

大学数学のアトリエ | 線形代数 第 7 章 内積空間

No.3 グラム・シュミットの直交化

この回のゴール

- ベクトルの正射影の公式を説明できる.
- グラム・シュミットの直交化法で, 1 次独立なベクトルから正規直交系を作れる.
- 部分空間や多項式の空間の正規直交基底を求められる.
- QR 分解の考え方を説明できる.

以下, V を内積空間とする. No.2 で見たように正規直交基底はとても便利である. では, 正規直交基底はいつでも作れるのだろうか. その具体的な作り方が, グラム・シュミットの直交化法である.

■ 1. 1 本のベクトルへの正射影

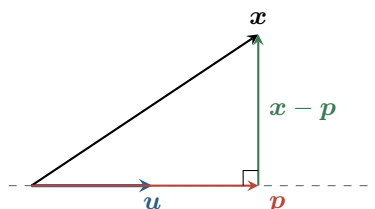
定理 1 正射影

$u \neq 0$ とする. $x \in V$ に対して

$$p = \frac{(x, u)}{(u, u)} u$$

とおくと, $x - p$ は u と直交する. 特に u が単位ベクトルなら $p = (x, u)u$.

【証明】 $(x - p, u) = (x, u) - \frac{(x, u)}{(u, u)}(u, u) = 0$. □



p を x の u 方向への正射影という. x から「 u 方向の成分」を引くと, u に直交する成分だけが残る.

■ 2. グラム・シュミットの直交化法

この「引き算」をくり返すと, 1 次独立なベクトルから直交系が作れる.

定理 2 グラム・シュミットの直交化法

$a_1, \dots, a_k \in V$ を 1 次独立とする. 次のように $e_1, \dots, e_k$ を順に定める.

$$\begin{aligned} b_1 &= a_1, & e_1 &= \frac{b_1}{\|b_1\|}, \\ b_2 &= a_2 - (a_2, e_1)e_1, & e_2 &= \frac{b_2}{\|b_2\|}, \\ b_3 &= a_3 - (a_3, e_1)e_1 - (a_3, e_2)e_2, & e_3 &= \frac{b_3}{\|b_3\|}, \\ &\vdots & & \\ b_k &= a_k - \sum_{i=1}^{k-1} (a_k, e_i)e_i, & e_k &= \frac{b_k}{\|b_k\|}. \end{aligned}$$

このとき $e_1, \dots, e_k$ は正規直交系で, 各 j について $\langle e_1, \dots, e_j \rangle = \langle a_1, \dots, a_j \rangle$ が成り立つ.

【証明】 j に関する帰納法. $e_1, \dots, e_{j-1}$ が正規直交系で $\langle e_1, \dots, e_{j-1} \rangle = \langle a_1, \dots, a_{j-1} \rangle$ とする.

$b_j \neq 0$: もし $b_j = 0$ なら $a_j \in \langle e_1, \dots, e_{j-1} \rangle = \langle a_1, \dots, a_{j-1} \rangle$ となり, 1 次独立性に反する. よって正規化できる.

直交性: $i < j$ について $(b_j, e_i) = (a_j, e_i) - \sum_{l < j} (a_j, e_l)(e_l, e_i) = (a_j, e_i) - (a_j, e_i) = 0$.

生成する空間: e_j は a_j と $e_1, \dots, e_{j-1}$ の 1 次結合で, 逆に $a_j = \|b_j\|e_j + \sum_{i < j} (a_j, e_i)e_i$. よって両者の生成する空間は等しい. $\square$

定理 3

有限次元の内積空間は, 正規直交基底をもつ.

【証明】 基底を 1 つとり, グラム・シュミットの直交化法を使えば, 同じ空間を生成する正規直交系 (つまり正規直交基底) が得られる. $\square$

計算のコツ

- 途中で分数や根号が出やすい. b_j を求めたら, 定数倍して整数にしてから正規化してよい (向きと方向は変わらない).
- 正規化を最後にまとめる方法もある: $b_j = a_j - \sum_{i < j} \frac{(a_j, b_i)}{(b_i, b_i)} b_i$ と直交系 b_j を先に作り, 最後に $e_j = b_j / \|b_j\|$.
- 求めた e_j どうしの内積が 0 になるかを確かめると検算になる.

■ 3. 計算例

例題 1

$\mathbf{a}_1 = {}^t(1, 1, 0)$, $\mathbf{a}_2 = {}^t(1, 0, 1)$, $\mathbf{a}_3 = {}^t(0, 1, 1)$ から, グラム・シュミットの直交化法で $\mathbb{R}^3$ の正規直交基底を作れ.

【解答】 $\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} {}^t(1, 1, 0)$.

$(\mathbf{a}_2, \mathbf{e}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}$ より $\mathbf{b}_2 = {}^t(1, 0, 1) - \frac{1}{2} {}^t(1, 1, 0) = \frac{1}{2} {}^t(1, -1, 2)$. 正規化して $\mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} {}^t(1, -1, 2)$.

$(\mathbf{a}_3, \mathbf{e}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $(\mathbf{a}_3, \mathbf{e}_2) = \frac{1}{\sqrt{6}}(-1+2) = \frac{1}{\sqrt{6}}$ より

$$\mathbf{b}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{2}{3} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

正規化して $\mathbf{e}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} {}^t(-1, 1, 1)$.

確認: $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3) = \frac{1}{\sqrt{6}}(-1+1) = 0$, $(\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) = \frac{1}{\sqrt{18}}(-1-1+2) = 0$.

例題 2 部分空間の正規直交基底

平面 $W = \{ {}^t(x, y, z) \mid x + y + z = 0 \}$ の正規直交基底を求めよ.

【解答】 W は第6章 No.1 例題2の固有空間 $W(1)$ で, 基底 $\mathbf{a}_1 = {}^t(-1, 1, 0)$, $\mathbf{a}_2 = {}^t(-1, 0, 1)$. $\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} {}^t(-1, 1, 0)$. $(\mathbf{a}_2, \mathbf{e}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}$ より $\mathbf{b}_2 = {}^t(-1, 0, 1) - \frac{1}{2} {}^t(-1, 1, 0) = \frac{1}{2} {}^t(-1, -1, 2)$, $\mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} {}^t(-1, -1, 2)$. (この結果は No.5 で対称行列を対角化するとき使う.)

例題 3 多項式の正規直交基底

$\mathbb{R}[x]_2$ に内積 $(f, g) = \int_{-1}^1 f(x)g(x)dx$ を入れる. 基底 $1, x, x^2$ を直交化せよ (正規化は最後でよい).

【解答】 正規化を後回しにする方法で計算する. $b_1 = 1$. $(x, 1) = 0$ なので $b_2 = x$. $(x^2, 1) = \frac{2}{3}$, $(1, 1) = 2$, $(x^2, x) = 0$ なので

$$b_3 = x^2 - \frac{2/3}{2} \cdot 1 - 0 \cdot x = x^2 - \frac{1}{3}.$$

$\|1\|^2 = 2$, $\|x\|^2 = \frac{2}{3}$, $\|x^2 - \frac{1}{3}\|^2 = \frac{8}{45}$ なので, 正規直交基底は

$$\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \sqrt{\frac{3}{2}}x, \quad \sqrt{\frac{45}{8}}\left(x^2 - \frac{1}{3}\right).$$

コラム: ルジャンドル多項式

例題3を続けて $x^3, x^4, \dots$ も直交化すると, **ルジャンドル多項式** (を定数倍したもの) の列が得られる. ルジャンドル多項式は, 物理 (球の周りのポテンシャル) や数値積分 (ガウス求積) など, さまざまな場面で現れる. 関数を「直交する多項式」の和で近似する考え方は, フーリエ級数と並んで応用上とても重要である.

■ 4. QR 分解

グラム・シュミットの直交化法を行列の言葉で書くと、次のようになる。

定理 4 QR 分解

$A = (\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_k)$ を $m \times k$ 行列とし、列ベクトルは 1 次独立とする。 $\mathbf{a}_j$ にグラム・シュミットの直交化法を行って得た $\mathbf{e}_j$ を並べた $Q = (\mathbf{e}_1 \cdots \mathbf{e}_k)$ について、対角成分が正の上三角行列 R を用いて

$$A = QR$$

と書ける。 Q の列は正規直交系 (${}^tQQ = E_k$) である。

【証明】 定理 2 の証明で見たように $\mathbf{a}_j = \|\mathbf{b}_j\| \mathbf{e}_j + \sum_{i < j} (\mathbf{a}_j, \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i$ は $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_j$ だけの 1 次結合である。これを並べると $A = QR$, R の (i, j) 成分は $i < j$ で $(\mathbf{a}_j, \mathbf{e}_i)$, $i = j$ で $\|\mathbf{b}_j\| > 0$, $i > j$ で 0. $\square$

例 1

$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ の QR 分解は

$$A = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}}_Q \underbrace{\begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}}_R.$$

(練習問題 4 で確かめる.)

QR 分解は、固有値を数値的に求める代表的な方法 (QR 法) の基礎になっている (分野「数値解析」第 5 章 No.2).

■ 練習問題

- $\mathbf{a}_1 = {}^t(1, 1, 1)$, $\mathbf{a}_2 = {}^t(1, 1, 0)$, $\mathbf{a}_3 = {}^t(1, 0, 0)$ から、グラム・シュミットの直交化法で $\mathbb{R}^3$ の正規直交基底を作れ。
- 平面 $W = \{{}^t(x, y, z) \mid x - y + 2z = 0\}$ の正規直交基底を求めよ。
- $\mathbb{R}[x]_1$ に内積 $(f, g) = \int_0^1 f(x)g(x) dx$ を入れる。基底 $1, x$ から正規直交基底を作れ。
- 例 1 の A について、グラム・シュミットの直交化法で Q を求め、 $R = {}^tQA$ を計算して $A = QR$ を確かめよ。
- (考えてみよう) グラム・シュミットの直交化法を 1 次従属なベクトルに使うと、どこかで $\mathbf{b}_j = \mathbf{0}$ なることを説明せよ。 ${}^t(1, 2)$, ${}^t(2, 4)$ で確かめよ。

■ 練習問題の解答

1. $\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} {}^t(1, 1, 1)$. $\mathbf{b}_2 = {}^t(1, 1, 0) - \frac{2}{3} {}^t(1, 1, 1) = \frac{1}{3} {}^t(1, 1, -2)$, $\mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} {}^t(1, 1, -2)$. $\mathbf{b}_3 = {}^t(1, 0, 0) - \frac{1}{3} {}^t(1, 1, 1) - \frac{1}{6} {}^t(1, 1, -2) = \frac{1}{2} {}^t(1, -1, 0)$, $\mathbf{e}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} {}^t(1, -1, 0)$.
2. 基底として $\mathbf{a}_1 = {}^t(1, 1, 0)$, $\mathbf{a}_2 = {}^t(-2, 0, 1)$ がとれる. $\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} {}^t(1, 1, 0)$. $\mathbf{b}_2 = {}^t(-2, 0, 1) - \frac{-2}{2} {}^t(1, 1, 0) = {}^t(-1, 1, 1)$, $\mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} {}^t(-1, 1, 1)$. ($-1 - 1 + 2 = 0$ で確かに W に入る.)
3. $\|1\| = 1$ なので $e_1 = 1$. $(x, 1) = \frac{1}{2}$ より $b_2 = x - \frac{1}{2}$, $\|b_2\|^2 = \int_0^1 (x - \frac{1}{2})^2 dx = \frac{1}{12}$. $e_2 = \sqrt{12} (x - \frac{1}{2}) = \sqrt{3} (2x - 1)$.
4. $\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} {}^t(1, 0, 1)$. $(\mathbf{a}_2, \mathbf{e}_1) = \sqrt{2}$ より $\mathbf{b}_2 = {}^t(2, 1, 0) - {}^t(1, 0, 1) = {}^t(1, 1, -1)$, $\mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} {}^t(1, 1, -1)$.

$$R = {}^tQA = \begin{pmatrix} (\mathbf{e}_1, \mathbf{a}_1) & (\mathbf{e}_1, \mathbf{a}_2) \\ (\mathbf{e}_2, \mathbf{a}_1) & (\mathbf{e}_2, \mathbf{a}_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}.$$
 QR を計算すると A に戻る.
5. 1 次従属なら, ある $\mathbf{a}_j$ がそれより前の $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{j-1}$ の 1 次結合になる (最初にそうなる j をとる). すると $\mathbf{a}_j \in \langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{j-1} \rangle = \langle \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_{j-1} \rangle$ で, No.2 定理 2 (正規直交基底に関する座標) をこの部分空間で使うと $\mathbf{a}_j = \sum_{i < j} (\mathbf{a}_j, \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i$, つまり $\mathbf{b}_j = \mathbf{0}$. 例: $\mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} {}^t(1, 2)$, $\mathbf{b}_2 = {}^t(2, 4) - \frac{10}{5} {}^t(1, 2) = \mathbf{0}$ で, 正規化できない.