

7 直交射影

$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^m$ に対して, 線形方程式系

$$\sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i x_i = \mathbf{b}$$

が解を持たない時には, $\mathbf{b} \notin \text{span}\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n\} := S$ であることを示した.

この場合には, S に含まれるベクトル $\mathbf{c}$ で $\mathbf{b}$ を最も良く近似することが考えられる. すなわち, 誤差 $\|\mathbf{b} - \mathbf{c}\|$ を最小にする $\mathbf{c} \in S$ を求める問題が考えられる. よって $\mathbf{c} \in S$ であるので, 線形方程式系

$$\sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i x_i = \mathbf{c}$$

は解を持つことになる. $\mathbf{c}$ を $\mathbf{b}$ の S 上の直交射影 とよぶ. 図 16 を参照.

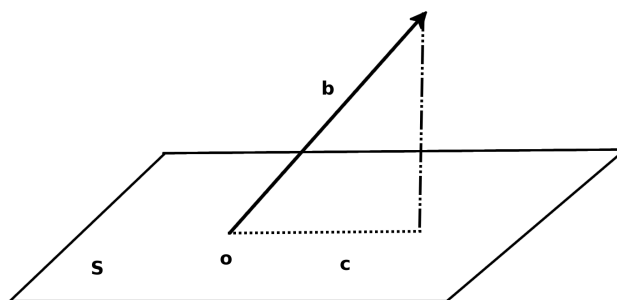


図 16: 線形方程式系が解を持たない場合.

定理 7.1 : $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{c} \in S$ のとき,

$$\|\mathbf{b} - \mathbf{a}\| \geq \|\mathbf{b} - \mathbf{c}\| \text{ for } \forall \mathbf{a} \in S \Leftrightarrow \mathbf{a}^T(\mathbf{b} - \mathbf{c}) = 0 \text{ for } \forall \mathbf{a} \in S$$

[問題 07-01] 次の命題を証明せよ. $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{c} \in S$ のとき,

$$\|\mathbf{b} - \mathbf{a}\| \geq \|\mathbf{b} - \mathbf{c}\| \text{ for } \forall \mathbf{a} \in S \Leftrightarrow \mathbf{a}^T(\mathbf{b} - \mathbf{c}) = 0 \text{ for } \forall \mathbf{a} \in S$$

定理 7.2 : 直交射影は一意的に定まる.

[問題 07-02] 『直交射影は一意的に定まる』ことを証明せよ.

7.1 直交射影の計算方法

[問題 07-03] お互いに異なる非ゼロベクトル $a, b \in \mathbb{R}^2$ に対して,

$$S = \{\lambda a \mid \lambda \in \mathbb{R}\}$$

とする. b の S 上の直交射影 c を a と b の内積を使って表現せよ. 図 17 参照.

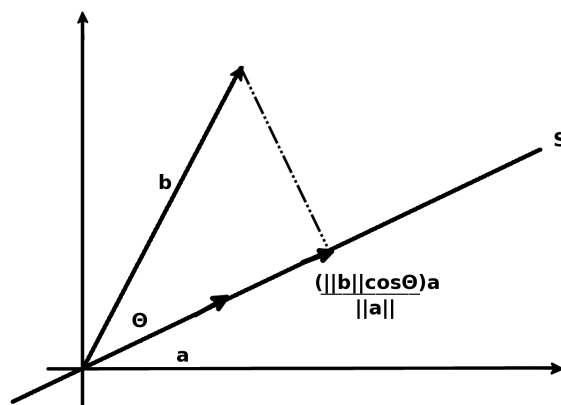


図 17: 直線上への直交射影の例.

一般に

$a_1, a_2, \dots, a_r$ を部分空間 S の基底
 $A = (a_1 \ a_2 \ \dots \ a_r)$ を $m \times r$ 行列

とすると

$\text{rank}(A) = r$ となり $A^T A \in \mathbb{R}^{r \times r}$ は正則行列となる.

[問題 07-04] $A \in \mathbb{R}^{m \times r}$, $\text{rank}(A) = r$ とする. このとき, $A^T A$ は $r \times r$ の正則行列となることを証明せよ.

ここで, $y = (A^T A)^{-1} A^T b \in \mathbb{R}^r$, $c = Ay$ とおくと, c は b の S 上の直交射影となる. $A(A^T A)^{-1} A^T$ を S への (直交) 射影行列 とよぶ.

証明: $c = Ay = \sum_{i=1}^r a_i y_i \in S$ である. $a \in S$ とすると, $a = Au$ となるような $u \in \mathbb{R}^r$ が存在する. よって,

$$\begin{aligned} a^T(b - c) &= (Au)^T(b - A(A^T A)^{-1} A^T b) \\ &= u^T A^T b - u^T A^T A (A^T A)^{-1} A^T b \\ &= 0 \end{aligned}$$

ゆえに, 既に見した定理 7.1 より, c は b の S 上への直交射影となる. 特に,

$a_1, a_2, \dots, a_r$ を S の正規直交基底

としてとると, $A^T A = I$ ($r \times r$ 単位行列) となるから, 直交射影は $c = AA^T b$ となる.

例: 直線のあてはめ, 最小二乗法

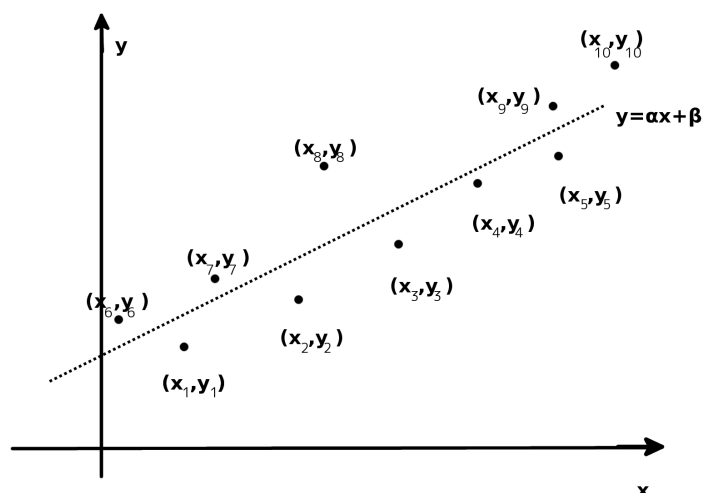


図 18: 直線あてはめの例.

データとして $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m) \in \mathbb{R}^2$ が与えられているとする. そして, これらのデータに最もあてはまる直線 $\alpha x_i + \beta = y_i$ ($1 \leq i \leq m$) を求めたい. ここで

$$\begin{aligned} x_i &\rightarrow a_{i1} & i = 1, 2, \dots, m \\ y_i &\rightarrow b_i & i = 1, 2, \dots, m \end{aligned}$$

とすると,

$$a_1 = \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix}, a_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix},$$

に対して, $a_1\alpha + a_2\beta = b$ という線形方程式系に書き換えることができる.

仮定: a_1, a_2 は線形独立である.

直交射影の議論を当てはめると, $n = 2$, $S = \{a_1\alpha + a_2\beta \mid \alpha, \beta \in \mathbb{R}\}$, $A = (a_1 \ a_2)$ となるので,

$$\begin{pmatrix} \hat{\alpha} \\ \hat{\beta} \end{pmatrix} = (A^T A)^{-1} A^T b, \quad c = A (A^T A)^{-1} A^T b$$

を得る.

[問題 07-05] n 次曲線

$$y = \alpha_0 x^n + \alpha_1 x^{n-1} + \dots + \alpha_{n-1} x + \alpha_n$$

のあてはめについても同様な考察をせよ.

8 線形方程式系に関する補足

$a_1, a_2, \dots, a_q \in \mathbb{R}^m$, $b \in \mathbb{R}^m$ が与えられているとして, 線形方程式系

$$\sum_{j=1}^q a_j x_j = b \quad (4)$$

について考える. $S := \text{span}\{a_1, a_2, \dots, a_q\}$ とおく.

今までの話を次の4つのケースにまとめることができる.

(a) $b \in S$ かつ $a_1, a_2, \dots, a_q$ が線形独立の場合. すなわち $b \in \text{span}\{a_1, a_2, \dots, a_q\}$ かつ

$\text{rank}(a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_q) = q$ の場合. この場合には, 線形方程式系 (4) は一意的な解をもつ (問題 03-05 や問題 06-04 を参照).

(b) $b \in S$ かつ $a_1, a_2, \dots, a_q$ が線形従属の場合. すなわち $b \in \text{span}\{a_1, a_2, \dots, a_q\}$ かつ

$\text{rank}(a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_q) < q$ の場合. この場合には, 線形方程式系 (4) は解をもつが, 一意的ではない (問題 03-05 を参照). $a_1, a_2, \dots, a_q$ の中から S の基底を選ぶ. 簡単のために, 最初の r 本 $a_1, a_2, \dots, a_r$ が S の基底であると仮定する. この時, 線形方程式系

$$\sum_{j=1}^r a_j x_j = b$$

は一意的な解 $(y_1^*, y_2^*, \dots, y_r^*)^T$ を持つ. そして $(y_1^*, y_2^*, \dots, y_r^*, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^q$ は (4) の解の一つとなる.

(c) $b \notin S$ かつ $a_1, a_2, \dots, a_q$ が線形独立の場合. すなわち $b \notin \text{span}\{a_1, a_2, \dots, a_q\}$ かつ

$\text{rank}(a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_q) = q$ の場合. $b \notin S$ より, (4) は解を持たない. そこで, 誤差 $\left\| \sum_{j=1}^q a_j x_j - b \right\|$ を最小にする x を計算することを考える. $A = (a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_q)$, $c = A(A^T A)^{-1} A^T b$ とすると, c は b の S 上の直交射影となる. このとき, 線形方程式系

$$\sum_{j=1}^q a_j x_j = c \quad \text{すなわち} \quad Ax = A(A^T A)^{-1} A^T b$$

は一意的な解 $x^* = (A^T A)^{-1} A^T b$ を持ち, その解 x^* が誤差 $\left\| \sum_{j=1}^q a_j x_j - b \right\|$ を最小にする.

(d) $b \notin S$ かつ $a_1, a_2, \dots, a_q$ が線形従属の場合. すなわち $b \notin \text{span}\{a_1, a_2, \dots, a_q\}$ かつ

$\text{rank}(a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_q) < q$ の場合. この場合も $b \notin S$ より, (4) は解を持たない. そこで, 誤差 $\left\| \sum_{j=1}^q a_j x_j - b \right\|$ を最小にする x を計算することを考える. $a_1, a_2, \dots, a_q$ の中から S の基底を選ぶ. 簡単のために, 最初の r 本 $a_1, a_2, \dots, a_r$ が S の基底であると仮定する. $\bar{A} = (a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_r)$, $c = \bar{A}(\bar{A}^T \bar{A})^{-1} \bar{A}^T b$ とすると, c は b の S 上の直交射影となる. このとき, 線形方程式系

$$\sum_{j=1}^r a_j x_j = c \quad \text{すなわち} \quad \bar{A}y = \bar{A}(\bar{A}^T \bar{A})^{-1} \bar{A}^T b$$