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

目次

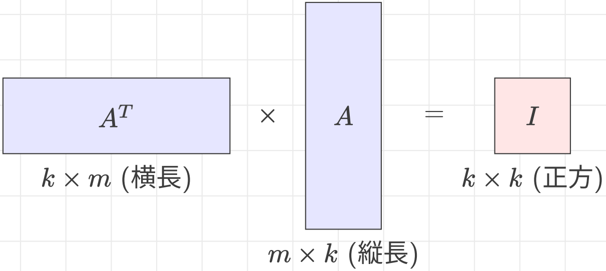
正規直交基底を列ベクトルとする行列の性質

- 部分空間 $W \subseteq \mathbb{R}^m$ の正規直交基底を $\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_k \in W$ 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

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

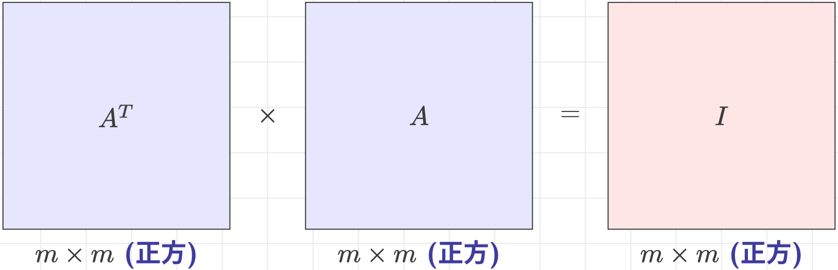
とすると,

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



$k = m$ の場合

- この場合 $W = \mathbb{R}^m$ であり $\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_m$ 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:



$\rightsquigarrow$ **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，$A^T A = AA^T = I$).

(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．

$\boxed{\text{証明}}$ $(AB)^T(AB)$ を計算すると

$$(AB)^T(AB) = B^TA^TAB = B^TB = I.$$

よって AB は直交行列． $\square$

$\boxed{\mathbb{R}^2 \text{ の場合}}$ 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

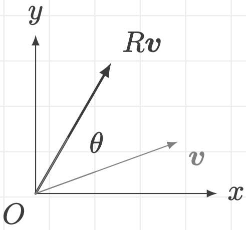


Figure: R による回転

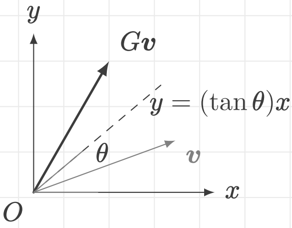


Figure: G による折り返し

$\rightsquigarrow$ **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

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 $\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_k$ 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)

$\rightsquigarrow$ **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 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_k$ から正規直交基底 $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_k$ を構成する

$\boxed{\text{方針}}$ s 番目までのベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_s$ が張る部分空間を

$$W_s := \langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_s \rangle \quad (s = 1, 2, \ldots, k)$$

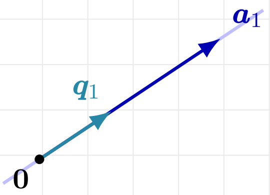
と表し, $W_1, W_2, \ldots, W_k$ の正規直交基底を帰納的に構成する.

<u>$s = 1$ のとき</u>

- $W_1 = \langle \boldsymbol{a}_1 \rangle$ であり, $\boldsymbol{q}_1$ を次のように定義する:

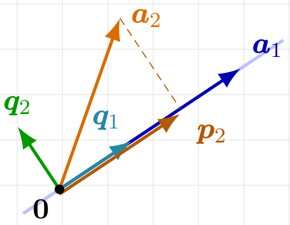
$$r_{11} = \|\boldsymbol{a}_1\|, \quad \boldsymbol{q}_1 = \frac{1}{r_{11}} \boldsymbol{a}_1.$$

- $\|\boldsymbol{q}_1\| = 1$ であり, $W_1 = \langle \boldsymbol{a}_1 \rangle = \langle \boldsymbol{q}_1 \rangle$.
- よって $\boldsymbol{q}_1$ は W_1 の正規直交基底である.



$s=2$ のとき

- $W_2 = \langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2 \rangle$ であり, $\boldsymbol{q}_1$ は W_1 の正規直交基底である.
- $\boldsymbol{a}_2$ 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
$$r_{12} := (\boldsymbol{q}_1 \cdot \boldsymbol{a}_2)$$
として $\boldsymbol{p}_2 = r_{12}\boldsymbol{q}_1$ とする．このとき $\boldsymbol{p}_2$ は W_1 への射影である.
- 射影の定義から $\boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{p}_2$ は $\boldsymbol{q}_1$ と直交．また，$\boldsymbol{a}_2 \notin W_1$ なので, $\boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{p}_2 \neq \boldsymbol{0}$.
- $r_{22} := \|\boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{p}_2\|$ (> 0) として
$$\boldsymbol{q}_2 = \frac{1}{r_{22}}(\boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{p}_2)$$
と定義する.
- このとき $\|\boldsymbol{q}_2\| = 1$ であり, $\boldsymbol{q}_2$ は $\boldsymbol{q}_1$ と直交．また,
$$W_2 = \langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2 \rangle = \langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2 \rangle$$
であり, $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2$ 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 $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_{s-1}$ が求まっており，

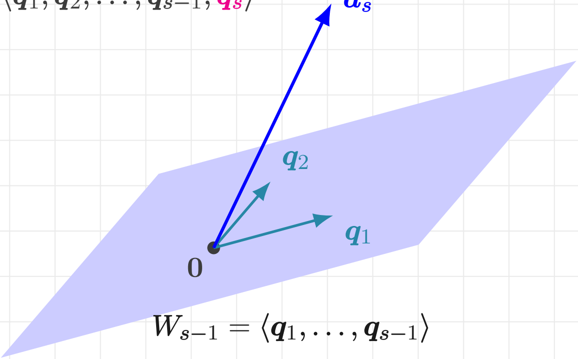
$$W_{s-1} = \langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{s-1} \rangle = \langle \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_{s-1} \rangle$$

  が成り立っていると仮定する．

- この仮定のもと，

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

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



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

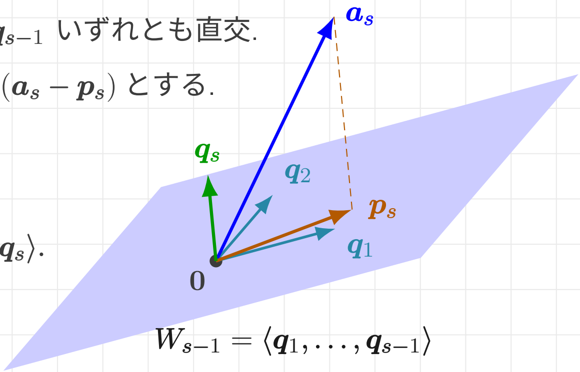
$$r_{is} := (\boldsymbol{q}_i \cdot \boldsymbol{a}_s) \ (i = 1, 2, \dots, s-1)$$

  とすると，

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

  は W_{s-1} への射影である．
- 射影の定義から $\boldsymbol{a}_s - \boldsymbol{p}_s$ は $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \dots, \boldsymbol{q}_{s-1}$ いずれとも直交．
- $r_{ss} := \|\boldsymbol{a}_s - \boldsymbol{p}_s\| \ (> 0)$ として $\boldsymbol{q}_s = \dfrac{1}{r_{ss}}(\boldsymbol{a}_s - \boldsymbol{p}_s)$ とする．
- $\boldsymbol{q}_s$ はノルムが 1 のベクトルであり，
  $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \dots, \boldsymbol{q}_{s-1}$ いずれとも直交し，

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



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:

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

- $s = 1$ のとき,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- $s=3$ のとき，$\boldsymbol{a}_3$ と $W_2=\langle \boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2\rangle$ の正規直交基底のベクトルとの内積は
$$r_{13}=\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_3=-1,\quad r_{23}=\boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_3=1.$$
よって，$\boldsymbol{a}_3$ の $W_2=\langle \boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2\rangle$ への射影 $\boldsymbol{p}_3$ は
$$\boldsymbol{p}_3=r_{13}\boldsymbol{q}_1+r_{23}\boldsymbol{q}_2=-\boldsymbol{q}_1+\boldsymbol{q}_2=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}-3\\-1\\-6\\2\end{pmatrix}.$$
したがって, $\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2$ と直交するベクトル $\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{p}_3$ とそのノルムは次のように求まる:
$$\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{p}_3=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}-12\\6\\6\\3\end{pmatrix},\quad r_{33}=\|\boldsymbol{a}_3-\boldsymbol{p}_3\|=3.$$

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

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

- 以上から，正規直交基底

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

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

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

目次

QR 分解

グラム・シュミットの直交化における $\boldsymbol{q}_s$ の計算

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

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

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

- $s = 1, 2, \ldots, k$ について書き下すと

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

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:

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

- 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

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

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

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

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

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

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

- よって, 行列 A は

$$A = \begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \boldsymbol{q}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & -4 & -1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\frac{1}{5} \begin{pmatrix} 1 & -2 & -4 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & -4 & 2 \\ -4 & -2 & 1 \end{pmatrix}}_{Q} \underbrace{\begin{pmatrix} 5 & -4 & -1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}}_{R}$$

と直交行列 Q と上三角行列 R の積として表される.

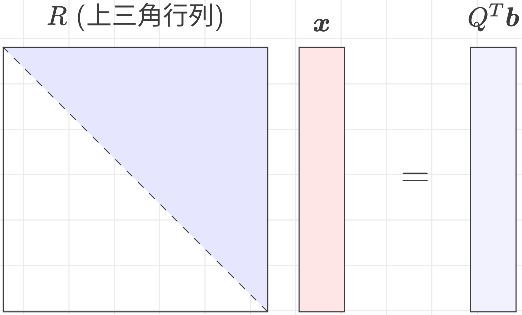
QR 分解を用いた最小 2 乗法

- 射影計算で解く次の正規方程式について考える:

$$A^T A\boldsymbol{x} = A^T\boldsymbol{b}.$$

- $A = QR$ と QR 分解した結果を代入すると

後退代入による線形方程式の求解



- 一番下の行に注目すれば，$\boldsymbol{x}$ 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，$\boldsymbol{x}$ 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，$\boldsymbol{x}$ のすべての成分が求まる．

例題

$A = \begin{pmatrix} 3 & -6 \\ 4 & -8 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} -1 \\ 7 \\ 2 \end{pmatrix}$ とする．正規方程式 $A^T A\boldsymbol{x} = A^T\boldsymbol{b}$ 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，$R\boldsymbol{x} = Q^T\boldsymbol{b}$ 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