

グラム・シュミットの直交化

数理工学 第3回

小林 健/ Ken Kobayashi

東京科学大 工学院 経営工学系

2025 年 10 月 09 日

目次

- ① 直交行列
- ② グラム・シュミットの直交化法
- ③ QR 分解

目次

① 直交行列

② グラム・シュミットの直交化法

③ QR 分解

正規直交基底を列ベクトルとする行列の性質

- 部分空間 $W \subseteq \mathbb{R}^m$ の正規直交基底を $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_k \in W$ とする (ただし $k \leq m$).
- 正規直交基底のベクトルを並べた行列を

$$A = (\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_k) \in \mathbb{R}^{m \times k}$$

とすると,

$$A^T A = I \in \mathbb{R}^{k \times k}.$$

The diagram illustrates the matrix multiplication $A^T A = I$ using colored rectangles to represent the dimensions of the matrices:

- A^T is represented by a light blue horizontal rectangle, labeled $k \times m$ (横長).
- A is represented by a light blue vertical rectangle, labeled $m \times k$ (縦長).
- The product $A^T A$ is represented by a light red square, labeled $k \times k$ (正方).

The equation is shown as: $A^T \times A = I$.

$k = m$ の場合

- この場合 $W = \mathbb{R}^m$ であり $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_m$ は \mathbb{R}^m の正規直交基底 ($\because \dim \mathbb{R}^m = m$).
- 行列 A は m 次正方行列で, $A^T A = I \in \mathbb{R}^{m \times m}$ は次のように表される:

$$\begin{array}{ccc} \boxed{A^T} & \times & \boxed{A} = \boxed{I} \\ m \times m \text{ (正方)} & & m \times m \text{ (正方)} \end{array}$$

⇨ この性質を満たす正方行列を直交行列と名付ける.

定義 (直交行列)

正方行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ が $A^T A = I$ を満たすとき, A を直交行列 (orthogonal matrix) という.

直交行列の性質

定理 (直交行列の諸性質)

正方行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ を直交行列とする. このとき,

(1) $A^T = A^{-1}$ (すなわち, $A^T A = A A^T = I$).

(2) 任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$ に対して $\|A\boldsymbol{x}\| = \|\boldsymbol{x}\|$. (等長性)

(2) の性質は, A による線形変換では長さが変わらないことを意味する.

補足 (逆行列の定義)

正方行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$ に対して,

$$AX = XA = I$$

を満たす行列 $X \in \mathbb{R}^{m \times m}$ が存在するとき, X を A の逆行列とよび A^{-1} と表す.

直交行列の積に関する性質

直交行列の性質: 直交行列の積は直交行列

$A, B \in \mathbb{R}^{m \times m}$ を直交行列とする. このとき AB も直交行列である.

証明 $(AB)^T(AB)$ を計算すると

$$(AB)^T(AB) = B^T A^T AB = B^T B = I.$$

よって AB は直交行列.



\mathbb{R}^2 の場合 以下の行列は直交行列 (各自確認せよ).

$$R = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (\theta \in \mathbb{R})$$

- R は θ だけ反時計周りに回転させる線形変換
- G は x 軸とのなす角が θ である直線に関する折り返しを表す線形変換

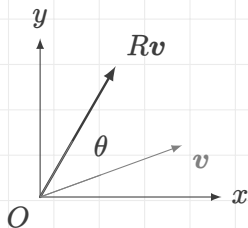


Figure: R による回転

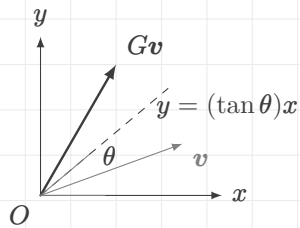


Figure: G による折り返し

⇨ R, G が等長性を満たすことは直観的にも理解できる.

目次

① 直交行列

② グラム・シュミットの直交化法

③ QR 分解

正規直交基底のありがたみ

定義 (正規直交基底, 再掲)

部分空間 W の基底 $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_k$ の各ベクトルのノルムが 1 で互いに直交するとき, 正規直交基底 (orthonormal basis) という.

正規直交基底の利点

- 内積やノルムの計算が簡単になる
- 部分空間への射影の計算が簡単になる
- 内積空間全体の正規直交基底から, 直交行列を構成できる
(直交行列の逆行列は転置をとるだけ)

⇒ 部分空間の基底から正規直交基底を構成したい

グラム・シュミットの直交化法の流れ

部分空間 W の基底 a_1, a_2, \dots, a_k から正規直交基底 q_1, q_2, \dots, q_k を構成する

方針 s 番目までのベクトル a_1, a_2, \dots, a_s が張る部分空間を

$$W_s := \langle a_1, a_2, \dots, a_s \rangle \quad (s = 1, 2, \dots, k)$$

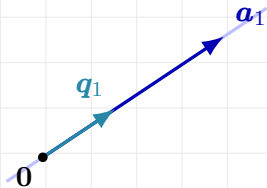
と表し, W_1, W_2, \dots, W_k の正規直交基底を帰納的に構成する.

$s = 1$ のとき

- $W_1 = \langle a_1 \rangle$ であり, q_1 を次のように定義する:

$$r_{11} = \|a_1\|, \quad q_1 = \frac{1}{r_{11}} a_1.$$

- $\|q_1\| = 1$ であり, $W_1 = \langle a_1 \rangle = \langle q_1 \rangle$.
- よって q_1 は W_1 の正規直交基底である.



$s = 2$ のとき

- $W_2 = \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \rangle$ であり, \mathbf{q}_1 は W_1 の正規直交基底である.
- \mathbf{a}_2 の W_1 への射影を求める. 正規直交基底を用いた射影の計算の仕方に従って

$$r_{12} := (\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{a}_2)$$

として $\mathbf{p}_2 = r_{12}\mathbf{q}_1$ とする. このとき \mathbf{p}_2 は W_1 への射影である.

- 射影の定義から $\mathbf{a}_2 - \mathbf{p}_2$ は \mathbf{q}_1 と直交. また, $\mathbf{a}_2 \notin W_1$ なので, $\mathbf{a}_2 - \mathbf{p}_2 \neq 0$.
- $r_{22} := \|\mathbf{a}_2 - \mathbf{p}_2\| (> 0)$ として

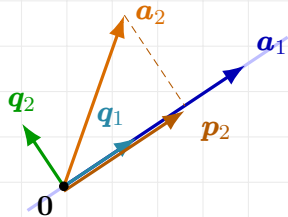
$$\mathbf{q}_2 = \frac{1}{r_{22}}(\mathbf{a}_2 - \mathbf{p}_2)$$

と定義する.

- このとき $\|\mathbf{q}_2\| = 1$ であり, \mathbf{q}_2 は \mathbf{q}_1 と直交. また,

$$W_2 = \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \rangle = \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2 \rangle$$

であり, $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ は W_2 の正規直交基底である.



一般の s のとき ($3 \leq s \leq k$)

- 互いに直交するノルムが 1 のベクトル $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{s-1}$ が求まっており,

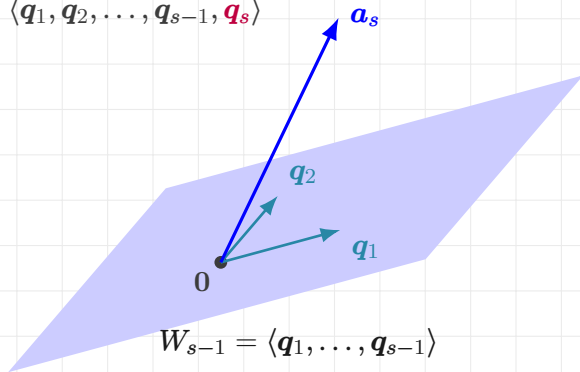
$$W_{s-1} = \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_{s-1} \rangle = \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{s-1} \rangle$$

が成り立っていると仮定する.

- この仮定のもと,

$$W_s = \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_{s-1}, \mathbf{a}_s \rangle = \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{s-1}, \mathbf{q}_s \rangle$$

かつ, $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{s-1}$ いずれとも直交する
ノルムが 1 のベクトル \mathbf{q}_s を求める.



- \mathbf{a}_s の W_{s-1} への射影を求める. $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{s-1}$ は W_{s-1} の正規直交基底なので,

$$r_{is} := (\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{a}_s) \quad (i = 1, 2, \dots, s-1)$$

とすると,

$$\mathbf{p}_s = \sum_{i=1}^{s-1} r_{is} \mathbf{q}_i$$

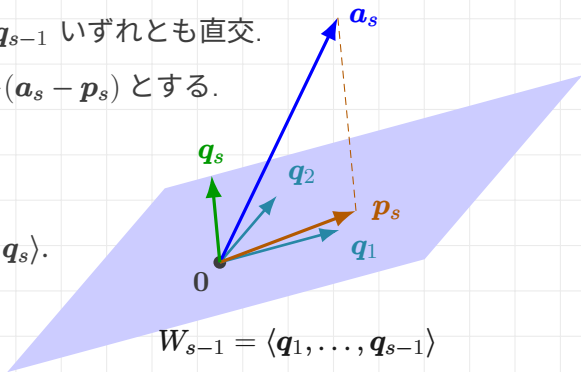
は W_{s-1} への射影である.

- 射影の定義から $\mathbf{a}_s - \mathbf{p}_s$ は $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{s-1}$ いずれとも直交.

- $r_{ss} := \|\mathbf{a}_s - \mathbf{p}_s\| (> 0)$ として $\mathbf{q}_s = \frac{1}{r_{ss}}(\mathbf{a}_s - \mathbf{p}_s)$ とする.

- \mathbf{q}_s はノルムが 1 のベクトルであり,
 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{s-1}$ いずれとも直交し,

$$W_s = \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_s \rangle = \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_s \rangle.$$



例題

次の3つのベクトルが張る部分空間の正規直交基底を構成せよ:

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ -4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} -2 \\ -1 \\ -4 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} -3 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

- $s = 1$ のとき,

$$r_{11} = \|\mathbf{a}_1\| = 5, \quad \mathbf{q}_1 = \frac{1}{r_{11}}\mathbf{a}_1 = \frac{1}{5}\mathbf{a}_1 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ -4 \end{pmatrix}.$$

- $s = 2$ のとき, \mathbf{a}_2 と $W_1 = \langle \mathbf{a}_1 \rangle$ の正規直交基底のベクトルとの内積は

$$r_{12} = \mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_2 = -4.$$

よって, \mathbf{a}_2 の $W_1 = \langle \mathbf{a}_1 \rangle$ への射影 \mathbf{p}_2 は

$$\mathbf{p}_2 = r_{12}\mathbf{q}_1 = -4\mathbf{q}_1 = -\frac{4}{5} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ -4 \end{pmatrix}.$$

したがって, \mathbf{q}_1 と直交するベクトル $\mathbf{a}_2 - \mathbf{p}_2$ とそのノルムは次のように求まる:

$$\mathbf{a}_2 - \mathbf{p}_2 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -6 \\ 3 \\ -12 \\ -6 \end{pmatrix}, \quad r_{22} = \|\mathbf{a}_2 - \mathbf{p}_2\| = 3.$$

$\mathbf{a}_2 - \mathbf{p}_2$ をノルムが 1 となるよう正規化する:

$$\mathbf{q}_2 = \frac{1}{r_{22}}(\mathbf{a}_2 - \mathbf{p}_2) = \frac{1}{3}(\mathbf{a}_2 - \mathbf{p}_2) = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ -4 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

- $s = 3$ のとき, \mathbf{a}_3 と $W_2 = \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \rangle$ の正規直交基底のベクトルとの内積は

$$r_{13} = \mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_3 = -1, \quad r_{23} = \mathbf{q}_2^T \mathbf{a}_3 = 1.$$

よって, \mathbf{a}_3 の $W_2 = \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2 \rangle$ への射影 \mathbf{p}_3 は

$$\mathbf{p}_3 = r_{13}\mathbf{q}_1 + r_{23}\mathbf{q}_2 = -\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -3 \\ -1 \\ -6 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

したがって, $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ と直交するベクトル $\mathbf{a}_3 - \mathbf{p}_3$ とそのノルムは次のように求まる:

$$\mathbf{a}_3 - \mathbf{p}_3 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -12 \\ 6 \\ 6 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad r_{33} = \|\mathbf{a}_3 - \mathbf{p}_3\| = 3.$$

$\mathbf{a}_3 - \mathbf{p}_3$ をノルムが 1 となるよう正規化する:

$$\mathbf{q}_3 = \frac{1}{r_{33}}(\mathbf{a}_3 - \mathbf{p}_3) = \frac{1}{3}(\mathbf{a}_3 - \mathbf{p}_3) = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -4 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

- 以上から, 正規直交基底

$$\mathbf{q}_1 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ -4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_2 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ -4 \\ -2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_3 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -4 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

が得られた.

グラム・シュミットの直交化法のまとめ

グラム・シュミットの直交化法のアルゴリズム

- 1: **Input:** 線形独立なベクトル $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k$ ($W = \langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k \rangle$)
- 2: $s = 1$, $r_{11} = \|\mathbf{a}_1\|$, $\mathbf{q}_1 = \frac{1}{r_{11}}\mathbf{a}_1$.
- 3: **for** $s = 2, 3, \dots, k$ **do**
- 4: $r_{is} = (\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{a}_s)$ ($i = 1, 2, \dots, s-1$)
- 5: $r_{ss} = \left\| \mathbf{a}_s - (r_{1s}\mathbf{q}_1 + r_{2s}\mathbf{q}_2 + \dots + r_{(s-1)s}\mathbf{q}_{s-1}) \right\|$
- 6: $\mathbf{q}_s = \frac{1}{r_{ss}} \left(\mathbf{a}_s - (r_{1s}\mathbf{q}_1 + r_{2s}\mathbf{q}_2 + \dots + r_{(s-1)s}\mathbf{q}_{s-1}) \right)$
- 7: **end for**
- 8: **Output:** $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_k$

目次

① 直交行列

② グラム・シュミットの直交化法

③ QR 分解

QR 分解

グラム・シュミットの直交化における \mathbf{q}_s の計算

$$\mathbf{q}_s = \frac{1}{r_{ss}} \left(\mathbf{a}_s - \left(r_{1s}\mathbf{q}_1 + r_{2s}\mathbf{q}_2 + \cdots + r_{(s-1)s}\mathbf{q}_{s-1} \right) \right) \quad (s = 1, 2, \dots, k)$$

- 上の式を $\mathbf{a}_s = \cdots$ という形に整理すると

$$\mathbf{a}_s = r_{1s}\mathbf{q}_1 + r_{2s}\mathbf{q}_2 + \cdots + r_{(s-1)s}\mathbf{q}_{s-1} + r_{ss}\mathbf{q}_s \quad (s = 1, 2, \dots, k).$$

- $s = 1, 2, \dots, k$ について書き下すと

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = r_{11}\mathbf{q}_1 \\ \mathbf{a}_2 = r_{12}\mathbf{q}_1 + r_{22}\mathbf{q}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_k = r_{1k}\mathbf{q}_1 + r_{2k}\mathbf{q}_2 + \cdots + r_{(k-1)k}\mathbf{q}_{k-1} + r_{kk}\mathbf{q}_k \end{cases} \quad (1)$$

QR 分解

- 3つの行列 $A, Q \in \mathbb{R}^{m \times k}, R \in \mathbb{R}^{k \times k}$ を次のように定義する:

$$A = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_k), \quad Q = (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_k), \quad R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1k} \\ 0 & r_{22} & \cdots & r_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{kk} \end{pmatrix}$$

- このとき, 式 (1) は

$$A = QR$$

であり, A は列ベクトルが正規直交基底をなす行列 Q と上三角行列 R の積で表される.

- このような行列の分解を **QR 分解 (QR decomposition)** という.

定理 (QR 分解可能性)

行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times k}$ の列ベクトルが線形独立ならば, A は QR 分解可能.

例題

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ -4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} -2 \\ -1 \\ -4 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} -3 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

を列ベクトルにもつ行列 $A = (\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) \in \mathbb{R}^{4 \times 3}$ の QR 分解を求めよ.

- 先の例題の結果より, $\langle \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3 \rangle$ の正規直交基底

$$\mathbf{q}_1 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ -4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_2 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ -4 \\ -2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_3 = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -4 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

と $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ は次の関係にある:

$$\mathbf{a}_1 = 5\mathbf{q}_1, \quad \mathbf{a}_2 = -4\mathbf{q}_1 + 3\mathbf{q}_2, \quad \mathbf{a}_3 = -\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + 3\mathbf{q}_3$$

- よって, 行列 A は

$$\begin{aligned} A = (\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \mathbf{a}_3) &= (\mathbf{q}_1 \quad \mathbf{q}_2 \quad \mathbf{q}_3) \begin{pmatrix} 5 & -4 & -1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \\ &= \underbrace{\frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 & -2 & -4 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & -4 & 2 \\ -4 & -2 & 1 \end{pmatrix}}_Q \underbrace{\begin{pmatrix} 5 & -4 & -1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}}_R \end{aligned}$$

と直交行列 Q と上三角行列 R の積として表される.

QR 分解を用いた最小 2 乗法

- 射影計算で解く次の正規方程式について考える:

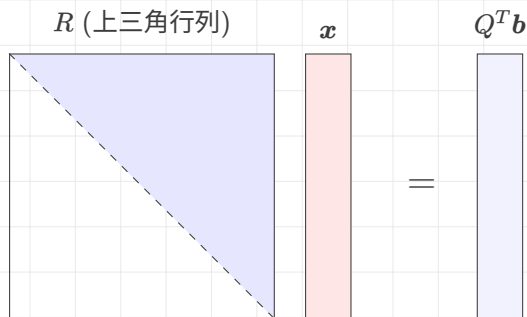
$$A^T A x = A^T b.$$

- $A = QR$ と QR 分解した結果を代入すると

$$\begin{aligned} A^T A x = A^T b &\iff (QR)^T Q R x = (QR)^T b \\ &\iff R^T Q^T Q R x = R^T Q^T b \\ &\iff R^T R x = R^T Q^T b && \because Q^T Q = I \\ &\iff R x = Q^T b && \because R \text{ は対角成分が正で正則} \end{aligned}$$

- 線形方程式 $R x = Q^T b$ は最後の成分から順に解けば簡単に解ける (後退代入).

後退代入による線形方程式の求解

$$R \text{ (上三角行列)} \quad x \quad = \quad Q^T b$$


- 一番下の行に注目すれば、 x の末尾の成分は直ちに求まる。
- この結果を下から 2 番目の行に代入すれば、 x の下から 2 番目の成分が求まる。
- 下の成分からの代入を繰り返して、 x のすべての成分が求まる。

例題

$A = \begin{pmatrix} 3 & -6 \\ 4 & -8 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} -1 \\ 7 \\ 2 \end{pmatrix}$ とする. 正規方程式 $A^T A \mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$ を QR 分解を用いて解け.

- A の列ベクトルに対してグラム・シュミットの直交化法を適用すると,

$$Q = \begin{pmatrix} 3/5 & 0 \\ 4/5 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} 5 & -10 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

として, $A = QR$ と QR 分解できる.

- したがって, $R\mathbf{x} = Q^T \mathbf{b}$ は

$$\begin{pmatrix} 5 & -10 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/5 & 4/5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ 7 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

- よって $x_2 = 2, x_1 = \frac{1}{5}(5 + 10x_2) = 5$ と解が求まる.

まとめ

講義の振り返り

- 直交行列の定義と性質
- グラム・シュミットの直交化法の手続き
- グラム・シュミットの直交化法に基づく QR 分解

自宅での復習

- グラム・シュミットの直交化法の例を自分でも計算する
- QR 分解を用いた最小 2 乗法の流れを確認する