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

$$\left\{\begin{array}{rrcr} 1x & +0y & = & 1 \\ 2x & -1y & = & 6 \\ -1x & +1y & = & -2 \end{array}\right.$$

$$\Downarrow$$

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

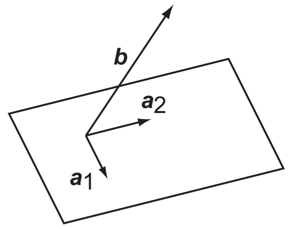
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 6 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

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

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

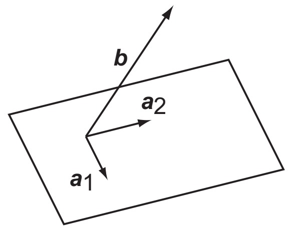


係数行列の第 1 列と第 2 列のベクトル

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

$\Longrightarrow$ 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

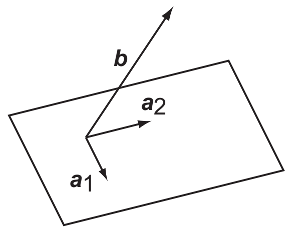


一次結合

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

$\Longrightarrow$ 二つのベクトル $\boldsymbol{a}_1$ と $\boldsymbol{a}_2$ 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

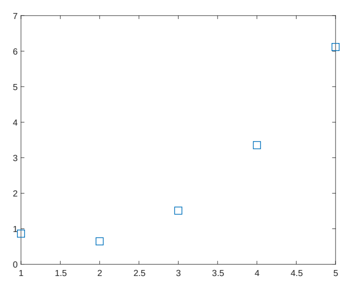
$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 6 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$\Longrightarrow$ 平面上にない

$\Longrightarrow$ 左辺と右辺が等しくなる x, y は存在しない $\Longrightarrow$ 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

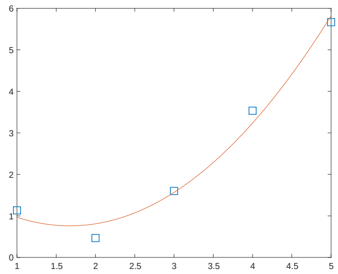
2 次式 $x = a + bt + ct^2$ で近似

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

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

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

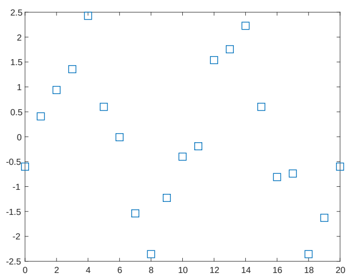


曲線のフィッティング

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	$\cdots$
x	-0.6000	0.4091	0.9383	1.3563	2.4271	$\cdots$



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

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

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

曲線のフィッティング

p, q の値から A, δ の値を計算

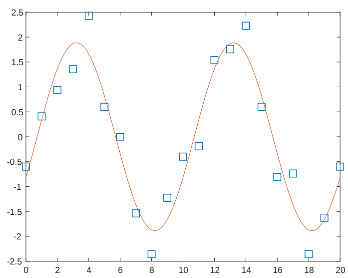
$$
\begin{aligned}
p &= A\cos\delta\\
q &= A\sin\delta
\end{aligned}
$$

$$\Downarrow$$

$$
\begin{aligned}
A &= \sqrt{p^2 + q^2}\\
\delta &= \mathrm{atan2}\,(q, p)
\end{aligned}
$$

曲線のフィッティング

t	0	1	2	3	4	$\cdots$
x	-0.6000	0.4091	0.9383	1.3563	2.4271	$\cdots$



誤差最小解

係数行列

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

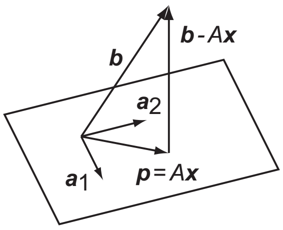
変数ベクトル

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

連立一次方程式

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

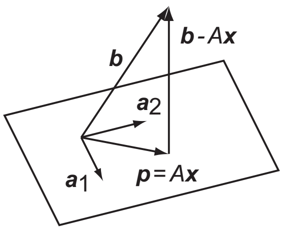
誤差最小解



誤差が最小となる解 $\Longrightarrow$
定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ から列ベクトル $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$ が定める平面への垂線
垂線の足

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{a}_1 x + \boldsymbol{a}_2 y = A\boldsymbol{x}$$

誤差最小解



垂線に沿うベクトル

$$\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}$$

ベクトル $\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}$ が平面に直交

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

誤差最小解

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

$$\Downarrow$$

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

$$\Downarrow$$

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

誤差最小解

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

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

誤差が最小になるための条件

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

誤差最小解

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

誤差が最小になるための条件

$$A^\top(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$$

誤差最小解

正規方程式

$$A^\top A\boldsymbol{x} = A^\top \boldsymbol{b}$$

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

$\Longrightarrow$ 正定対称行列

行列 A がフルランク $\Longrightarrow$ $A^\top A$ は正定対称行列
$\Longrightarrow$ 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 $A^\top A\boldsymbol{x} = A^\top \boldsymbol{b}$ を解く

$$\boldsymbol{x} = (A^\top A)^{-1} A^\top \boldsymbol{b}$$

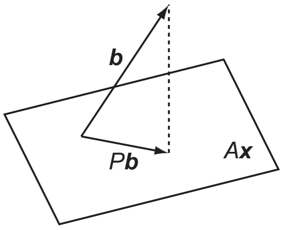
このとき

$$\boldsymbol{p} = A\boldsymbol{x} = A(A^\top A)^{-1} A^\top \boldsymbol{b}$$

射影行列

$$A(A^\top A)^{-1} A^\top$$

射影行列



射影行列 $P = A(A^\top A)^{-1}A^\top$：
任意のベクトル $\boldsymbol{b}$ を係数行列 A の列ベクトルから成る空間に写像

$$\boldsymbol{b} \overset{P\times}{\Longrightarrow} P\boldsymbol{b}$$

射影行列

例　行列

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

の射影行列

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

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

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

x-y 平面への射影

射影行列

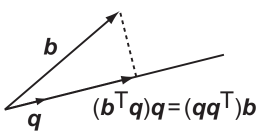
例　単位ベクトル $\boldsymbol{q}$ から成る行列

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

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

$$A(A^\top A)^{-1}A^\top = \boldsymbol{q}\boldsymbol{q}^\top$$

方向ベクトル $\boldsymbol{q}$ 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 $(A^\top A)^{-1} = A^{-1}(A^\top)^{-1}$)

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

全空間への射影 $\equiv$ 恒等変換

射影行列の性質

列の交換

$$A = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

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

$$A = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 + 5\boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

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

$$A = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 6\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

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

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

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

射影行列の性質

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

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

射影行列の性質

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

射影行列の性質

$$
\begin{aligned}
= & \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{5} \\ 0 & -2/\sqrt{5} \end{bmatrix} \text{の射影行列 (正規化：2 列を } (1/\sqrt{5}) \text{ 倍)} \\
= & \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \left[\ 1 \quad 0 \quad 0\ \right] + \begin{bmatrix} 0 \\ 1/\sqrt{5} \\ -2/\sqrt{5} \end{bmatrix} \left[\ 0 \quad 1/\sqrt{5} \quad -2/\sqrt{5}\ \right] \\
= & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/5 & -2/5 \\ 0 & -2/5 & 4/5 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

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

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

行列 $A^{\top}A$ は正則でない　$\Longrightarrow$　逆行列 $(A^{\top}A)^{-1}$ が存在しない
　$\Longrightarrow$　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

$\Downarrow$

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

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

の内積

$$
\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = \left[\ a_x \quad a_y \quad a_z\ \right] \begin{bmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{bmatrix} = \boldsymbol{a}^{\top} \boldsymbol{b}
$$

ベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ が直交　$\Longrightarrow$　$\boldsymbol{a}^{\top} \boldsymbol{b} = 0$
ベクトル $\boldsymbol{a}$ の大きさが 1　$\Longrightarrow$　$\|\, \boldsymbol{a} \,\| = 1$
　$\Longrightarrow$　$\|\, \boldsymbol{a} \,\|^2 = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}^{\top} \boldsymbol{a} = 1$

正規直交系

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

$$\begin{array}{ll} \text{正規} & \| \boldsymbol{q}_1 \| = 1, \quad \| \boldsymbol{q}_2 \| = 1 \\ \text{直交} & \boldsymbol{q}_1 \perp \boldsymbol{q}_2 \end{array}$$

$$\Downarrow$$

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

$$\Downarrow$$

$$\begin{array}{ll} \boldsymbol{q}_1^\top \boldsymbol{q}_1 = 1, & \boldsymbol{q}_1^\top \boldsymbol{q}_2 = 0, \\ \boldsymbol{q}_2^\top \boldsymbol{q}_1 = 0, & \boldsymbol{q}_2^\top \boldsymbol{q}_2 = 1 \end{array}$$

正規直交系

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

$$\begin{array}{llll} \text{正規} & \| \boldsymbol{q}_1 \| = 1, & \| \boldsymbol{q}_2 \| = 1, & \| \boldsymbol{q}_3 \| = 1 \\ \text{直交} & \boldsymbol{q}_1 \perp \boldsymbol{q}_2, & \boldsymbol{q}_1 \perp \boldsymbol{q}_3, & \boldsymbol{q}_2 \perp \boldsymbol{q}_3 \end{array}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{array}{lll} \boldsymbol{q}_1^\top \boldsymbol{q}_1 = 1, & \boldsymbol{q}_1^\top \boldsymbol{q}_2 = 0, & \boldsymbol{q}_1^\top \boldsymbol{q}_3 = 0, \\ \boldsymbol{q}_2^\top \boldsymbol{q}_1 = 0, & \boldsymbol{q}_2^\top \boldsymbol{q}_2 = 1, & \boldsymbol{q}_2^\top \boldsymbol{q}_3 = 0, \\ \boldsymbol{q}_3^\top \boldsymbol{q}_1 = 0, & \boldsymbol{q}_3^\top \boldsymbol{q}_2 = 0, & \boldsymbol{q}_3^\top \boldsymbol{q}_3 = 1 \end{array}$$

正規直交系への射影

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

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

正規方程式の係数行列 $A^\top A$

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

$\Longrightarrow$ A は直交行列

正規直交系への射影

射影行列

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

ベクトル $\boldsymbol{b}$ の射影

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

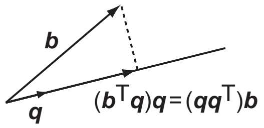
右辺の第 1 項：ベクトル $\boldsymbol{b}$ の単位ベクトル $\boldsymbol{q}_1$ への射影
右辺の第 2 項：ベクトル $\boldsymbol{b}$ の単位ベクトル $\boldsymbol{q}_2$ への射影

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 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$

$$\Downarrow$$

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

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

グラム・シュミットの直交化

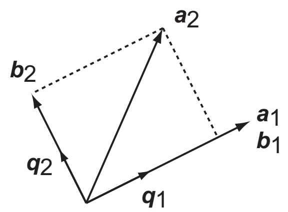
$$A = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 \end{bmatrix}$$

ベクトル $\boldsymbol{a}_1$ $\Longrightarrow$ 正規直交系 $\boldsymbol{q}_1$
　$\boldsymbol{a}_1$ が定める空間 $\equiv$ $\boldsymbol{q}_1$ が定める空間

ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2$ $\Longrightarrow$ 正規直交系 $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2$
　$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2$ が定める空間 $\equiv$ $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2$ が定める空間

ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ $\Longrightarrow$ 正規直交系 $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3$
　$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ が定める空間 $\equiv$ $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3$ が定める空間

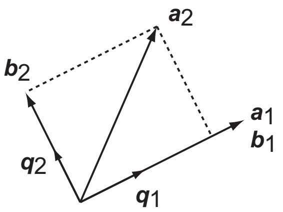
グラム・シュミットの直交化



ベクトル $\boldsymbol{a}_1$ $\Longrightarrow$ 正規直交系 $\boldsymbol{q}_1$

$$\boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{a}_1, \qquad \boldsymbol{q}_1 = \frac{\boldsymbol{b}_1}{\| \boldsymbol{b}_1 \|}$$

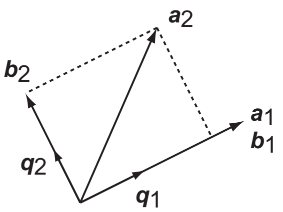
グラム・シュミットの直交化



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

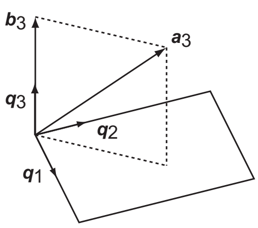


$$b_2 = a_2 - (a_2^\top q_1)q_1$$

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

$$\Downarrow$$
$$b_2 \perp q_1$$

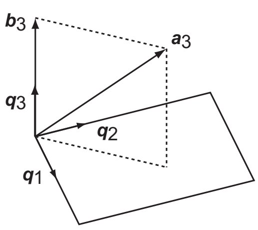
グラム・シュミットの直交化



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

$$\Downarrow$$
$$b_3 \perp q_1, q_2$$

QR 分解

ベクトル a_1, a_2, a_3 を正規直交系 q_1, q_2, q_3 を用いて表す

$$\begin{aligned} a_1 &= \| b_1 \| q_1 \\ a_2 &= \| b_2 \| q_2 + (a_2^\top q_1)q_1 \\ a_3 &= \| b_3 \| q_3 + (a_3^\top q_1)q_1 + (a_3^\top q_2)q_2 \end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \| b_1 \| & a_2^\top q_1 & a_3^\top q_1 \\ 0 & \| b_2 \| & a_3^\top q_2 \\ 0 & 0 & \| b_3 \| \end{bmatrix}$$

QR 分解

ベクトル a_1, a_2, a_3 を正規直交系 q_1, q_2, q_3 を用いて表す

$$\begin{aligned} a_1 &= \| b_1 \| q_1 \\ a_2 &= \| b_2 \| q_2 + (a_2^\top q_1)q_1 \\ a_3 &= \| b_3 \| q_3 + (a_3^\top q_1)q_1 + (a_3^\top q_2)q_2 \end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \| b_1 \| & a_2^\top q_1 & a_3^\top q_1 \\ 0 & \| b_2 \| & a_3^\top q_2 \\ 0 & 0 & \| b_3 \| \end{bmatrix}$$

QR 分解

ベクトル a_1, a_2, a_3 を正規直交系 q_1, q_2, q_3 を用いて表す

$$\begin{aligned} a_1 &= \| b_1 \| q_1 \\ a_2 &= \| b_2 \| q_2 + (a_2^\top q_1)q_1 \\ a_3 &= \| b_3 \| q_3 + (a_3^\top q_1)q_1 + (a_3^\top q_2)q_2 \end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \| b_1 \| & a_2^\top q_1 & a_3^\top q_1 \\ 0 & \| b_2 \| & a_3^\top q_2 \\ 0 & 0 & \| b_3 \| \end{bmatrix}$$

QR 分解

ベクトル a_1, a_2, a_3 を正規直交系 q_1, q_2, q_3 を用いて表す

$$\begin{aligned} a_1 &= \| b_1 \| q_1 \\ a_2 &= \| b_2 \| q_2 + (a_2^\top q_1)q_1 \\ a_3 &= \| b_3 \| q_3 + (a_3^\top q_1)q_1 + (a_3^\top q_2)q_2 \end{aligned}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \| b_1 \| & a_2^\top q_1 & a_3^\top q_1 \\ 0 & \| b_2 \| & a_3^\top q_2 \\ 0 & 0 & \| b_3 \| \end{bmatrix}$$

QR 分解

ベクトル a_1, a_2, a_3 を正規直交系 q_1, q_2, q_3 を用いて表す

$$
\begin{aligned}
a_1 &= \| b_1 \| q_1 \\
a_2 &= \| b_2 \| q_2 + (a_2^\top q_1) q_1 \\
a_3 &= \| b_3 \| q_3 + (a_3^\top q_1) q_1 + (a_3^\top q_2) q_2
\end{aligned}
$$

$$\Downarrow$$

$$
\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \| b_1 \| & a_2^\top q_1 & a_3^\top q_1 \\ 0 & \| b_2 \| & a_3^\top q_2 \\ 0 & 0 & \| b_3 \| \end{bmatrix}
$$

QR 分解

ベクトル a_1, a_2, a_3 を正規直交系 q_1, q_2, q_3 を用いて表す

$$
\begin{aligned}
a_1 &= \| b_1 \| q_1 \\
a_2 &= \| b_2 \| q_2 + (a_2^\top q_1) q_1 \\
a_3 &= \| b_3 \| q_3 + (a_3^\top q_1) q_1 + (a_3^\top q_2) q_2
\end{aligned}
$$

$$\Downarrow$$

$$
\underbrace{\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix}}_{A} \underset{=}{=} \underbrace{\begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix}}_{Q} \underbrace{\begin{bmatrix} \| b_1 \| & a_2^\top q_1 & a_3^\top q_1 \\ 0 & \| b_2 \| & a_3^\top q_2 \\ 0 & 0 & \| b_3 \| \end{bmatrix}}_{R}
$$

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

$$A = QR$$

$$
Q = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_2 \end{bmatrix}
$$

$$
R = \begin{bmatrix} \| b_1 \| & a_2^\top q_1 & a_3^\top q_1 \\ & \| b_2 \| & a_3^\top q_2 \\ & & \| b_3 \| \end{bmatrix}
$$

正規方程式

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

$$A^\top A = R^\top Q^\top Q R = R^\top (Q^\top Q) R = R^\top R$$

正規方程式 $A^\top A x = A^\top b$

$$R^\top R x = R^\top Q^\top b$$

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

正規方程式

$$R x = Q^\top b$$

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

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

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

射影行列

$$
\begin{aligned}
A(A^\top A)^{-1} A^\top &= Q R R^{-1} (R^\top)^{-1} R^\top Q^\top \\
&= Q Q^\top \\
&= q_1 q_1^\top + q_2 q_2^\top + q_3 q_3^\top
\end{aligned}
$$

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)

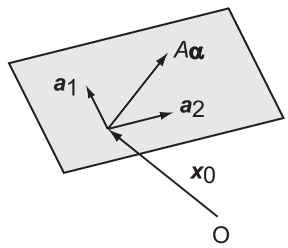
最も原点に近い変数の組 (ノルム最小解) を求める

ノルム最小解

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

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

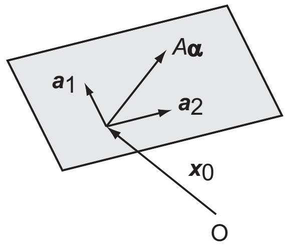
ノルム最小解



$\boldsymbol{x}$ の集合：点 $\boldsymbol{x}_0$ を通る二次元平面
行列 A の列ベクトル $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$：平面の向きを定める

点 $\boldsymbol{x}_0$ からノルム最小解に至るベクトル
$\Longrightarrow$ ベクトル $(-\boldsymbol{x}_0)$ 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：$P = A^\top (A^\top A)^{-1} A$
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

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

射影

$$\begin{aligned} P\boldsymbol{x}_0 &= (x_0^\top \boldsymbol{q}_1)\boldsymbol{q}_1 + (x_0^\top \boldsymbol{q}_2)\boldsymbol{q}_2 \\ &= (\sqrt{6})\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + (-2\sqrt{14})\frac{1}{\sqrt{14}}\begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 2 \\ -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ -3 \\ 6 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

ノルム最小解

ノルム最小解

$$\boldsymbol{x} = x_0 - Px_0 = \begin{bmatrix} -4 \\ 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

最小ノルム

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

まとめ

正規方程式と射影行列

- 正規方程式

$$A^\top A\boldsymbol{x} = A^\top \boldsymbol{b}$$

- 射影行列

$$A(A^\top A)^{-1} A^\top$$

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