

No.4 直交補空間と射影

この回のゴール

- 直交補空間を定義し、求められる.
- $V = W \oplus W^\perp$ と $\dim W + \dim W^\perp = \dim V$ を説明できる.
- 部分空間への正射影を, 正規直交基底や射影行列を使って求められる.
- 正射影が「最も近い点」を与えることを理解し, 最小二乗法に使える.

以下, V を有限次元の内積空間, W をその部分空間とする.

1. 直交補空間

定義 1 直交補空間

W のすべてのベクトルと直交するベクトル全体

$$W^\perp = \{x \in V \mid \text{すべての } w \in W \text{ について } (x, w) = 0\}$$

を W の直交補空間という.

定理 1

- (1) $W^\perp$ は V の部分空間である.
- (2) $W \cap W^\perp = \{0\}$.
- (3) $W = \langle a_1, \dots, a_k \rangle$ なら, $x \in W^\perp \iff (x, a_1) = \dots = (x, a_k) = 0$.

【証明】(1) $(0, w) = 0$. $x, y \in W^\perp$ なら $(x+y, w) = 0$, $(cx, w) = 0$. (2) $x \in W \cap W^\perp$ なら $(x, x) = 0$ で, (I3) より $x = 0$. (3) $(\Leftarrow)$ $w = \sum c_i a_i$ なら $(x, w) = \sum c_i (x, a_i) = 0$. $(\Rightarrow)$ は明らか. $\square$

 $\mathbb{R}^n$ での求め方

$W = \langle a_1, \dots, a_k \rangle \subset \mathbb{R}^n$ のとき, 定理 1 (3) より $W^\perp$ は連立方程式 ${}^t a_1 x = 0, \dots, {}^t a_k x = 0$ の解空間, つまり $A = (a_1 \cdots a_k)$ として

$$W^\perp = \text{Ker } {}^t A \quad ({}^t A \text{ の行は } a_i)$$

である. 逆に, 同次方程式 $Bx = 0$ の解空間は, B の行ベクトルが生成する空間の直交補空間である.

例題 1

$\mathbb{R}^3$ で $W = \langle {}^t(1, 1, 0), {}^t(0, 1, 1) \rangle$ の直交補空間を求めよ.

【解答】 $x_1 + x_2 = 0, x_2 + x_3 = 0$ を解いて $W^\perp = \langle {}^t(1, -1, 1) \rangle$. (W は平面, $W^\perp$ はその法線方向の直線である.)

■ 2. 直交分解

定理 2 直交分解

V のどのベクトル x も

$$x = w + w', \quad w \in W, w' \in W^\perp$$

とただ 1 通りに表される。したがって $V = W \oplus W^\perp$ (直和) で、

$$\dim W + \dim W^\perp = \dim V.$$

さらに $(W^\perp)^\perp = W$ が成り立つ。

【証明】 No.3 定理 3 より W の正規直交基底 $e_1, \dots, e_k$ がとれる。 $w = \sum_{i=1}^k (x, e_i) e_i$, $w' = x - w$ とおくと, $w \in W$ で, 各 j について $(w', e_j) = (x, e_j) - (x, e_j) = 0$ なので, 定理 1 (3) より $w' \in W^\perp$.

一意性: $w_1 + w'_1 = w_2 + w'_2$ なら $w_1 - w_2 = w'_2 - w'_1 \in W \cap W^\perp = \{0\}$.

次元: $V = W + W^\perp$ かつ $W \cap W^\perp = \{0\}$ なので, 第 4 章 No.4 定理 8 (次元公式) より $\dim V = \dim W + \dim W^\perp$.

$(W^\perp)^\perp : W \subset (W^\perp)^\perp$ は定義から明らか。次元を比べると $\dim(W^\perp)^\perp = \dim V - \dim W^\perp = \dim W$ なので, 第 4 章 No.4 定理 4 より等しい。□

コラム：核と行空間は直交補空間どうし

$m \times n$ 行列 A について, 同次方程式 $Ax = 0$ の解空間 $\text{Ker } f_A$ は, A の行ベクトルが生成する空間 (行空間) の直交補空間である。定理 2 より $\dim \text{Ker } f_A + \dim(\text{行空間}) = n$ 。行空間の次元は $\text{rank } A$ (第 5 章 No.3 定理 4) なので, これは次元定理 $\dim \text{Ker } f_A = n - \text{rank } A$ を別の角度から見たものになっている。

■ 3. 正射影

定義 2 正射影

定理 2 の分解 $x = w + w'$ で, w を x の W への正射影といい, $P_W(x)$ と書く。

定理 3 正射影の公式

$e_1, \dots, e_k$ を W の正規直交基底とすると

$$P_W(x) = (x, e_1)e_1 + \dots + (x, e_k)e_k.$$

$P_W : V \rightarrow V$ は線形写像で, $P_W \circ P_W = P_W$ (第 5 章 No.2 練習問題 6 の「射影」) を満たす。

【証明】 公式は定理 2 の証明で作った w そのもの。線形性は内積の線形性から。 $P_W(x) \in W$ を W に正射影しても変わらないので $P_W \circ P_W = P_W$ 。□

定理 4 最良近似

W のすべてのベクトル w について

$$\|x - P_W(x)\| \leq \|x - w\|$$

が成り立ち、等号は $w = P_W(x)$ のときに限る。つまり $P_W(x)$ は W の中で x に最も近い点である。

【証明】 $p = P_W(x)$ とおく。 $x - w = (x - p) + (p - w)$ で、 $x - p \in W^\perp$, $p - w \in W$ は直交する。ピタゴラスの定理 (No.1 定理 4) より $\|x - w\|^2 = \|x - p\|^2 + \|p - w\|^2 \geq \|x - p\|^2$. $\square$

例題 2

平面 $W = \{^t(x, y, z) \mid x + y + z = 0\}$ への $x = ^t(1, 2, 3)$ の正射影と、 x と平面 W の距離を求めよ。

【解答】 $W^\perp = \langle n \rangle$, $n = ^t(1, 1, 1)$ (法線ベクトル)。 $W^\perp$ への正射影を先に求めると、No.3 定理 1 より

$$P_{W^\perp}(x) = \frac{(x, n)}{(n, n)} n = \frac{6}{3} ^t(1, 1, 1) = ^t(2, 2, 2).$$

$x = P_W(x) + P_{W^\perp}(x)$ なので $P_W(x) = ^t(1, 2, 3) - ^t(2, 2, 2) = ^t(-1, 0, 1)$. 距離は $\|x - P_W(x)\| = \|^t(2, 2, 2)\| = 2\sqrt{3}$.

注意

$W^\perp$ の方が次元が小さいときは、例題 2 のように $W^\perp$ への正射影を求めてから引く方が楽である。(No.3 例題 2 の正規直交基底を使って $P_W(x)$ を直接求めても、同じ結果になる.)

■ 4. 射影行列と最小二乗法**定理 5 射影行列**

A を $n \times k$ 行列とし、列ベクトルは 1 次独立とする。 $W = \text{Im } f_A$ (A の列空間) への正射影は

$$P_W(x) = A(^tAA)^{-1}{}^tAx$$

で与えられる。 $A(^tAA)^{-1}{}^tA$ を射影行列という。

【証明】 $P_W(x) \in W$ なので $P_W(x) = Ac$ と書ける。 $x - Ac \in W^\perp = \text{Ker } ^tA$ (第 1 節の注意) なので

$$^tA(x - Ac) = 0, \quad \text{つまり} \quad ^tAAc = ^tAx. \quad (\text{正規方程式})$$

^tAA は正則である ($^tAAy = 0$ なら $\|Ay\|^2 = y^tAAy = 0$ で $Ay = 0$, 列が 1 次独立なので $y = 0$). よって $c = (^tAA)^{-1}{}^tAx$. $\square$

■最小二乗法 連立方程式 $Ac = y$ に解がないとき、 $\|Ac - y\|$ を最小にする c を「最もよい近似解」と考える。定理 5 より、それは Ac が y の列空間への正射影になるときで、正規方程式 $^tAAc = ^tAy$ を解けばよい。

例題 3

4 つのデータ $(x, y) = (0, 1), (1, 2), (2, 2), (3, 4)$ に最もよく当てはまる直線 $y = a + bx$ を、最小二乗法で求めよ。

【解答】すべての点を通るなら $a + bx_i = y_i$ ($i = 1, \dots, 4$), つまり

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}}_A \underbrace{\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}}_y = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix}}_y$$

だが, これは解をもたない. 正規方程式は

$${}^tAA = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 14 \end{pmatrix}, \quad {}^tAy = \begin{pmatrix} 9 \\ 18 \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{20} \begin{pmatrix} 14 & -6 \\ -6 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 9 \\ 18 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.9 \\ 0.9 \end{pmatrix}.$$

求める直線は $y = 0.9 + 0.9x$. これは, 縦方向のずれの 2 乗の和 $\sum (y_i - a - bx_i)^2$ を最小にする直線である.

コラム：回帰分析とのつながり

例題 3 の直線は, 統計学でいう**回帰直線**そのものである (分野「確率・統計」第 6 章 No.1). 統計では「偏差の 2 乗和を a, b で偏微分して 0 とおく」という方法で導くが, 線形代数では「 y を列空間に正射影する」という図形的な見方で同じ答えが得られる. 説明変数を増やした重回帰 (分野「確率・統計」第 6 章 No.2) も, A の列を増やすだけで同じように扱える.

■ 練習問題

- $\mathbb{R}^4$ で $W = \langle {}^t(1, 1, 0, 0), {}^t(0, 1, 1, 1) \rangle$ の直交補空間の基底と次元を求めよ.
- 例題 1 の W について, $x = {}^t(1, 0, 0)$ の W への正射影を求めよ.
- $\mathbb{R}^2$ で直線 $W = \langle {}^t(1, 2) \rangle$ への射影行列 P を求め, $P^2 = P$, ${}^tP = P$ を確かめよ.
- 3 つのデータ $(0, 0)$, $(1, 1)$, $(2, 3)$ に最もよく当てはまる直線 $y = a + bx$ を, 最小二乗法で求めよ.
- $W_1 \subset W_2$ ならば $W_2^\perp \subset W_1^\perp$ であることを示せ.
- (考えてみよう) 射影行列 $P = A({}^tAA)^{-1}{}^tA$ について, $P^2 = P$ と ${}^tP = P$ を示せ. また, P の固有値は 0 と 1 だけであることを, 図形的に説明せよ.

■ 練習問題の解答

- $x_1 + x_2 = 0$, $x_2 + x_3 + x_4 = 0$ を解く. $x_3 = s$, $x_4 = t$ とおくと $x_2 = -s - t$, $x_1 = s + t$. 基底 ${}^t(1, -1, 1, 0)$, ${}^t(1, -1, 0, 1)$, 次元 2 ($= 4 - 2$).
- $W^\perp = \langle n \rangle$, $n = {}^t(1, -1, 1)$. $P_{W^\perp}(x) = \frac{1}{3}{}^t(1, -1, 1)$ より $P_W(x) = {}^t(1, 0, 0) - \frac{1}{3}{}^t(1, -1, 1) = \frac{1}{3}{}^t(2, 1, -1)$.
- $A = {}^t(1, 2)$ とすると ${}^tAA = 5$ で, $P = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$. $P^2 = \frac{1}{25} \begin{pmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 20 \end{pmatrix} = P$, ${}^tP = P$.

$$4. A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \mathbf{y} = {}^t(0, 1, 3). \quad {}^tAA = \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}, \quad {}^tA\mathbf{y} = {}^t(4, 7). \quad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 5 & -3 \\ -3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/6 \\ 3/2 \end{pmatrix}. \quad \text{直線は } y = -\frac{1}{6} + \frac{3}{2}x.$$

5. $\mathbf{x} \in W_2^\perp$ なら, $\mathbf{x}$ は W_2 のすべてのベクトルと直交するので, 特に $W_1 (\subset W_2)$ のすべてのベクトルとも直交する.

6. $P^2 = A({}^tAA)^{-1}({}^tAA)({}^tAA)^{-1}A = A({}^tAA)^{-1}A = P. \quad {}^tP = A^t({}^tAA)^{-1}A = A({}^tAA)^{-1}A = P$ (${}^tAA$ は対称行列なので, その逆行列も対称). W のベクトルは P で動かず (固有値 1), $W^\perp$ のベクトルは $\mathbf{0}$ に移る (固有値 0). $V = W \oplus W^\perp$ なので, これら以外の固有値はない.