補足プリント：グラム・シュミットの直交化法について

大矢 浩徳 (OYA Hironori)*

$\mathbb{K} = \mathbb{R}$ or $\mathbb{C}$ とする．本プリントでは $\mathbb{K}$ 上の計量ベクトル空間においてグラム・シュミットの直交化法がうまくいくことの厳密な証明を与える．

定義. V を $\mathbb{K}$ 上のベクトル空間とする．V に写像

$$V \times V \to \mathbb{K},\ (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) \mapsto \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w}$$

であって，以下の性質 (i)–(iv) を満たすものが定まっているとき，V を**計量ベクトル空間**といい，上の写像を V の**内積**と呼ぶ：

(i) 任意の $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in V$ に対し，$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = \overline{\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{v}}$,

(ii) 任意の $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in V$ に対し，$(\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{w} = \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{w} + \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w}$，$\boldsymbol{u} \cdot (\boldsymbol{v} + \boldsymbol{w}) = \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{w}$,

(iii) 任意の $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in V$，$c \in \mathbb{K}$ に対し，$(c\boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{w} = \overline{c}(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w})$，$\boldsymbol{v} \cdot (c\boldsymbol{w}) = c(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w})$,

(iv) 任意の $\boldsymbol{v} \in V$ に対し，$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} \geq 0$，さらに，$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} = 0$ ならば $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$.

ここで，$z = a + bi \in \mathbb{C}$ に対し，$\overline{z}$ は z の複素共役 $a - bi$ である $(a, b \in \mathbb{R}, i = \sqrt{-1})$．特に，$\mathbb{K} = \mathbb{R}$ のときは，複素共役をとっても変化しないので，無視して良い．

例. 以下に計量ベクトル空間の例を挙げる：

- $\mathbb{R}^n$ は
$$\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} := x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n$$
によって，$\mathbb{R}$ 上の計量ベクトル空間となる．
- $\mathbb{C}^n$ は
$$\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} := \overline{x_1} y_1 + \cdots + \overline{x_n} y_n$$
によって，$\mathbb{C}$ 上の計量ベクトル空間となる．この内積は**エルミート内積**と呼ばれる．
- 1 変数多項式の空間 $\mathbb{C}[x] := \{a_0 + a_1 x + \cdots a_n x^n \mid n \in \mathbb{Z}_{\geq 0},\ a_i \in \mathbb{C}\ (i = 1, \ldots, n)\}$ は
$$f(x) \cdot g(x) := \int_{-1}^{1} \overline{f(x)} g(x) dx$$
によって，$\mathbb{C}$ 上の計量ベクトル空間となる．この内積は L^2-**内積**と呼ばれる．
- $\mathbb{K}$ 上の計量ベクトル空間 V の部分空間は V と同じ内積を用いることで再び $\mathbb{K}$ 上の計量ベクトル空間となる．例えば，2 次以下の多項式全体のなす $\mathbb{C}[x]$ の部分空間 $\mathbb{C}[x]_{\leq 2}$ は上の $\mathbb{C}[x]$ と全く同じ定義の内積を用いることで $\mathbb{C}$ 上の計量ベクトル空間となる．

* *e-mail*：hoya@shibaura-it.ac.jp

定義. V を $\mathbb{K}$ 上の計量ベクトル空間とする．

- $\boldsymbol{v} \in V$ に対し，$||\boldsymbol{v}|| = \sqrt{\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v}}$ を $\boldsymbol{v}$ の**大きさ**という．
- $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in V$ に対し，$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = 0$ のとき，$\boldsymbol{v}$ と $\boldsymbol{w}$ は**直交する**という．
- $B = \{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3, \cdots\}$ を V の基底とする．ここで，

$$\boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_j = \begin{cases} 1 & i = j \text{ のとき,} \\ 0 & i \neq j \text{ のとき,} \end{cases}$$

  が成立するとき，B を V の**正規直交基底**という．つまり，正規直交基底とは，各元の大きさが全て 1 で互いに直交するベクトルからなる V の基底のことである．

グラム・シュミットの直交化法はある (正規直交とは限らない) 基底から正規直交基底を得る方法を与えるアルゴリズムである．

グラム・シュミットの直交化法

V を $\mathbb{K}$ 上の有限次元計量ベクトル空間とし，$B = \{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ を V の基底とする．このとき，以下の方法で V の正規直交基底を得ることができる：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{u}'_1 &:= \boldsymbol{v}_1, \\
\boldsymbol{u}'_2 &:= \boldsymbol{v}_2 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_2)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1, \\
\boldsymbol{u}'_3 &:= \boldsymbol{v}_3 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1 - \frac{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_2)}\boldsymbol{u}'_2, \\
&\vdots \\
\boldsymbol{u}'_k &:= \boldsymbol{v}_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{(\boldsymbol{u}'_i \cdot \boldsymbol{v}_k)}{(\boldsymbol{u}'_i \cdot \boldsymbol{u}'_i)}\boldsymbol{u}'_i, \\
&\vdots \\
\boldsymbol{u}'_n &:= \boldsymbol{v}_n - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_n)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1 - \cdots - \frac{(\boldsymbol{u}'_{n-1} \cdot \boldsymbol{v}_n)}{(\boldsymbol{u}'_{n-1} \cdot \boldsymbol{u}'_{n-1})}\boldsymbol{u}'_{n-1},
\end{aligned}$$

とし，

$$\boldsymbol{u}_k := \frac{1}{||\boldsymbol{u}'_k||}\boldsymbol{u}'_k, \quad k = 1, \ldots, n$$

とすると，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ は V の正規直交基底．

注意．$\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2, \ldots, \boldsymbol{u}'_n$ の時点で，互いに直交するベクトルとなっている．最後のスカラー倍はそれぞれのベクトルの大きさを 1 にするように調整する操作である．

グラム・シュミットの直交化法で正規直交基底が得られることの証明. まず，$\{\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2, \ldots, \boldsymbol{u}'_n\}$ が互いに直交するベクトルからなる V の基底であることを示す．

<u>$\{\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2, \ldots, \boldsymbol{u}'_n\}$ が V の基底であること，特に各 $\boldsymbol{u}'_k$ は $\boldsymbol{0}$ ではないこと：</u>

各 $k = 1, \ldots, n$ に対し，$\{\boldsymbol{u}'_1, \ldots, \boldsymbol{u}'_k, \boldsymbol{v}_{k+1}, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ が V の基底であることを k に関する帰納法で示す．($k = n$ の時が欲しい主張であることに注意．)

$k = 1$ のとき，定義より $\{\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n\} = \{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ なので主張は正しい．

次に，$k \geq 1$ で $\{\boldsymbol{u}'_1, \ldots, \boldsymbol{u}'_k, \boldsymbol{v}_{k+1}, \boldsymbol{v}_{k+2}, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ が V の基底であることを仮定して，$\{\boldsymbol{u}'_1, \ldots, \boldsymbol{u}'_k, \boldsymbol{u}'_{k+1}, \boldsymbol{v}_{k+2}, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$

が V の基底であることを示す．このとき，$\boldsymbol{u}'_{k+1}$ の定義より，これらの関係は行列の積の形にまとめると，

$$
(\boldsymbol{u}'_1,\ldots,\boldsymbol{u}'_k,\boldsymbol{u}'_{k+1},\boldsymbol{v}_{k+2},\ldots,\boldsymbol{v}_n)=(\boldsymbol{u}'_1,\ldots,\boldsymbol{u}'_k,\boldsymbol{v}_{k+1},\boldsymbol{v}_{k+2},\ldots,\boldsymbol{v}_n)
\begin{array}{cl}
\begin{array}{ccccccc} & & \overset{k}{\vee} & \overset{k+1}{\vee} & \overset{k+2}{\vee} & & \end{array} & \\
\begin{pmatrix}
1 & & & -\frac{(\boldsymbol{u}'_1\cdot\boldsymbol{v}_{k+1})}{(\boldsymbol{u}'_1\cdot\boldsymbol{u}'_1)} & & & \\
 & \ddots & & \vdots & & & \\
 & & 1 & -\frac{(\boldsymbol{u}'_k\cdot\boldsymbol{v}_{k+1})}{(\boldsymbol{u}'_k\cdot\boldsymbol{u}'_k)} & & & \\
 & & & 1 & & & \\
 & & & & 1 & & \\
 & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & 1
\end{pmatrix} &
\begin{array}{l} \\ \\ <k \\ <k+1 \\ <k+2 \\ \\ \\ \end{array}
\end{array}
$$

となる．ここで, 帰納法の仮定より $\boldsymbol{u}'_1\neq\boldsymbol{0},\ldots,\boldsymbol{u}'_k\neq\boldsymbol{0}$ なので, 内積の定義 (iv) から, $\boldsymbol{u}'_1\cdot\boldsymbol{u}'_1\neq0,\ldots,\boldsymbol{u}'_k\cdot\boldsymbol{u}'_k\neq 0$ であることに注意する (これより，右辺の正方行列の非対角成分に現れる分母は 0 でなく，グラム・シュミットの直交化法は確かに実行可能である)．右辺に現れた正方行列は対角成分が全て 1 の上三角行列なので，その行列式の値は 1 で，正則行列である．従って，$\{\boldsymbol{u}'_1,\ldots,\boldsymbol{u}'_k,\boldsymbol{v}_{k+1},\boldsymbol{v}_{k+2}\ldots,\boldsymbol{v}_n\}$ が V の基底であるとき，$\{\boldsymbol{u}'_1,\ldots,\boldsymbol{u}'_k,\boldsymbol{u}'_{k+1},\boldsymbol{v}_{k+2}\ldots,\boldsymbol{v}_n\}$ も V の基底となる．

<u>$\{\boldsymbol{u}'_1,\boldsymbol{u}'_2,\ldots,\boldsymbol{u}'_n\}$ の元が互いに直交すること：</u>

内積の定義 (i) より，$\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_j=0$ のとき $\boldsymbol{u}'_j\cdot\boldsymbol{u}'_i=0$ でもあるので，

$$
\text{任意の } 1\leq i<j\leq n \text{ に対し，} \boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_j=0 \tag{$*$}
$$

であることを示せばよい．j に関する帰納法で示す．$j=2$ のとき，内積の定義 (ii), (iii) より，

$$
\boldsymbol{u}'_1\cdot\boldsymbol{u}'_2=\boldsymbol{u}'_1\cdot\left(\boldsymbol{v}_2-\frac{(\boldsymbol{u}'_1\cdot\boldsymbol{v}_2)}{(\boldsymbol{u}'_1\cdot\boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1\right)=\boldsymbol{u}'_1\cdot\boldsymbol{v}_2-\frac{(\boldsymbol{u}'_1\cdot\boldsymbol{v}_2)}{(\boldsymbol{u}'_1\cdot\boldsymbol{u}'_1)}(\boldsymbol{u}'_1\cdot\boldsymbol{u}'_1)=0
$$

より，$(*)$ は成立する．

次に，$j=2,\ldots,k$ で $(*)$ が成立することを仮定して，$j=k+1$ でも $(*)$ が成立することを示す．つまり，$i=1,\ldots,k$ に対し，$\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_{k+1}=0$ であることを示す．内積の定義 (ii), (iii) より，

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_{k+1}&=\boldsymbol{u}'_i\cdot\left(\boldsymbol{v}_{k+1}-\sum_{j=1}^{k}\frac{(\boldsymbol{u}'_j\cdot\boldsymbol{v}_{k+1})}{(\boldsymbol{u}'_j\cdot\boldsymbol{u}'_j)}\boldsymbol{u}'_j\right)\\
&=\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{v}_{k+1}-\sum_{j=1}^{k}\frac{(\boldsymbol{u}'_j\cdot\boldsymbol{v}_{k+1})}{(\boldsymbol{u}'_j\cdot\boldsymbol{u}'_j)}(\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_j).
\end{aligned}
$$

ここで，帰納法の仮定より，$i>j$ のとき，$\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_j=\overline{\boldsymbol{u}'_j\cdot\boldsymbol{u}'_i}=0$($i\leq k$ なので)，$i<j\leq k$ のときも，$\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_j=0$ である．よって，

$$
\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_{k+1}=\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{v}_{k+1}-\sum_{j=1}^{k}\frac{(\boldsymbol{u}'_j\cdot\boldsymbol{v}_{k+1})}{(\boldsymbol{u}'_j\cdot\boldsymbol{u}'_j)}(\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_j)=\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{v}_{k+1}-\frac{(\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{v}_{k+1})}{(\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_i)}(\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_i)=0.
$$

以上より，示すべきことは示された．

最後に，$\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\ldots,\boldsymbol{u}_n\}$ が V の正規直交基底であることを示す．既に $\{\boldsymbol{u}'_1,\boldsymbol{u}'_2,\ldots,\boldsymbol{u}'_n\}$ が互いに直交するベクトルからなる V の基底であることを示したが，各 $\boldsymbol{u}_k$ は $\boldsymbol{u}'_k$ を単にスカラー倍したものなので，$\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\ldots,\boldsymbol{u}_n\}$ も V の基底である．さらに，内積の定義 (iii) より，

$$
\boldsymbol{u}_k\cdot\boldsymbol{u}_k=\left(\frac{1}{||\boldsymbol{u}'_k||}\right)^2(\boldsymbol{u}'_k\cdot\boldsymbol{u}'_k)=\frac{\boldsymbol{u}'_k\cdot\boldsymbol{u}'_k}{\boldsymbol{u}'_k\cdot\boldsymbol{u}'_k}=1.
$$

また，$i\neq j$ のとき，

$$
\boldsymbol{u}_i\cdot\boldsymbol{u}_j=\frac{1}{||\boldsymbol{u}'_i||}\frac{1}{||\boldsymbol{u}'_j||}(\boldsymbol{u}'_i\cdot\boldsymbol{u}'_j)=0.
$$

以上より，確かに $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\ldots,\boldsymbol{u}_n\}$ は V の正規直交基底である． □

補足：岩澤分解 (興味がある人向け)

上の「$\{\boldsymbol{u}_1', \boldsymbol{u}_2', \ldots, \boldsymbol{u}_n'\}$ が V の基底であること，特に各 $\boldsymbol{u}_k'$ は $\boldsymbol{0}$ ではないこと」の証明中に行った議論から，各 $k = 2, \ldots, n$ に対して対角成分が全て 1 のある上三角行列 N_k が存在して，

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{u}_1', \ldots, \boldsymbol{u}_n') &= (\boldsymbol{u}_1', \ldots, \boldsymbol{u}_{n-2}', \boldsymbol{u}_{n-1}', \boldsymbol{v}_n)N_n \\ &= (\boldsymbol{u}_1', \ldots, \boldsymbol{u}_{n-2}', \boldsymbol{v}_{n-1}, \boldsymbol{v}_n)N_{n-1}N_n \\ &\cdots \\ &= (\boldsymbol{u}_1', \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_{n-1}, \boldsymbol{v}_n)N_2 \cdots N_{n-1}N_n = (\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n)N_2 \cdots N_{n-1}N_n\end{aligned}$$

となることがわかる．ここで，対角成分が全て 1 の上三角行列の積は再び対角成分が全て 1 の上三角行列となることから，$N' := N_2 \cdots N_n$ とすると，N' は対角成分が全て 1 の上三角行列で，

$$(\boldsymbol{u}_1', \ldots, \boldsymbol{u}_n') = (\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n)N'$$

と書けることがわかる．さらに，$N := (N')^{-1}$ とすると，N も対角成分が全て 1 の上三角行列で，

$$(\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n) = (\boldsymbol{u}_1', \ldots, \boldsymbol{u}_n')N$$

である．次に，

$$A := \begin{pmatrix} ||\boldsymbol{u}_1'|| & & & \\ & ||\boldsymbol{u}_2'|| & & \\ & & \ddots & \\ & & & ||\boldsymbol{u}_n'|| \end{pmatrix}$$

とすると，

$$(\boldsymbol{u}_1', \ldots, \boldsymbol{u}_n') = (\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n)A$$

である．以上より，

$$(\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n) = (\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n)AN$$

となる．この事実を V が $\mathbb{K}^n$ ($\mathbb{K} = \mathbb{R}$ or $\mathbb{C}$) の場合に考えてみよう．すると，

- $\mathbb{K}^n$ の基底 $\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ を並べてできる n 次正方行列 $(\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n) \Leftrightarrow$ 正則行列．
- $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底 $\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ を並べてできる n 次正方行列 $(\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n) \Leftrightarrow \begin{cases} \text{直交行列 } (\mathbb{K} = \mathbb{R}) \\ \text{ユニタリ行列 } (\mathbb{K} = \mathbb{C}). \end{cases}$

という対応があったので，上の考察から以下の定理が言える：

定理 (岩澤分解)

任意の実正則行列 $X_{\mathbb{R}}$ に対し、ある直交行列 O，正の対角成分を持つ対角行列 A，対角成分が全て 1 の実上三角行列 $N_{\mathbb{R}}$ が存在して，

$$X_{\mathbb{R}} = OAN_{\mathbb{R}}$$

と書ける．

また，任意の複素正則行列 $X_{\mathbb{C}}$ に対し，あるユニタリ行列 U，正の対角成分を持つ対角行列 A'，対角成分が全て 1 の複素上三角行列 $N_{\mathbb{C}}$ が存在して，

$$X_{\mathbb{C}} = UA'N_{\mathbb{C}}$$

と書ける．