値から A, δ の値を計算

$$p = A \cos \delta$$

$$q = A \sin \delta$$

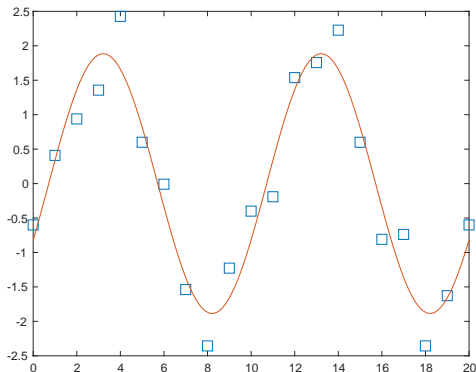
⇓

$$A = \sqrt{p^2 + q^2}$$

$$\delta = \text{atan2}(q, p)$$

曲線のフィッティング

t	0	1	2	3	4	...
x	-0.6000	0.4091	0.9383	1.3563	2.4271	...



誤差最小解

係数行列

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

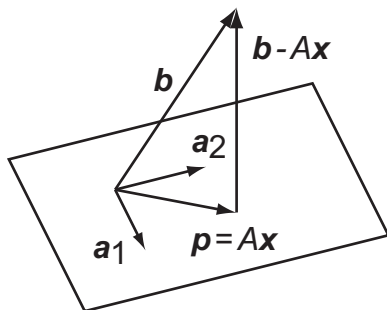
変数ベクトル

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

連立一次方程式

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

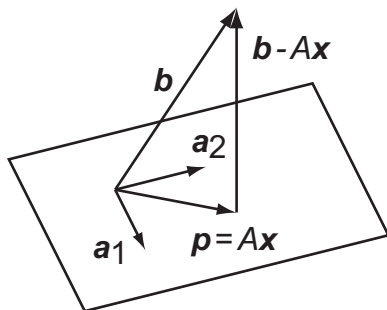
誤差最小解



誤差が最小となる解 \implies
定数ベクトル b から列ベクトル a_1, a_2 が定める平面への垂線
垂線の足

$$p = a_1x + a_2y = Ax$$

誤差最小解



垂線に沿うベクトル

$$b - Ax$$

ベクトル $b - Ax$ が平面に直交

$$a_1 \perp b - Ax, \quad a_2 \perp b - Ax$$

誤差最小解

$$\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{b} - A\mathbf{x}, \quad \mathbf{a}_2 \perp \mathbf{b} - A\mathbf{x}$$

⇓

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} \perp \mathbf{b} - A\mathbf{x}, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} \perp \mathbf{b} - A\mathbf{x}$$

⇓

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{b} - A\mathbf{x} \end{bmatrix} = 0, \quad \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{b} - A\mathbf{x} \end{bmatrix} = 0$$

誤差最小解

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{b} - A\mathbf{x} \end{bmatrix} = 0$$
$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{b} - A\mathbf{x} \end{bmatrix} = 0$$

誤差が最小になるための条件

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{b} - A\mathbf{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

誤差最小解

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad A^T = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

誤差が最小になるための条件

$$A^T(\mathbf{b} - A\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

誤差最小解

正規方程式

$$A^T A x = A^T b$$

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & -3 \\ -3 & 2 \end{bmatrix}$$

⇒ 正定対称行列

行列 A がフルランク ⇒ $A^T A$ は正定対称行列

⇒ 正規方程式は必ず解くことができる

射影行列

正規方程式 $A^T A \mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$ を解く

$$\mathbf{x} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}$$

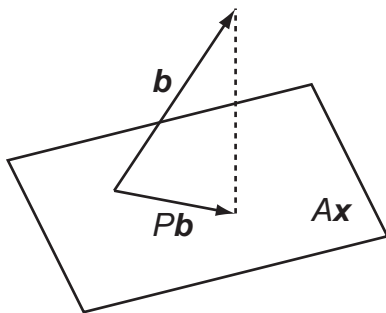
このとき

$$\mathbf{p} = A \mathbf{x} = A(A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}$$

射影行列

$$A(A^T A)^{-1} A^T$$

射影行列



射影行列 $P = A(A^T A)^{-1} A^T$:

任意のベクトル b を係数行列 A の列ベクトルから成る空間に写像

$$b \xRightarrow{P} Pb$$

射影行列

例 行列

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

の射影行列

$$A(A^T A)^{-1} A^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

x-y 平面への射影

射影行列

例 行列

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

の射影行列

$$A(A^T A)^{-1} A^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

x-y 平面への射影

射影行列

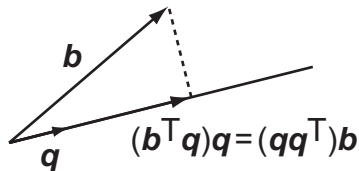
例 単位ベクトル \mathbf{q} から成る行列

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{q} \end{bmatrix}$$

の射影行列 (注意: $A^T = \mathbf{q}^T$ なので $A^T A = \mathbf{q}^T \mathbf{q} = 1$)

$$A(A^T A)^{-1} A^T = \mathbf{q} \mathbf{q}^T$$

方向ベクトル \mathbf{q} で定められる直線への射影



射影行列

例 正則行列

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

の射影行列 (注意: 行列 A は正則なので $(A^T A)^{-1} = A^{-1}(A^T)^{-1}$)

$$A(A^T A)^{-1}A^T = AA^{-1}(A^T)^{-1}A^T = I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

全空間への射影 \equiv 恒等変換

射影行列の性質

列の交換

$$A = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3], \quad B = [\mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_3]$$

↓

行列 A の射影行列 = 行列 B の射影行列

列の定数 (非零) 倍の加算

$$A = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3], \quad B = [\mathbf{a}_1 + 5\mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3]$$

↓

行列 A の射影行列 = 行列 B の射影行列

射影行列の性質

列の定数倍

$$A = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3], \quad B = [6\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3]$$

↓

行列 A の射影行列 = 行列 B の射影行列

射影行列は列の基本変換に関して不変

射影行列の性質

$$\begin{aligned} B &= [\mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_3] \\ &= [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3] \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= AR \quad (\text{正方行列 } R \text{ は正則}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{行列 } B \text{ の射影行列} &= B(B^\top B)^{-1}B^\top \\ &= (AR)(R^\top A^\top AR)^{-1}(R^\top A^\top) \\ &= ARR^{-1}(A^\top A)^{-1}(R^\top)^{-1}R^\top A^\top \\ &= A(A^\top A)^{-1}A^\top \\ &= \text{行列 } A \text{ の射影行列} \end{aligned}$$

射影行列の性質

$$\begin{aligned} B &= [\mathbf{a}_1 + 5\mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3] \\ &= [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3] \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 5 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= AR \quad (\text{正方行列 } R \text{ は正則}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B &= [6\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3] \\ &= [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3] \begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= AR \quad (\text{正方行列 } R \text{ は正則}) \end{aligned}$$

射影行列の性質

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} 0 & 5 \\ 1 & -3 \\ -2 & 6 \end{bmatrix} \text{ の射影行列} \\ = & \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ -3 & 1 \\ 6 & -2 \end{bmatrix} \text{ の射影行列 (1 列と 2 列を交換)} \\ = & \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \text{ の射影行列 (1 列に 2 列の 3 倍を加算)} \\ = & \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \text{ の射影行列 (正規化 : 1 列を (1/5) 倍)} \end{aligned}$$

射影行列の性質

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{5} \\ 0 & -2/\sqrt{5} \end{bmatrix} \text{ の射影行列 (正規化 : 2 列を } (1/\sqrt{5}) \text{ 倍)}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} [1 \ 0 \ 0] + \begin{bmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{5} \\ -2/\sqrt{5} \end{bmatrix} [0 \ 1/\sqrt{5} \ -2/\sqrt{5}]$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/5 & -2/5 \\ 0 & -2/5 & 4/5 \end{bmatrix}$$

射影行列の性質

例 行列

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 2 & -4 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

の射影行列

$$A^T A = \begin{bmatrix} 6 & -12 \\ -12 & 24 \end{bmatrix}$$

行列 $A^T A$ は正則でない \implies 逆行列 $(A^T A)^{-1}$ が存在しない
 \implies 定義式では計算できない

射影行列の性質

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 2 & -4 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \text{ の射影行列} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 0 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \text{ の射影行列} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} \text{ の射影行列} \\ &= \begin{bmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{6} \end{bmatrix} \text{ の射影行列} \\ &= \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & -2 \\ -1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

射影行列の性質

以下の行列の射影行列を求めよ.

(a)

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -3 & 5 & -3 \\ -3 & -5 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

(b)

$$B = \begin{bmatrix} -6 & 4 & 0 \\ 3 & -2 & 0 \\ -1 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & -1 \\ -1 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

正規直交系

正規直交系

ベクトルの組が正規直交系



正規：各ベクトルの大きさが1である

直交：ベクトルがたがいに直交している

正規直交系

ベクトル

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{bmatrix}$$

の内積

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = \begin{bmatrix} a_x & a_y & a_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{bmatrix} = \mathbf{a}^\top \mathbf{b}$$

ベクトル \mathbf{a} と \mathbf{b} が直交 $\implies \mathbf{a}^\top \mathbf{b} = 0$

ベクトル \mathbf{a} の大きさが1 $\implies \|\mathbf{a}\| = 1$

$$\implies \|\mathbf{a}\|^2 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a}^\top \mathbf{a} = 1$$

正規直交系

二つのベクトル $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ が正規直交系

$$\begin{array}{l} \text{正規} \\ \text{直交} \end{array} \quad \begin{array}{l} \|\mathbf{q}_1\| = 1, \quad \|\mathbf{q}_2\| = 1 \\ \mathbf{q}_1 \perp \mathbf{q}_2 \end{array}$$

⇓

$$\begin{array}{l} \text{正規} \\ \text{直交} \end{array} \quad \begin{array}{l} \mathbf{q}_1^\top \mathbf{q}_1 = 1, \quad \mathbf{q}_2^\top \mathbf{q}_2 = 1 \\ \mathbf{q}_1^\top \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}_2^\top \mathbf{q}_1 = 0 \end{array}$$

⇓

$$\begin{array}{l} \mathbf{q}_1^\top \mathbf{q}_1 = 1, \quad \mathbf{q}_1^\top \mathbf{q}_2 = 0, \\ \mathbf{q}_2^\top \mathbf{q}_1 = 0, \quad \mathbf{q}_2^\top \mathbf{q}_2 = 1 \end{array}$$

正規直交系

三つのベクトル $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$ が正規直交系

$$\begin{array}{l} \text{正規} \\ \text{直交} \end{array} \quad \begin{array}{l} \|\mathbf{q}_1\| = 1, \quad \|\mathbf{q}_2\| = 1, \quad \|\mathbf{q}_3\| = 1 \\ \mathbf{q}_1 \perp \mathbf{q}_2, \quad \mathbf{q}_1 \perp \mathbf{q}_3, \quad \mathbf{q}_2 \perp \mathbf{q}_3 \end{array}$$

⇓

$$\begin{array}{l} \mathbf{q}_1^\top \mathbf{q}_1 = 1, \quad \mathbf{q}_1^\top \mathbf{q}_2 = 0, \quad \mathbf{q}_1^\top \mathbf{q}_3 = 0, \\ \mathbf{q}_2^\top \mathbf{q}_1 = 0, \quad \mathbf{q}_2^\top \mathbf{q}_2 = 1, \quad \mathbf{q}_2^\top \mathbf{q}_3 = 0, \\ \mathbf{q}_3^\top \mathbf{q}_1 = 0, \quad \mathbf{q}_3^\top \mathbf{q}_2 = 0, \quad \mathbf{q}_3^\top \mathbf{q}_3 = 1 \end{array}$$

正規直交系への射影

正規直交系を成す二つのベクトル $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ を列ベクトルとする行列 A

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 \end{bmatrix}$$

正規方程式の係数行列 $A^T A$

$$A^T A = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^T \\ \mathbf{q}_2^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_2 \\ \mathbf{q}_2^T \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2^T \mathbf{q}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$\implies A$ は直交行列

正規直交系への射影

射影行列

$$A(A^T A)^{-1} A^T = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^T \\ \mathbf{q}_2^T \end{bmatrix} = \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_1^T + \mathbf{q}_2 \mathbf{q}_2^T$$

ベクトル \mathbf{b} の射影

$$\begin{aligned} A(A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b} &= (\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_1^T) \mathbf{b} + (\mathbf{q}_2 \mathbf{q}_2^T) \mathbf{b} \\ &= (\mathbf{b}^T \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1 + (\mathbf{b}^T \mathbf{q}_2) \mathbf{q}_2 \end{aligned}$$

右辺の第1項：ベクトル \mathbf{b} の単位ベクトル \mathbf{q}_1 への射影

右辺の第2項：ベクトル \mathbf{b} の単位ベクトル \mathbf{q}_2 への射影

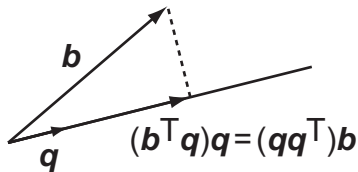
正規直交系への射影

正規直交系への射影

行列 A が直交行列

行列 A の各列ベクトルへの射影を独立に計算し加算

各列ベクトルへの射影



逆行列を計算する必要がない

グラム・シュミットの直交化

グラム・シュミットの直交化

ベクトルの組 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$



正規直交系 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$

ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ が
定める空間 \equiv ベクトル $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$ が
定める空間

グラム・シュミットの直交化

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{bmatrix}$$

ベクトル $\mathbf{a}_1 \implies$ 正規直交系 \mathbf{q}_1

\mathbf{a}_1 が定める空間 \equiv \mathbf{q}_1 が定める空間

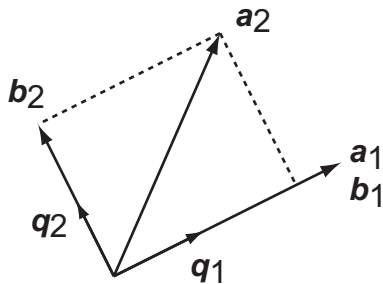
ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \implies$ 正規直交系 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ が定める空間 \equiv $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ が定める空間

ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3 \implies$ 正規直交系 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ が定める空間 \equiv $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$ が定める空間

グラム・シュミットの直交化

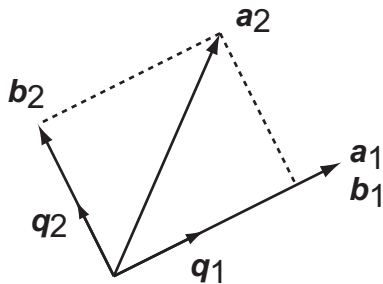


ベクトル $a_1 \implies$ 正規直交系 q_1

$$b_1 = a_1,$$

$$q_1 = \frac{b_1}{\|b_1\|}$$

グラム・シュミットの直交化

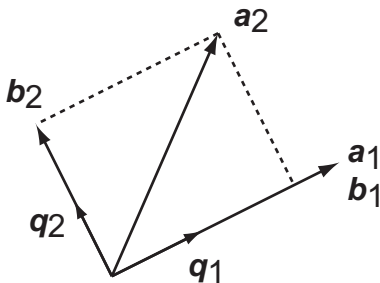


ベクトル $a_1, a_2 \implies$ 正規直交系 q_1, q_2

$$b_2 = a_2 - (a_2^\top q_1)q_1,$$

$$q_2 = \frac{b_2}{\|b_2\|}$$

グラム・シュミットの直交化



$$b_2 = a_2 - (a_2^\top q_1)q_1$$

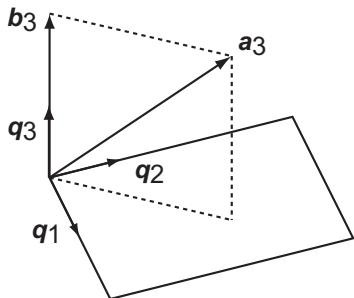
右辺の第2項 $(a_2^\top q_1)q_1$:

ベクトル a_2 を単位ベクトル q_1 が定める直線へ射影



$$b_2 \perp q_1$$

グラム・シュミットの直交化

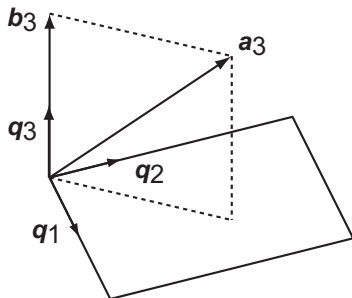


ベクトル $a_1, a_2, a_3 \implies$ 正規直交系 q_1, q_2, q_3

$$b_3 = a_3 - (a_3^\top q_1)q_1 - (a_3^\top q_2)q_2,$$

$$q_3 = \frac{b_3}{\|b_3\|}$$

グラム・シュミットの直交化



$$b_3 = a_3 - \{(a_3^\top q_1)q_1 + (a_3^\top q_2)q_2\}$$

右辺の第2項 $(a_3^\top q_1)q_1 + (a_3^\top q_2)q_2$:

ベクトル a_3 をベクトル q_1, q_2 が定める平面へ射影



$$b_3 \perp q_1, q_2$$

QR分解

ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ を正規直交系 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$ を用いて表す

$$\mathbf{a}_1 = \|\mathbf{b}_1\| \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_2 = \|\mathbf{b}_2\| \mathbf{q}_2 + (\mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_3 = \|\mathbf{b}_3\| \mathbf{q}_3 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2) \mathbf{q}_2$$

⇓

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \mathbf{q}_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|\mathbf{b}_1\| & \mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1 & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1 \\ 0 & \|\mathbf{b}_2\| & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2 \\ 0 & 0 & \|\mathbf{b}_3\| \end{bmatrix}$$

QR分解

ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ を正規直交系 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$ を用いて表す

$$\mathbf{a}_1 = \|\mathbf{b}_1\| \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_2 = \|\mathbf{b}_2\| \mathbf{q}_2 + (\mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_3 = \|\mathbf{b}_3\| \mathbf{q}_3 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2) \mathbf{q}_2$$

⇓

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \mathbf{q}_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|\mathbf{b}_1\| & \mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1 & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1 \\ 0 & \|\mathbf{b}_2\| & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2 \\ 0 & 0 & \|\mathbf{b}_3\| \end{bmatrix}$$

QR分解

ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ を正規直交系 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$ を用いて表す

$$\mathbf{a}_1 = \|\mathbf{b}_1\| \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_2 = \|\mathbf{b}_2\| \mathbf{q}_2 + (\mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_3 = \|\mathbf{b}_3\| \mathbf{q}_3 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2) \mathbf{q}_2$$

⇓

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \mathbf{q}_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|\mathbf{b}_1\| & \mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1 & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1 \\ 0 & \|\mathbf{b}_2\| & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2 \\ 0 & 0 & \|\mathbf{b}_3\| \end{bmatrix}$$

QR分解

ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ を正規直交系 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$ を用いて表す

$$\mathbf{a}_1 = \|\mathbf{b}_1\| \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_2 = \|\mathbf{b}_2\| \mathbf{q}_2 + (\mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_3 = \|\mathbf{b}_3\| \mathbf{q}_3 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2) \mathbf{q}_2$$

⇓

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \mathbf{q}_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|\mathbf{b}_1\| & \mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1 & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1 \\ 0 & \|\mathbf{b}_2\| & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2 \\ 0 & 0 & \|\mathbf{b}_3\| \end{bmatrix}$$

QR分解

ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ を正規直交系 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$ を用いて表す

$$\mathbf{a}_1 = \|\mathbf{b}_1\| \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_2 = \|\mathbf{b}_2\| \mathbf{q}_2 + (\mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_3 = \|\mathbf{b}_3\| \mathbf{q}_3 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2) \mathbf{q}_2$$

⇓

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \mathbf{q}_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|\mathbf{b}_1\| & \mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1 & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1 \\ 0 & \|\mathbf{b}_2\| & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2 \\ 0 & 0 & \|\mathbf{b}_3\| \end{bmatrix}$$

QR分解

ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ を正規直交系 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3$ を用いて表す

$$\mathbf{a}_1 = \|\mathbf{b}_1\| \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_2 = \|\mathbf{b}_2\| \mathbf{q}_2 + (\mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1$$

$$\mathbf{a}_3 = \|\mathbf{b}_3\| \mathbf{q}_3 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1) \mathbf{q}_1 + (\mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2) \mathbf{q}_2$$

⇓

$$\begin{array}{c} \left[\begin{array}{ccc} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_3 \end{array} \right] \\ A \end{array} = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{ccc} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \mathbf{q}_3 \end{array} \right] \\ Q \end{array} \begin{array}{c} \left[\begin{array}{ccc} \|\mathbf{b}_1\| & \mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1 & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1 \\ 0 & \|\mathbf{b}_2\| & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2 \\ 0 & 0 & \|\mathbf{b}_3\| \end{array} \right] \\ R \end{array}$$

QR分解

QR分解

行列 A を直交行列 Q と上三角行列 R の積で表す

$$A = QR$$

$$Q = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \mathbf{q}_3 \end{bmatrix}$$
$$R = \begin{bmatrix} \|\mathbf{b}_1\| & \mathbf{a}_2^\top \mathbf{q}_1 & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_1 \\ & \|\mathbf{b}_2\| & \mathbf{a}_3^\top \mathbf{q}_2 \\ & & \|\mathbf{b}_3\| \end{bmatrix}$$

正規方程式

$$A = QR, \quad A^T = (QR)^T = R^T Q^T$$

$$A^T A = R^T Q^T QR = R^T (Q^T Q) R = R^T R$$

正規方程式 $A^T A x = A^T b$

$$R^T R x = R^T Q^T b$$

行列 A がフルランク \implies 上三角行列 R は正則
 \implies 下三角行列 R^T は正則
 \implies 逆行列 $(R^T)^{-1}$ が存在

正規方程式

$$R x = Q^T b$$

最後の式から順次解くことにより解を求める

射影

行列 $A = QR$ の射影行列

$$A(A^T A)^{-1} A^T = (QR)(R^T R)^{-1} (QR)^T$$

行列 A がフルランク \implies 上三角行列 R は正則
 $\implies (R^T R)^{-1} = R^{-1} (R^T)^{-1}$

射影行列

$$\begin{aligned} A(A^T A)^{-1} A^T &= QRR^{-1} (R^T)^{-1} R^T Q^T \\ &= QQ^T \\ &= \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_1^T + \mathbf{q}_2 \mathbf{q}_2^T + \mathbf{q}_3 \mathbf{q}_3^T \end{aligned}$$

行列 A の射影行列 \equiv 直交行列 Q の射影行列

MATLAB

行列 A がフルランクである場合

ファイル `qr_decompose.m`

```
A = [ 2, 1; ...  
      1, 2; ...  
      0, 0 ];  
[Q,R] = qr(A,0);
```

MATLAB

```
>> qr_decompose
```

```
>> Q
```

```
Q =
```

```
   -0.8944   -0.4472  
   -0.4472    0.8944  
           0         0
```

```
>> R
```

```
R =
```

```
   -2.2361   -1.7889  
           0    1.3416
```

MATLAB

```
>> A
```

```
A =
```

```
    2    1  
    1    2  
    0    0
```

```
>> Q*R
```

```
ans =
```

```
 2.0000  1.0000  
 1.0000  2.0000  
        0        0
```


MATLAB

射影行列の計算

```
>> Q*Q'
```

```
ans =
```

```
    1.0000    -0.0000         0
   -0.0000     1.0000         0
         0         0         0
```

MATLAB

行列 A がフルランクでない可能性がある場合

ファイル `qr_decompose_rank_deficient.m`

```
A = [ 0, 0, 0; ...  
      1, 2, 2; ...  
      2, 4, 1 ];  
[Q,R,index] = qr(A,0);
```

MATLAB

```
>> Q
```

```
Q =
```

```
         0         0    -1.0000  
-0.4472  -0.8944  -0.0000  
-0.8944   0.4472   0.0000
```

```
>> R
```

```
R =
```

```
-4.4721  -1.7889  -2.2361  
         0  -1.3416         0  
         0         0  -0.0000
```

MATLAB

```
>> Q*R
```

```
ans =
```

```
      0      0  0.0000
  2.0000  2.0000  1.0000
  4.0000  1.0000  2.0000
```

```
>> A(:,index)
```

```
ans =
```

```
      0      0      0
      2      2      1
      4      1      2
```

`index` の添え字に従って行列 A の各列を並べ替えると QR に一致

MATLAB

射影行列の計算

```
n = rank(R);  
P = Q(:,1:n)*Q(:,1:n)';
```

```
>> P
```

```
P =
```

```
0         0         0  
0    1.0000    0.0000  
0    0.0000    1.0000
```

ノルム最小解

変数 x, y, z, w

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 5 \\ -1 \\ 7 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 1 & 4 \\ 0 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

(α, β は任意のパラメータ)

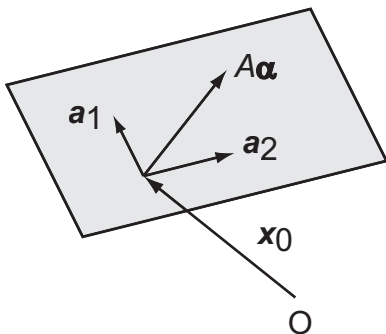
最も原点に近い変数の組 (ノルム最小解) を求める

ノルム最小解

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 5 \\ -1 \\ 7 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 1 & 4 \\ 0 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$
$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + A \boldsymbol{\alpha}$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} -3 \\ 5 \\ -1 \\ 7 \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 1 & 4 \\ 0 & -3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

ノルム最小解



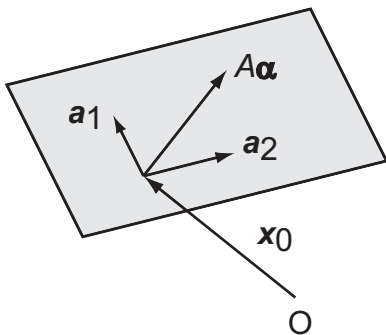
x の集合：点 x_0 を通る二次元平面

行列 A の列ベクトル a_1, a_2 ：平面の向きを定める

点 x_0 からノルム最小解に至るベクトル

\implies ベクトル $(-x_0)$ の行列 A が定める平面への射影

ノルム最小解



行列 A の射影行列 : $P = A^T (A^T A)^{-1} A$

点 x_0 からノルム最小解に至るベクトル : $P(-x_0)$

ノルム最小解

$$x_0 + P(-x_0) = x_0 - Px_0$$

ノルム最小解

行列 A を QR 分解 行列 Q の列ベクトル

$$\mathbf{q}_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q}_2 = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 2 \\ -3 \end{bmatrix}$$

射影

$$\begin{aligned} P\mathbf{x}_0 &= (\mathbf{x}_0^\top \mathbf{q}_1)\mathbf{q}_1 + (\mathbf{x}_0^\top \mathbf{q}_2)\mathbf{q}_2 \\ &= (\sqrt{6})\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + (-2\sqrt{14})\frac{1}{\sqrt{14}} \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 2 \\ -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ -3 \\ 6 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

ノルム最小解

ノルム最小解

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 - P\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} -4 \\ 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

最小ノルム

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{22}$$

まとめ

正規方程式と射影行列

- 正規方程式

$$A^T A x = A^T b$$

- 射影行列

$$A(A^T A)^{-1} A^T$$

QR 分解

- グラム・シュミットの直交化
- 行列 A を直交行列 Q と上三角行列 R の積で表す

$$A = QR$$

- ノルム最小解への応用

レポート (MATLAB Grader)

MATLAB grader 「射影」

締切：2024年6月17日（月曜）00:10 AM