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)

$B=\{\boldsymbol{v}_1,\dots,\boldsymbol{v}_n\}$ 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：

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

とし，

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

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

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.

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

各 $k=1,\dots,n$ に対し，$\{\boldsymbol{u}'_1,\dots,\boldsymbol{u}'_k,\boldsymbol{v}_{k+1},\dots,\boldsymbol{v}_n\}$ 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 $\{\boldsymbol{u}'_1,\boldsymbol{v}_2,\dots,\boldsymbol{v}_n\}=\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\dots,\boldsymbol{v}_n\}$ なので主張は正しい.

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

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

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, $\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1 \neq 0, \ldots, \boldsymbol{u}'_k \cdot \boldsymbol{u}'_k \neq 0$ 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 $\mathbb{K}^n$ 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．

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

内積の性質 (命題 5.6 (1)) 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，内積の性質 (命題 5.6 (2),(3)) 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．内積の性質 (命題 5.6 (2),(3)) 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．

<u>$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ が V の正規直交基底であること：</u>

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，内積の性質 (命題 5.6 (3)) 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 $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底である． $\square$

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 $\mathbb{K}^n$ の基底であること，特に各 $\boldsymbol{u}'_k$ は $\mathbf{0}$ にはならないこと』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，

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

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，$N' := N_2 \cdots N_n$ 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，$N := (N')^{-1}$ 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，

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

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 $\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_n$ に関して，

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