東海大学紀要情報通信学部
Vol.16,2023,pp.30-33

トピックス

大学初年次における数学教材の提案（その 46）
～ 行列の QR 分解 ～

貴田 研司[*1]

A Suggestion on Mathematical Materials for Freshman Education Vol.44
~ QR Factorization of Matrix ~

by

Kenshi KIDA[*1]

(received on Nov.24,2023 & accepted on Jan.26,2024)

あらまし

本論文においては，いくつかよく知られている行列の積への分解の中から、直交行列と上三角行列の積に分解するもので，QR 分解と呼ばれるものについて，具体例を交えながら解説する．

Abstract

In this paper, we give explanation of QR decomposition that is factorizations into orthogonal matrices and upper triangular matrices. We present several concreate examples

キーワード : QR 分解，三角行列，直交行列，グラム - シュミットの直交化法，ハウスホルダー変換

Keywords: *QR Factorization, Triangular Matrix, Orthogonal Matrix, Gram-Schmidt, Householder Transformation*

1. はじめに

大学初年次に学ぶ線形代数において，行列の積は重要な演算である．そこで，行列の分解（行列を 2 つの行列の積で表す）を考えることがある[1)]．例えば，n 個の未知数を含む n 本の連立一次方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，ただし

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x}=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

に関連して，LU 分解（L は下三角行列，Uは上三角行列）などがある．

本論文では，行列（正方行列とは限らない）を，直交行列と上三角行列の積表す QR分解について，具体例を示しながら解説する．また，QR分解には固有値計算や最小二乗法への応用が知られている

2. QR 分解

行列の QR 分解について，主要定理と具体的な計算例を挙げる．

定理（$\boldsymbol{QR}$分解）

1次独立な列をもつ任意の行列Aは積$A=QR$に分解され，Q の列は正規直交系であり，R は正則な上三角行列である．もし，元の行列Aが正方行列であれば，その２つの因子Q とR も正方行列であり，Q は直交行列となる．

*1 理系教育センター 教授

例題 [2)]

次の行列AをQR分解せよ．

(1) $A=\begin{pmatrix}1&1&0\\1&0&1\\0&1&1\end{pmatrix}$

(2) $A=\begin{pmatrix}3&0\\4&5\end{pmatrix}$

(3) $A=\begin{pmatrix}1&1\\2&3\\2&1\end{pmatrix}$

（解答）グラム・シュミットの正規直交化法を用いる．

ハウスホルダー変換を用いた方法もよく知られているが，参考文献 [3)4)]などを参照されたい．

【参考】グラム・シュミットの正規直交化法

内積$(\ ,\ )$をもつ計量線形空間Vにおいて，1 次独立なベクトルの系$\boldsymbol{a_1},\cdots,\boldsymbol{a_r}$が与えられたとき

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{q_1}&=\frac{\boldsymbol{v_1}}{\|\boldsymbol{v_1}\|},\quad \boldsymbol{v_1}=\boldsymbol{a_1}\\
\boldsymbol{q_2}&=\frac{\boldsymbol{v_2}}{\|\boldsymbol{v_2}\|},\quad \boldsymbol{v_2}=\boldsymbol{a_2}-\frac{(\boldsymbol{a_2},\boldsymbol{v_1})}{(\boldsymbol{v_1},\boldsymbol{v_1})}\boldsymbol{v_1}\\
\boldsymbol{q_3}&=\frac{\boldsymbol{v_3}}{\|\boldsymbol{v_3}\|},\quad \boldsymbol{v_3}=\boldsymbol{a_3}-\frac{(\boldsymbol{a_3},\boldsymbol{v_1})}{(\boldsymbol{v_1},\boldsymbol{v_1})}\boldsymbol{v_1}-\frac{(\boldsymbol{a_3},\boldsymbol{v_2})}{(\boldsymbol{v_2},\boldsymbol{v_2})}\boldsymbol{v_2}\\
&\vdots\\
\boldsymbol{q_r}&=\frac{\boldsymbol{v_r}}{\|\boldsymbol{v_r}\|},\quad \boldsymbol{v_r}=\boldsymbol{a_r}-\frac{(\boldsymbol{a_r},\boldsymbol{v_1})}{(\boldsymbol{v_1},\boldsymbol{v_1})}\boldsymbol{v_1}-\cdots-\frac{(\boldsymbol{a_r},\boldsymbol{v_{r-1}})}{(\boldsymbol{v_{r-1}},\boldsymbol{v_{r-1}})}\boldsymbol{v_{r-1}}
\end{aligned}$$

として，正規直交系$\{\boldsymbol{q_1},\cdots,\boldsymbol{q_r}\}$を作ることができる．

(1) $\boldsymbol{a_1}=\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix},\ \boldsymbol{a_2}=\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix},\ \boldsymbol{a_3}=\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$とおいて，グラム・シュミットの正規直交化法を用いる．

$$\boldsymbol{v_1}=\boldsymbol{a_1}=\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{q_1}=\frac{\boldsymbol{v_1}}{\|\boldsymbol{v_1}\|}=\sqrt{\frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{2}}}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{v_1}=\sqrt{2}\boldsymbol{q_1}$$

$$\boldsymbol{v_2}=\boldsymbol{a_2}-\frac{(\boldsymbol{a_2},\boldsymbol{v_1})}{(\boldsymbol{v_1},\boldsymbol{v_1})}\boldsymbol{v_1}=\boldsymbol{a_2}-\frac{1}{2}\boldsymbol{v_1}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\-\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{q_2}=\frac{\boldsymbol{v_2}}{\|\boldsymbol{v_2}\|}=\sqrt{\frac{2}{3}}\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\-\frac{1}{2}\\\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{v_2}=\sqrt{\frac{3}{2}}\ \boldsymbol{q_2}$$

$$\boldsymbol{v_3}=\boldsymbol{a_3}-\frac{(\boldsymbol{a_3},\boldsymbol{v_1})}{(\boldsymbol{v_1},\boldsymbol{v_1})}\boldsymbol{v_1}-\frac{(\boldsymbol{a_3},\boldsymbol{v_2})}{(\boldsymbol{v_2},\boldsymbol{v_2})}\boldsymbol{v_2}=\boldsymbol{a_3}-\frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{2}}\boldsymbol{v_1}-\frac{\boldsymbol{1}}{\boldsymbol{3}}\boldsymbol{v_2}=\frac{2}{3}\begin{pmatrix}-1\\1\\1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{q_3}=\frac{\boldsymbol{v_3}}{\|\boldsymbol{v_3}\|}=\sqrt{\frac{3}{4}}\begin{pmatrix}-\frac{2}{3}\\\frac{2}{3}\\\frac{2}{3}\end{pmatrix},\boldsymbol{v_3}=\sqrt{\frac{4}{3}}\ \boldsymbol{q_3}$$

再構成すると

$$\boldsymbol{a_1}=\boldsymbol{v_1}=\sqrt{2}\boldsymbol{q_1}\ ,$$

$$\boldsymbol{a_2} = \frac{1}{2}\boldsymbol{v_1} + \boldsymbol{v_2} = \sqrt{\frac{1}{2}}\,\boldsymbol{q_1} + \sqrt{\frac{3}{2}}\,\boldsymbol{q_2}\ ,$$

$$\boldsymbol{a_3} = \frac{1}{2}\boldsymbol{v_1} + \frac{1}{3}\boldsymbol{v_2} + \boldsymbol{v_3} = \sqrt{\frac{1}{2}}\,\boldsymbol{q_1} + \sqrt{\frac{1}{6}}\,\boldsymbol{q_2} + \sqrt{\frac{4}{3}}\,\boldsymbol{q_3}$$

であるから

$$(\boldsymbol{a_1}, \boldsymbol{a_2}, \boldsymbol{a_3}) = (\boldsymbol{q_1}, \boldsymbol{q_2}, \boldsymbol{q_3})\begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & \sqrt{\frac{1}{6}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{4}{3}} \end{pmatrix}$$

すなわち

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}} & -\frac{2}{3}\sqrt{\frac{3}{4}} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{2}{3}\sqrt{\frac{3}{4}} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{2}{3}\sqrt{\frac{3}{4}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{1}{2}} \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & \sqrt{\frac{1}{6}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{4}{3}} \end{pmatrix}$$

(2) $\boldsymbol{a_1} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{a_2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 5 \end{pmatrix}$ とおいて，グラム・シュミットの正規直交化法を用いる．

$$\boldsymbol{v_1} = \boldsymbol{a_1} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{q_1} = \frac{\boldsymbol{v_1}}{\|\boldsymbol{v_1}\|} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v_1} = 5\boldsymbol{q_1}$$

$$\boldsymbol{v_2} = \boldsymbol{a_2} - \frac{(\boldsymbol{a_2}, \boldsymbol{v_1})}{(\boldsymbol{v_1}, \boldsymbol{v_1})}\boldsymbol{v_1} = \boldsymbol{a_2} - \frac{4}{5}\boldsymbol{v_1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 5 \end{pmatrix} - \frac{4}{5}\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \frac{3}{5}\begin{pmatrix} -4 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{q_2} = \frac{\boldsymbol{v_2}}{\|\boldsymbol{v_2}\|} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} -4 \\ 3 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v_2} = 3\,\boldsymbol{q_2}$$

再構成すると

$$\boldsymbol{a_1} = \boldsymbol{v_1} = 5\boldsymbol{q_1}\ ,$$

$$\boldsymbol{a_2} = \frac{4}{5}\boldsymbol{v_1} + \boldsymbol{v_2} = 4\,\boldsymbol{q_1} + 3\,\boldsymbol{q_2}$$

であるから

$$(\boldsymbol{a_1} \quad \boldsymbol{a_2}) = (\boldsymbol{q_1} \quad \boldsymbol{q_2})\begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

すなわち

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

(3) $\boldsymbol{a_1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{a_2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$ とおいて，グラム・シュミットの正規直交化法を用いる．

$$\boldsymbol{v_1} = \boldsymbol{a_1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{q_1} = \frac{\boldsymbol{v_1}}{\|\boldsymbol{v_1}\|} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v_1} = 3\boldsymbol{q_1}$$

$$\boldsymbol{v_2} = \boldsymbol{a_2} - \frac{(\boldsymbol{a_2}, \boldsymbol{v_1})}{(\boldsymbol{v_1}, \boldsymbol{v_1})}\boldsymbol{v_1} = \boldsymbol{a_2} - \boldsymbol{v_1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{q_2} = \frac{\boldsymbol{v_2}}{\|\boldsymbol{v_2}\|} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{v_2} = \sqrt{2}\,\boldsymbol{q_2}$$

再構成すると

$$\boldsymbol{a_1} = \boldsymbol{v_1} = 3\boldsymbol{q_1} \ ,$$

$$\boldsymbol{a_2} = \boldsymbol{v_1} + \boldsymbol{v_2} = 3\,\boldsymbol{q_1} + \sqrt{2}\,\boldsymbol{q_2} \ ,$$

であるから

$$(\boldsymbol{a_1} \quad \boldsymbol{a_2}) = (\boldsymbol{q_1} \quad \boldsymbol{q_2})\begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

すなわち

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

参考文献

1) ギルバート・ストラング著，松崎公紀・平鍋健児訳「教養の線形代数」近代科学社，2023

2)ギルバート・ストラング著，山口昌也哉監訳，井上昭訳「線形代数とその応用」産業図書，1978

3)伊理正夫著「一般線形代数」岩波書店，2003

4) https://cattech-lab.com/science-tools/lecture-mini-qr-decomposition/「【科学技術計算講座ミニ】行列のQR分解（ハウスホルダー変換)」