グラム・シュミットの直交化法について

担当：大矢 浩徳 (OYA Hironori)*

以下では $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ or $\mathbb{C}$ とする．グラム・シュミットの直交化法がうまく働くことの厳密な証明を与える．グラム・シュミットの直交化法を再掲しておこう．

グラム・シュミットの直交化法 (Gram–Schmidt orthonormalization)

$B = \{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ を $\mathbb{K}^n$ の基底とする．このとき，以下の方法で B から $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底を得ることができる．

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

とし，

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

とすると，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ は $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底となる．

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．

$\{\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2, \ldots, \boldsymbol{u}'_n\}$ が $\mathbb{K}^n$ の基底であること，特に各 $\boldsymbol{u}'_k$ は $\boldsymbol{0}$ にはならないこと：

各 $k = 1, \ldots, n$ に対し，$\{\boldsymbol{u}'_1, \ldots, \boldsymbol{u}'_k, \boldsymbol{v}_{k+1}, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ が $\mathbb{K}^n$ 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 $\mathbb{K}^n$ 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 $\mathbb{K}^n$ の基底であることを示す．

* *e-mail*：hoya@shibaura-it.ac.jp

$\boldsymbol{u}'_{k+1}$ の定義より，これらの関係は行列の積を用いて，

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

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，命題 7.2 (4) から，$(\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_1)_{\mathbb{K}} \neq 0, \ldots, (\boldsymbol{u}'_k, \boldsymbol{u}'_k)_{\mathbb{K}} \neq 0$ 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 $\mathbb{K}^n$ の基底であるとき，すなわち $(\boldsymbol{u}'_1 \cdots \boldsymbol{u}'_k\ \boldsymbol{v}_{k+1}\ \boldsymbol{v}_{k+2} \cdots \boldsymbol{v}_n)$ が正則であるとき，$(\boldsymbol{u}'_1 \cdots \boldsymbol{u}'_k\ \boldsymbol{u}'_{k+1}\ \boldsymbol{v}_{k+2} \cdots \boldsymbol{v}_n)$ も正則となり，$\{\boldsymbol{u}'_1, \ldots, \boldsymbol{u}'_k, \boldsymbol{u}'_{k+1}, \boldsymbol{v}_{k+2}, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ は $\mathbb{K}^n$ の基底となる (行列の正則性と $\mathbb{K}^n$ の基底であることの関係については系 4.5 を参照のこと)．

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

命題 7.2 (3) より，$(\boldsymbol{u}'_i, \boldsymbol{u}'_j)_{\mathbb{K}} = 0$ のとき $(\boldsymbol{u}'_j, \boldsymbol{u}'_i)_{\mathbb{K}} = 0$ でもあるので，

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

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，命題 7.2 (1), (2) より，

$$(\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2)_{\mathbb{K}} = \left(\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{v}_2 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{v}_2)_{\mathbb{K}}}{(\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_1)_{\mathbb{K}}} \boldsymbol{u}'_1 \right)_{\mathbb{K}} = (\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{v}_2)_{\mathbb{K}} - \frac{(\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{v}_2)_{\mathbb{K}}}{(\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_1)_{\mathbb{K}}} (\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_1)_{\mathbb{K}} = 0$$

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，$(\boldsymbol{u}'_i, \boldsymbol{u}'_{k+1})_{\mathbb{K}} = 0$ であることを示す．命題 7.2 (1),(2) より，

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

ここで，帰納法の仮定より，$k \geq i > j$ のとき，$(\boldsymbol{u}'_i, \boldsymbol{u}'_j)_{\mathbb{K}} = \overline{(\boldsymbol{u}'_j, \boldsymbol{u}'_i)_{\mathbb{K}}} = 0$，$i < j \leq k$ のときも，$(\boldsymbol{u}'_i, \boldsymbol{u}'_j)_{\mathbb{K}} = 0$ である．よって，$(**)$ の右辺は，

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

以上より，示すべきことは示された．

$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ が $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底であること：

既に $\{\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2, \ldots, \boldsymbol{u}'_n\}$ が互いに直交する元からなる $\mathbb{K}^n$ の基底であることを示したが，各 $\boldsymbol{u}_k$ は $\boldsymbol{u}'_k$ を単に (0 でない) スカラー倍したものなので，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ も $\mathbb{K}^n$ の基底である．さらに，命題 7.2 (2) より，

$$(\boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{u}_k)_{\mathbb{K}} = \left(\frac{1}{\|\boldsymbol{u}'_k\|} \right)^2 (\boldsymbol{u}'_k, \boldsymbol{u}'_k)_{\mathbb{K}} = \frac{(\boldsymbol{u}'_k, \boldsymbol{u}'_k)_{\mathbb{K}}}{(\boldsymbol{u}'_k, \boldsymbol{u}'_k)_{\mathbb{K}}} = 1.$$

また，$i \neq j$ のとき，

$$(\boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{u}_j)_{\mathbb{K}} = \frac{1}{\|\boldsymbol{u}'_i\|} \frac{1}{\|\boldsymbol{u}'_j\|} (\boldsymbol{u}'_i, \boldsymbol{u}'_j)_{\mathbb{K}} = 0.$$

以上より，確かに $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ は $\mathbb{K}^n$ 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『$\{\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2, \dots, \boldsymbol{u}'_n\}$ が $\mathbb{K}^n$ の基底であること，特に各 $\boldsymbol{u}'_k$ は $\boldsymbol{0}$ にはならないこと』の証明中に行った議論から，各 $k = 2, \dots, n$ 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，

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

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，$N' \coloneqq N_2 \cdots N_n$ とすると，N' は対角成分が全て 1 の上三角行列で，

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

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

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

である．次に，

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

とすると，

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

である．以上より，

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

となる．ここで，$\mathbb{K}^n$ の n 個のベクトル $\boldsymbol{w}_1, \dots, \boldsymbol{w}_n$ に関して，

- $\{\boldsymbol{w}_1, \dots, \boldsymbol{w}_n\}$ が $\mathbb{K}^n$ の基底 $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{w}_1, \dots, \boldsymbol{w}_n$ を並べてできる n 次正方行列 $(\boldsymbol{w}_1 \cdots \boldsymbol{w}_n)$ が正則．
- $\{\boldsymbol{w}_1, \dots, \boldsymbol{w}_n\}$ が $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底

  $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{w}_1, \dots, \boldsymbol{w}_n$ を並べてできる n 次正方行列 $(\boldsymbol{w}_1 \cdots \boldsymbol{w}_n)$ が $\begin{cases} \text{実直交行列 } (\mathbb{K} = \mathbb{R} \text{ のとき}) \\ \text{ユニタリ行列 } (\mathbb{K} = \mathbb{C} \text{ のとき}). \end{cases}$

という対応を思い出すと，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，ある実直交行列 $U_{\mathbb{R}}$，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，

$$X_{\mathbb{R}} = U_{\mathbb{R}}AN_{\mathbb{R}}$$

となる．

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，

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

となる．