直交化の基本

orthogonalization

1　導入

この講義で最重要なのは、**直交化とは、もとの部分空間を変えずに、基底を計算しやすい直交基底へ組み替えること**だということである。

一次独立な基底があっても、そのままでは長さや射影を計算しにくい場合がある。互いに直交する基底へ変更できれば、係数や長さの計算が明確になる。

2　用語と定義

直交基底とは、基底の各ベクトルどうしが直交している基底である。

正規直交基底とは、互いに直交し、さらに長さが 1 の基底である。

グラム・シュミット法とは、一次独立なベクトル列から、同じ部分空間を張る直交基底を構成する手順である。

3　方針

もとの基底 $v_1, v_2, \dots$ から開始し、前段階で構成した方向への成分を順に除去する。こうすると、「これまでに構成した空間に重なる部分」が消え、新しい方向だけが残る。

4　直感的な説明

v_2 が v_1 と同方向の成分を共有しているなら、その「重なっている部分」を除去すれば、v_1 と直交する新しいベクトルが得られる。これを順に反復するのがグラム・シュミット法である。

5　厳密な説明

5.1　0. 射影を除去するという発想

$u \neq 0$ に対して、v の u 方向への射影は

$$\mathrm{proj}_u(v) = \frac{\langle v, u \rangle}{\langle u, u \rangle} u$$

である。この式は、v のうち u と同じ方向をもつ成分を抽出する。直交化では、新しいベクトルから既存の直交方向への射影を順に除去する。

複素内積空間では、射影係数に複素共役の規約が反映される。この系列では第 1 変数を線型とするため、係数は $\langle v, u \rangle / \langle u, u \rangle$ である。第 2 変数を線型にする流儀では、共役の位置が変わる。

→ 講義 複素内積とユニタリ行列 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/複素内積とユニタリ行列-講義/

5.2 1. 2 本の場合

ここで射影や 内積 の意味がまだ曖昧なら、先にこちらを確認すると理解が安定する。

→ 講義 内積空間の基本 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/内積空間の基本-講義/

一次独立な v_1, v_2 から開始する。
まず

$$u_1 = v_1$$

とおく。つぎに v_2 から u_1 方向の成分を除去して

$$u_2 = v_2 - \frac{\langle v_2, u_1 \rangle}{\langle u_1, u_1 \rangle} u_1$$

とすると、u_1 と u_2 は 直交 する。
これを実際に確認すると、

$$\langle u_2, u_1 \rangle = \left\langle v_2 - \frac{\langle v_2, u_1 \rangle}{\langle u_1, u_1 \rangle} u_1, u_1 \right\rangle$$

したがって、

$$\langle u_2, u_1 \rangle = \langle v_2, u_1 \rangle - \frac{\langle v_2, u_1 \rangle}{\langle u_1, u_1 \rangle} \langle u_1, u_1 \rangle = 0$$

である。つまり、v_2 から u_1 方向の射影だけを除去すると、u_1 に 直交 する成分だけが残る。

5.3 2. 一般の 形

$v_1, \ldots, v_n$ から

$$u_1 = v_1$$

$$u_k = v_k - \sum_{j=1}^{k-1} \frac{\langle v_k, u_j \rangle}{\langle u_j, u_j \rangle} u_j$$

で $u_1, \ldots, u_n$ を構成すると、これらは互いに 直交 し、もとの基底と同じ部分空間を張る。
ここで 重要 なのは、新 しい u_k は v_k から前の $u_1, \ldots, u_{k-1}$ の線型結合を除去して構成されるため、

$$u_k \in \operatorname{span}(v_1, \ldots, v_k)$$

である。したがって $u_1, \ldots, u_k$ は 必 ず $v_1, \ldots, v_k$ の張る空間の中にある。
逆 に

$$v_k = u_k + \sum_{j=1}^{k-1} \frac{\langle v_k, u_j \rangle}{\langle u_j, u_j \rangle} u_j$$

と復元できるので、

$$v_k \in \operatorname{span}(u_1, \ldots, u_k)$$

である。したがって 両者 は同じ部分空間を張る。

5.4 3. 正規化

長さ 1 にそろえたければ

$$e_k = \frac{u_k}{\| u_k \|}$$

とすれば、$e_1, \dots, e_n$ は正規直交基底になる。

5.5 4. 最小二乗法との接続

直交化は、最小二乗法の基礎の 1 つである。$Ax = b$ が厳密には解けない場合、b を A の列空間へ直交射影し、その射影に対応する x を選択する。残差

$$r = b - Ax$$

は列空間に直交するため、

$$A^T(b - Ax) = 0$$

という正規方程式が得られる。つまり、グラム・シュミット法で直交基底を構成する発想は、近似解を最良にする射影の理論と同じ構造をもつ。

6 判定基準

- 基底はあるが互いに直交していないとき、直交化を検討する。
- 射影、最小二乗、フーリエ展開のように「直交した成分に分解したい」なら、グラム・シュミット法が背景にある。
- 部分空間そのものは変えず、基底だけ扱いやすくしたいときの道具である。

7 どこまで成り立つか

この手順は内積が定義された空間で、もとの $v_1, \dots, v_n$ が一次独立な場合に用いる。もし途中で $u_k = 0$ になったら、それはもとの列が一次独立でなかったことを意味する。また複素内積空間では内積の共役を意識して式を記述する必要がある。

8 最終形

$$\boxed{u_k = v_k - \sum_{j=1}^{k-1} \frac{\langle v_k, u_j \rangle}{\langle u_j, u_j \rangle} u_j}$$

$$\boxed{e_k = \frac{u_k}{\| u_k \|}}$$

$$\boxed{\mathrm{proj}_u(v) = \frac{\langle v, u \rangle}{\langle u, u \rangle} u}$$

9 一言でいうと

- 直交化は、同じ空間を張る基底を、計算しやすい直交基底へ構成し直す手順である。

10 演習リンク

→ 基本演習 内積・直交・射影 exercise math linear-algebra
https://study.bem130.com/exercise/math/linear-algebra/内積・直交・射影-基本演習/

→ 基本演習 複素内積とユニタリ行列 exercise math linear-algebra
https://study.bem130.com/exercise/math/linear-algebra/複素内積とユニタリ行列-基本演習/

11 関連リンク

→ 講義 内積空間の基本 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/内積空間の基本-講義/

→ 講義 複素内積とユニタリ行列 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/複素内積とユニタリ行列-講義/

→ 講義 直交補空間と射影 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/直交補空間と射影-講義/

→ 講義 最小二乗法の基本 lecture math linear-algebra
https://study.bem130.com/lecture/math/linear-algebra/最小二乗法の基本-講義/