クレジット：
Mathematics and Informatics Center 文科系のための線形代数・解析Ⅰ 2020 藤堂 眞治・松尾 泰・藤原 毅夫

東京大学 THE UNIVERSITY OF TOKYO

cc BY NC ND

第8講 線形空間

8-8 Gram-Schmidtの直交化

通常二次元平面、三次元空間に座標を導入する場合には、各座標軸が直交するようにとる。より一般に n 次元で n 個の線形独立なベクトルが与えられている場合、内積の意味で互いに「直交」し、かつ全て長さが1であるような座標系をとっておくと都合がよい。そのようなベクトルの組を「正規直交基底」と呼ぶ

グラム-シュミットの直交化は，互いに線形独立なベクトル $v_1, v_2, \cdots, v_n$ が与えられたとき、これから互いに直交する線形独立な正規直交基底 $u_1, u_2, \cdots, u_n$ を構成する方法である

二次元の例

2つのベクトル

$$v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix},\ v_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

は、互いに線形独立であるが、直交していない。この2つのベクトルから正規直交基底を作ろう

まず v_1 を長さ1に規格化する

$$u_1 = \frac{v_1}{\|v_1\|} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

次に v_2 と u_1 の線形結合 $w_2 = v_2 + c_1 u_1$ を考える。このベクトルが u_1 と直交するためには

$$(u_1, w_2) = (u_1, v_2) + c_1\|u_1\|^2 = 0$$

u_1 は規格化されているので、 $c_1 = -(u_1, v_2)$ すなわち

$$w_2 = v_2 - (u_1 \cdot v_2)u_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

さらにこれを規格化して

$$u_2 = \frac{w_2}{\|w_2\|} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

を得る

一般に R^n に対して $v_1, v_2, \cdots, v_n$ が与えられたとき

(1) $u_1 = \dfrac{v_1}{\|v_1\|}$

(2a) $w_2 = v_2 - (u_1, v_2)u_1$：ここで $(u_1, w_2) = 0$ が成り立っている

(2b) $u_2 = \dfrac{w_2}{\|w_2\|}$

(3a) $w_3 = v_3 - (u_1, v_3)u_1 - (u_2, v_3)u_2$：ここで $(u_1, w_3) = (u_2, w_3) = 0$ が成り立っている

(3b) $u_3 = \dfrac{w_3}{\|w_3\|}$

と続けていけば正規直交基底が構成できる

8-9 QR分解

上のグラム-シュミットの直交化では、 u_1 は v_1 の線形結合、 u_2 は v_1, v_2 の線形結合、 u_k は $v_1, v_2, \cdots, v_k$ の線形結合で表される。逆に $v_1, v_2, \cdots$ に関して解くと、v_1 は u_1 の線形結合、 v_2 は u_1, u_2 の線形結合、 v_k は $u_1, u_2, \cdots, u_k$ の線形結合となっている

すなわち、適当な定数 r_{ij} ($1 \le i \le j \le n$)を用いて

$$v_1 = r_{11}u_1$$

$$v_2 = r_{12}u_1 + r_{22}u_2$$

$$\vdots$$

$$v_n = r_{1n}u_1 + r_{2n}u_2 + \cdots + r_{nn}u_n$$

と表される。 $A = [v_1, v_2, \cdots, v_n]$, $U = [u_1, u_2, \cdots, u_n]$, $R = [r_{ij}]_{1 \le i \le n, 1 \le j \le n}$ を使うと

$$A = UR$$

と書かれる。ここで Uは直交行列（あるいはユニタリー行列）、 R は上三角行列である (QR分解)

上の二次元の例の場合、

```
A = [1,1;1,0]
```

```
A = 2×2
     1     1
     1     0
```

```
[U,R] = qr(A)
```

```
U = 2×2
   -0.7071   -0.7071
   -0.7071    0.7071
R = 2×2
   -1.4142   -0.7071
         0   -0.7071
```

U は直交行列、 R は上三角行列、また $A = UR$ が成り立っている

```
U * U'
```

```
ans = 2×2
    1.0000   -0.0000
   -0.0000    1.0000
```

```
U' * U
```

```
ans = 2×2
    1.0000   -0.0000
   -0.0000    1.0000
```

```
U * R
```

```
ans = 2×2
    1.0000    1.0000
    1.0000   -0.0000
```

例題）先の例とは U の要素の符号が違っているように見えるが、これでよいのか？

例題）［手計算］行列 U は直交行列であることを示せ

例題）[MATLAB] 3つのベクトル $v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$, $v_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix}$, $v_3 = \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ 3 \end{bmatrix}$ をプロットし、互いに直交してはいないことを確認せよ。次に、QR分解により直交化して正規直交基底を求めよ．3つのベクトルをプロットし、互いに直交していることを確認せよ

例題）3つのベクトル $v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$, $v_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$, $v_3 = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ を直交化して正規直交基底を求めよ

例題）線形独立でないベクトルの組に対して、Gram–Schmidtの直交化を行うと何が起こるか?