ベクトルの正射影

正規直交基底をつくるにあたって、次の概念が重要になる

ref: 長岡亮介 線形代数入門講義 p184〜185

正射影　$\mathbf{0}$ でないベクトル $\boldsymbol{a}$ が与えられているとき、ベクトル $\boldsymbol{x}$ に対し、

i. $\boldsymbol{p}$ が $\boldsymbol{a}$ と平行
ii. $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{p}$ が $\boldsymbol{a}$ と直交

という条件を満たすベクトル $\boldsymbol{p}$ を、$\boldsymbol{x}$ の $\boldsymbol{a}$ への正射影という

正射影の公式　ベクトル $\boldsymbol{x}$ のベクトル $\boldsymbol{a}$ への正射影 $\boldsymbol{p}$ は、次のように表される

$$\boldsymbol{p}=\frac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{a})}{(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a})}\boldsymbol{a}=\frac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{a})}{\|\boldsymbol{a}\|^2}\boldsymbol{a}$$

証明

$\boldsymbol{p}$ が $\boldsymbol{a}$ と平行であることから、

$$\boldsymbol{p}=k\boldsymbol{a}\quad(k\in K)$$

また、$\boldsymbol{x}-\boldsymbol{p}$ が $\boldsymbol{a}$ と直交することから、

$$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{p},\boldsymbol{a})=0$$

よって、

$$(\boldsymbol{x}-k\boldsymbol{a},\boldsymbol{a})=0$$

内積の双線形性より、

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{a})-k(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a})=0$$

ここで、正射影の定義より $\boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{0}$ なので、$(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}) \neq 0$ である

よって、$(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a})$ で割ることができ、

$$k = \frac{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{a})}{(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a})}$$

と k が定まる

最初の式に代入すると、

$$\boldsymbol{p} = \frac{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{a})}{(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a})}\boldsymbol{a}$$

が得られる ■

グラム・シュミットの直交化法

計量空間 V の線型独立なベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ から、正規直交系をつくる方法を考える

ref: 図で整理！例題で納得！線形空間入門 p119〜120
ref: 長岡亮介 線形代数入門講義 p182〜184
ref: 行列と行列式の基礎 p82〜83

正規化

まずは、$\boldsymbol{a}_1$ から、ノルムが 1 であるベクトルをつくる（正規化）

そのためには、

$$\boldsymbol{e}_1 = \frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|}$$

とすればよい

ここで、$\boldsymbol{e}_1$ は $\boldsymbol{a}_1$ をスカラー倍しただけなので、$\boldsymbol{e}_1$ と $\boldsymbol{a}_1$ は平行である

直交化

次に、$\boldsymbol{e}_1$ と直交するような $\boldsymbol{e}_2$ をつくる

そのために、$\boldsymbol{a}_2$ から、$\boldsymbol{a}_2$ の $\boldsymbol{e}_1$ への正射影を引いたものは、$\boldsymbol{e}_1$ と直交することを利用する

$\boldsymbol{a}_2$ の $\boldsymbol{e}_1$ への正射影は、次のように計算できる

$$\frac{(\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{e}_1)}{\|\boldsymbol{e}_1\|^2}\boldsymbol{e}_1 = (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{e}_1)\boldsymbol{e}_1$$

そこで、

$$\boldsymbol{u}_2 = \boldsymbol{a}_2 - (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{e}_1)\boldsymbol{e}_1$$

とおくと、$\boldsymbol{u}_2$ は $\boldsymbol{e}_1$ と直交する

$\boldsymbol{a}_2$ と $\boldsymbol{a}_1$ が、したがって $\boldsymbol{a}_2$ と $\boldsymbol{e}_1$ が線型独立であることから、$\boldsymbol{u}_2 \neq \boldsymbol{0}$ である

なぜなら、もし $\boldsymbol{u}_2 = \boldsymbol{0}$ ならば、$\boldsymbol{a}_2$ は $\boldsymbol{e}_1$ の線形結合で表されることになり、$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2$ は線型従属になるからである

そこで、$\boldsymbol{u}_2$ を次のように正規化することができ、

$$\boldsymbol{e}_2 = \frac{\boldsymbol{u}_2}{\|\boldsymbol{u}_2\|}$$

とすれば、$\boldsymbol{e}_2$ は $\boldsymbol{e}_1$ と直交するノルムが 1 のベクトルになる

以上の手順を繰り返すことで、線型独立なベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ から、正規直交系 $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n$ を得ることができる

このような方法をグラム・シュミットの直交化法という

⚓ **グラム・シュミットの直交化法**　計量空間 V の線型独立なベクトル $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ から、正規直交系 $\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n$ を次のように構成できる

$$\boldsymbol{u}_k = \boldsymbol{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1}(\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{e}_j)\boldsymbol{e}_j$$
$$\boldsymbol{e}_k = \frac{\boldsymbol{u}_k}{\|\boldsymbol{u}_k\|}$$

ここで、$k = 1, 2, \ldots, n$ である

正規直交基底の存在

さらに、次の定理により、グラム・シュミットの直交化法は、線型独立なベクトルから正規直交系を得るだけでなく、任意の基底から正規直交基底を得る手法としても利用できる

グラム・シュミットの直交化と生成空間の不変性　計量空間 V の線型独立なベクトル $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ から、グラム・シュミットの直交化法を用いて得られた正規直交系を $\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n$ とすると、$\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ が張る空間と $\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n$ が張る空間は一致する

$$\langle \boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n \rangle = \langle \boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n \rangle$$

証明

グラム・シュミットの直交化法では、各ステップ k において、まず $\boldsymbol{a}_k$ からその前に得られた直交ベクトル $\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_{k-1}$ への射影を引くことで、$\boldsymbol{a}_k$ に直交するベクトルを構成する

すなわち、

$$\boldsymbol{u}_k = \boldsymbol{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1} (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{e}_j)\boldsymbol{e}_j$$

と定義し、その後これを正規化して $\boldsymbol{e}_k$ とする

ここで、$\boldsymbol{u}_k$ は右辺の形から明らかなように、$\boldsymbol{a}_k$ と $\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_{k-1}$ の線型結合である

そしてさらに各 $\boldsymbol{e}_j$（$j < k$）は、それ以前の $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_j$ の線型結合であることから、$\boldsymbol{u}_k$ は結局 $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k$ の線型結合として書ける

したがって、$\boldsymbol{e}_k$ も $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_k$ の線型結合となり、$\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n$ はすべて $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ の線型結合である

よって、すべての $\boldsymbol{e}_k$ は $\langle \boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n \rangle$ に属することになり、

$$\langle \boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n \rangle \subset \langle \boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n \rangle$$

が成り立つ

両辺の部分空間の次元を考えると、$\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ が線型独立であるため、$\langle \boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n \rangle$ の次元は n である
一方、$\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n$ も直交系であることから線型独立であるため、$\langle \boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n \rangle$ の次元も n である
よって、部分空間の次元が等しいことから、両者は一致する ■

このように、グラム・シュミットの直交化法は、内積が定められている空間（計量空間）には正規直交基底が存在することを示している

⚓ **正規直交基底の存在**　$\{\boldsymbol{0}\}$ でない任意の計量空間は正規直交基底を持つ

線形従属なベクトルに適用した場合

与えられたベクトルが線型独立でない場合にグラム・シュミットの直交化法を適用すると、いずれ射影を引いたベクトルが $\boldsymbol{0}$ になる

ある $\boldsymbol{a}_k$ が、前のベクトルたち $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_{k-1}$ の線形結合として表される、すなわち線形従属であるとする
このとき、$\boldsymbol{a}_k$ は、すでに得られた正規直交系 $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_{k-1}$ の線形結合として表すことができる

$$\boldsymbol{a}_k = \sum_{i=1}^{k-1} (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{u}_i) \boldsymbol{u}_i$$

つまり、$\boldsymbol{a}_k$ は、すでに得られた正規直交系 $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_{k-1}$ の線形結合に完全に含まれている

ここで、射影をすべて引くと、次のように残りが $\mathbf{0}$ になる

$$\boldsymbol{u}_k = \boldsymbol{a}_k - \sum_{i=1}^{k-1} (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{u}_i)\boldsymbol{u}_i = \mathbf{0}$$

このように、グラム・シュミットの直交化法における射影を引く操作は、すでにある正規直交基底に重なっている成分（従属部分）を消し去ってしまうこの性質により、グラム・シュミット法は線形従属な場合でも破綻せずに使える

しかし、結果として新しい成分がゼロになる（つまり新しい情報がない）ため、得られる直交系（正規直交基底）は完全な基底にはならない