Gram-Schmidt の正規直交化法について

概要

Gram-Schmidt の正規直交化法 (GSO) は内積空間の与えられた基底から正規直交基底を構成する方法である．本稿では GSO により得られる直交基底および正規直交基底の明示公式を与える．さらに，直交基底への変換行列を Gram 行列から行基本変形によって計算する方法についても述べる．

1　はじめに

本稿では有限次元実内積空間のみを扱い，記号・記法は概ね [1] の流儀に従う．

実内積空間 V の基底 $\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ に対して

$$\boldsymbol{w}_1 = \boldsymbol{v}_1, \quad \boldsymbol{w}_k = \boldsymbol{v}_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{(\boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{w}_i)}{(\boldsymbol{w}_i, \boldsymbol{w}_i)} \boldsymbol{w}_i \ (2 \leq k \leq n)$$

とすると $\{\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_n\}$ は V の直交基底であり，さらに，各 $k = 1, \ldots, n$ に対して

$$\boldsymbol{u}_k = \frac{\boldsymbol{w}_k}{\|\boldsymbol{w}_k\|}$$

とすれば $\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ は V の正規直交基底となる，というのが Gram-Schmidt の正規直交化法 (GSO) のアルゴリズムである．直交基底 $\{\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_n\}$ も正規直交基底 $\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ もはじめに与えられた基底 $\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ の 1 次結合で表せるので，本稿ではその係数たちを明示する公式（定理 2.1）を与える．特に，

$$(\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_n) = (\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n)M, \quad (\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n) = (\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_n)N$$

となる基底の変換行列 M, N を Gram 行列 $G = [(\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j)]$ を用いて明示する．また，Gram 行列 G からの行基本変形によって変換行列 M が求められることも紹介する．

記号． 正方行列 G の k 次主対角行列を $G^{(k)}$ と書き，その (i, j) 余因子を $\tilde{g}_{ij}^{(k)}$ と書く．つまり，

$$G^{(k)} := \begin{bmatrix} g_{11} & \cdots & g_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{k1} & \cdots & g_{kk} \end{bmatrix}, \quad \tilde{g}_{ij}^{(k)} := (-1)^{i+j} \left| G_{ij}^{(k)} \right|$$

とする．ここで，$G_{ij}^{(k)}$ は $G^{(k)}$ から i 行と j 列を取り除いた $k-1$ 次正方行列を表す．

2　GSO による直交基底，正規直交基底の明示公式

実内積空間 V の基底 $\{\boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_n\}$ に対し，基底同士の内積からなる行列 $G=[(\boldsymbol{v}_i,\boldsymbol{v}_j)]$ を Gram 行列という．G は正定値対称行列である．つまり，${}^tG=G$ かつ $\mathbf{0}$ でない全ての $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ に対して ${}^t\boldsymbol{x}G\boldsymbol{x}>0$ である．Gram 行列は内積の計算を

$$\left(\sum_{i=1}^n x_i\boldsymbol{v}_i,\ \sum_{i=1}^n y_i\boldsymbol{v}_i\right)={}^t\boldsymbol{x}G\boldsymbol{y}\qquad\left(\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_n\end{bmatrix},\ \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}y_1\\ \vdots\\ y_n\end{bmatrix}\right)$$

と行列の積に帰着させる．GSO によって得られる直交基底や正規直交基底は，はじめに与えられた基底 $\{\boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_n\}$ の 1 次結合で書けるので，その係数たちを G を用いて明示する．

定理 2.1. $\{\boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_n\}$ を実内積空間 V の基底とし，その Gram 行列を $G=[g_{ij}]$ とする．

$$\boldsymbol{w}_1=\boldsymbol{v}_1,\quad \boldsymbol{w}_k=\frac{1}{\left|G^{(k-1)}\right|}\begin{vmatrix}g_{11}&\cdots&g_{1k}\\ \vdots&\ddots&\vdots\\ g_{k-1,1}&\cdots&g_{k-1,k}\\ \boldsymbol{v}_1&\cdots&\boldsymbol{v}_k\end{vmatrix}=\frac{1}{\left|G^{(k-1)}\right|}\sum_{i=1}^k\tilde{g}_{ik}^{(k)}\boldsymbol{v}_i\quad(2\le k\le n)$$

とすれば，$\{\boldsymbol{w}_1,\ldots,\boldsymbol{w}_n\}$ は GSO によって得られる V の直交基底である．さらに，

$$(\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_1)=g_{11},\quad(\boldsymbol{w}_k,\boldsymbol{w}_k)=\frac{\left|G^{(k)}\right|}{\left|G^{(k-1)}\right|}\ (2\le k\le n)$$

となる．これより

$$\boldsymbol{u}_1=\frac{\boldsymbol{w}_1}{\sqrt{g_{11}}},\quad \boldsymbol{u}_k=\sqrt{\frac{\left|G^{(k-1)}\right|}{\left|G^{(k)}\right|}}\,\boldsymbol{w}_k\ (2\le k\le n)$$

とすれば，$\{\boldsymbol{u}_1,\ldots,\boldsymbol{u}_n\}$ は $\{\boldsymbol{w}_1,\ldots,\boldsymbol{w}_n\}$ を正規化した V の正規直交基底である．つまり，

$$\mu_{ij}=\frac{\tilde{g}_{ij}^{(j)}}{\tilde{g}_{jj}^{(j)}}=\frac{\tilde{g}_{ij}^{(j)}}{\left|G^{(j-1)}\right|},\quad \nu_i=\sqrt{\frac{\left|G^{(i-1)}\right|}{\left|G^{(i)}\right|}}$$

とおいて

$$M=\begin{bmatrix}1&\mu_{12}&\mu_{13}&\cdots&\mu_{1n}\\ &1&\mu_{23}&\cdots&\mu_{2n}\\ &&1&\cdots&\mu_{3n}\\ &&&\ddots&\vdots\\ O&&&&1\end{bmatrix},\quad N=\begin{bmatrix}\sqrt{1/g_{11}}&&&&O\\ &\nu_2&&&\\ &&\nu_3&&\\ &&&\ddots&\\ O&&&&\nu_n\end{bmatrix}$$

とすれば，以下が成り立つ．

$$(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n)=(\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_2,\cdots,\boldsymbol{w}_n)\,N=(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n)\,MN$$

証明. $\{\boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_n\}$ から GSO により得られる直交基底を $\{\boldsymbol{w}_1,\ldots,\boldsymbol{w}_n\}$ とする．つまり，

$$\boldsymbol{w}_1=\boldsymbol{v}_1,\quad \boldsymbol{w}_k=\boldsymbol{v}_k-\sum_{i=1}^{k-1}\frac{(\boldsymbol{v}_k,\boldsymbol{w}_i)}{(\boldsymbol{w}_i,\boldsymbol{w}_i)}\boldsymbol{w}_i\ (2\le k\le n)$$

とする．このとき，各 $k=2,\ldots,n$ に対して

$$\langle \boldsymbol{w}_1,\ldots,\boldsymbol{w}_{k-1}\rangle=\langle \boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_{k-1}\rangle$$

なので，

$$\boldsymbol{w}_k=\sum_{i=1}^{k-1}\mu_{ik}\boldsymbol{v}_i+\boldsymbol{v}_k=(\boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_k)\begin{bmatrix}\mu_{1k}\\ \vdots\\ \mu_{k-1,k}\\ 1\end{bmatrix}\ (\mu_{ik}\in\mathbb{R})$$

と書ける（添字の片方または両方が 2 文字以上になるときはコンマで区切る）．つまり，

$$M=\begin{bmatrix}1&\mu_{12}&\mu_{13}&\cdots&\mu_{1n}\\ &1&\mu_{23}&\cdots&\mu_{2n}\\ &&1&\cdots&\mu_{3n}\\ &&&\ddots&\vdots\\ O&&&&1\end{bmatrix}$$

によって $(\boldsymbol{w}_1,\ldots,\boldsymbol{w}_n)=(\boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_n)M$ と書ける．この各 μ_{ij} を決定する．

各 $k=2,\ldots,n$ に対して $\boldsymbol{w}_k\in\langle \boldsymbol{w}_1,\ldots,\boldsymbol{w}_{k-1}\rangle^\perp=\langle \boldsymbol{v}_1,\ldots,\boldsymbol{v}_{k-1}\rangle^\perp$ なので，

$$(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{w}_k)=(\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{w}_k)=\cdots=(\boldsymbol{v}_{k-1},\boldsymbol{w}_k)=0$$

である．従って，$\{\boldsymbol{e}^k_1,\ldots,\boldsymbol{e}^k_k\}$ を $\mathbb{R}^k$ の標準基底とすれば，各 $i=1,\ldots,k-1$ に対して

$$0=(\boldsymbol{v}_i,\boldsymbol{w}_k)={}^t\boldsymbol{e}^k_iG^{(k)}\begin{bmatrix}\mu_{1k}\\ \vdots\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}g_{i1}&\cdots&g_{ik}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mu_{1k}\\ \vdots\\ 1\end{bmatrix}$$

である．従って，$\boldsymbol{g}_i={}^t\begin{bmatrix}g_{i1}&\cdots&g_{ik}\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{\mu}_k={}^t\begin{bmatrix}\mu_{1k}&\cdots&\mu_{k-1,k}&1\end{bmatrix}$ とすれば，$\boldsymbol{\mu}_k$ は $\mathbb{R}^k$ の標準内積のもとで $\boldsymbol{g}_1,\ldots,\boldsymbol{g}_{k-1}$ に直交するので以下のように書ける．

$$\boldsymbol{\mu}_k=m_k\begin{vmatrix}g_{11}&\cdots&g_{1k}\\ \vdots&\ddots&\vdots\\ g_{k-1,1}&\cdots&g_{k-1,k}\\ \boldsymbol{e}_1&\cdots&\boldsymbol{e}_k\end{vmatrix}=m_k\sum_{j=1}^{k}\tilde{g}^{(k)}_{jk}\boldsymbol{e}^k_j=m_k\begin{bmatrix}\tilde{g}^{(k)}_{1k}\\ \vdots\\ \tilde{g}^{(k)}_{kk}\end{bmatrix}\quad(m_k\in\mathbb{R})$$

$\boldsymbol{\mu}_k$ の $\boldsymbol{e}_k^k$ 成分は 1 なので $m_k = 1/\tilde{g}_{kk}^{(k)} = 1/\left|G^{(k-1)}\right|$ である．以上から，$k = 2, \ldots, n$ に対して

$$\boldsymbol{w}_k = (\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k)\boldsymbol{\mu}_k = \frac{1}{\left|G^{(k-1)}\right|}\sum_{i=1}^{k} \tilde{g}_{ik}^{(k)} \boldsymbol{v}_k = \frac{1}{\left|G^{(k-1)}\right|}\begin{vmatrix} g_{11} & \cdots & g_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{k-1,1} & \cdots & g_{k-1,k} \\ \boldsymbol{v}_1 & \cdots & \boldsymbol{v}_k \end{vmatrix}$$

を得る．さらに，$\|\boldsymbol{w}_1\| = \sqrt{g_{11}}$ であり，$k = 2, \ldots, n$ に対しては

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{w}_k, \boldsymbol{w}_k) = {}^t\boldsymbol{\mu}_k G^{(k)} \boldsymbol{\mu}_k = {}^t\boldsymbol{\mu}_k \begin{bmatrix} {}^t\boldsymbol{e}_1^k G^{(k)} \boldsymbol{\mu}_k \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{e}_k^k G^{(k)} \boldsymbol{\mu}_k \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mu_{1k} & \cdots & \mu_{k-1,k} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ {}^t\boldsymbol{e}_k^k G^{(k)} \boldsymbol{\mu}_k \end{bmatrix} \\
= {}^t\boldsymbol{e}_k^k G^{(k)} \boldsymbol{\mu}_k = \sum_{i=1}^{k-1} g_{ki}\mu_{ik} + g_{kk} = \frac{1}{\left|G^{(k-1)}\right|} \sum_{i=1}^{k} g_{ik}\ \tilde{g}_{ik}^{(k)} &= \frac{\left|G^{(k)}\right|}{\left|G^{(k-1)}\right|}
\end{aligned}$$

なので，$\nu_k = 1/\|\boldsymbol{w}_k\| = \sqrt{\left|G^{(k-1)}\right| / \left|G^{(k)}\right|}$ として

$$N = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{g_{11}} & & & O \\ & \nu_2 & & \\ & & \ddots & \\ O & & & \nu_n \end{bmatrix}$$

によって $(\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_m) = (\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_n)N$ と書ける． □

注意. 各 $\boldsymbol{w}_k$ $(k \geq 2)$ は $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_{k-1}$ に直交するので，

$$\begin{aligned}
\mathbf{0}_{k-1} &= \begin{bmatrix} (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{w}_k) \\ \vdots \\ (\boldsymbol{v}_{k-1}, \boldsymbol{w}_k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} {}^t\boldsymbol{e}_1 G^{(k)} \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{k}} \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{e}_{k-1} G^{(k)} \boldsymbol{\mu}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} {}^t\boldsymbol{e}_1 G^{(k)} \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{e}_{k-1} G^{(k)} \end{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_k \\
&= \begin{bmatrix} & g_{1k} \\ G^{(k-1)} & \vdots \\ & g_{k-1,k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_{1k} \\ \vdots \\ \mu_{k-1,k} \\ 1 \end{bmatrix} = G^{(k-1)} \begin{bmatrix} \mu_{1k} \\ \vdots \\ \mu_{k-1,k} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} g_{1k} \\ \vdots \\ g_{k-1,k} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

となる．つまり，$\begin{bmatrix} \mu_{1k} \\ \vdots \\ \mu_{k-1,k} \end{bmatrix}$ は連立 1 次方程式 $G^{(k-1)}\boldsymbol{x} = -\begin{bmatrix} g_{1k} \\ \vdots \\ g_{k-1,k} \end{bmatrix}$ の解でもある．

例 1. 3 次元実内積空間 V の基底 $\{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3\}$ の Gram 行列が以下のように与えられるとする.

$$G = [(\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j] = \begin{bmatrix} 10 & 4 & 3 \\ 4 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 5 \end{bmatrix}$$

定理 2.1 から，GSO により得られる直交基底 $\{\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \boldsymbol{w}_3\}$ は以下のように計算できる.

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{w}_1 &= \boldsymbol{v}_1 \\
\boldsymbol{w}_2 &= \frac{1}{10}\begin{vmatrix} 10 & 4 \\ \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{vmatrix} = \frac{1}{10}\left(-4\boldsymbol{v}_1 + 10\boldsymbol{v}_2\right) = -\frac{2}{5}\boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_2 \\
\boldsymbol{w}_3 &= \frac{1}{\begin{vmatrix} 10 & 4 \\ 4 & 2 \end{vmatrix}}\begin{vmatrix} 10 & 4 & 3 \\ 4 & 2 & 1 \\ \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{v}_3 \end{vmatrix} = \frac{1}{4}\left(\begin{vmatrix} 4 & 3 \\ 2 & 1 \end{vmatrix}\boldsymbol{v}_1 - \begin{vmatrix} 10 & 3 \\ 4 & 1 \end{vmatrix}\boldsymbol{v}_2\right) + \boldsymbol{v}_3 \\
&= -\frac{1}{2}\boldsymbol{v}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{v}_2 + \boldsymbol{v}_3
\end{aligned}$$

あるいは，その後の注意で述べたように方程式 $\begin{bmatrix} 10 & 4 \\ 4 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mu_{13} \\ \mu_{23} \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}$ を解いて

$$\boldsymbol{w}_3 = \mu_{13}\boldsymbol{v}_1 + \mu_{23}\boldsymbol{v}_2 + \boldsymbol{v}_3 = -\frac{1}{2}\boldsymbol{v}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{v}_2 + \boldsymbol{v}_3$$

と計算することもできる．さらに，それぞれの自己内積は

$$(\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2) = 10, \quad (\boldsymbol{w}_2, \boldsymbol{w}_2) = \frac{\begin{vmatrix} 10 & 4 \\ 4 & 2 \end{vmatrix}}{10} = \frac{2}{5}, \quad (\boldsymbol{w}_3, \boldsymbol{w}_3) = \frac{\begin{vmatrix} 10 & 4 & 3 \\ 4 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 5 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 10 & 4 \\ 4 & 2 \end{vmatrix}} = 4$$

である．従って，GSO で得られる V の正規直交基底 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3\}$ は

$$\boldsymbol{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{10}}\,\boldsymbol{w}_1, \quad \boldsymbol{u}_2 = \frac{\sqrt{10}}{2}\,\boldsymbol{w}_2, \quad \boldsymbol{u}_3 = \frac{1}{2}\,\boldsymbol{w}_3$$

である．つまり，基底間の変換は以下のように書ける.

$$(\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \boldsymbol{w}_3) = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3)\begin{bmatrix} 1 & -\frac{2}{5} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3) = (\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \boldsymbol{w}_3)\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{10}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{10}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

3 行基本変形による計算

定理 2.1 の直交基底への変換行列 M は $n \times 2n$ 行列 $[G|E]$ に行基本変形「ある行に別の行のスカラー倍を加える」を有限回施すことで計算することでもできる．例えば，例 1 の G に対しては

$$[G \mid E_3] = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 10 & 4 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 5 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right] \to \left[\begin{array}{ccc|ccc} 10 & 4 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{5} & -\frac{1}{5} & -\frac{2}{5} & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{5} & \frac{41}{10} & -\frac{3}{10} & 0 & 1 \end{array}\right]$$

$$\to \left[\begin{array}{ccc|ccc} 10 & 4 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{5} & -\frac{1}{5} & -\frac{2}{5} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \end{array}\right]$$

と左 3 列が上三角行列になるように変形できる．このとき，右 3 列の転置行列が変換行列 M である．つまり，

$$M = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{2}{5} & -\frac{1}{2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

である．さらに，変形後の左 3 列の上三角行列の対角成分には直交基底 $\{\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \boldsymbol{w}_3\}$ の自己内積が並ぶ．つまり，

$$(\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_1) = 10, \quad (\boldsymbol{w}_2, \boldsymbol{w}_2) = \frac{2}{5}, \quad (\boldsymbol{w}_3, \boldsymbol{w}_3) = 4$$

である．これは [2] の結果をほんの少しだけ拡張している．この計算過程の正当性を説明する．

$G = [g_{ij}]$ を実内積空間 V の基底 $\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ の Gram 行列とする．G は正定値対称行列なので，行基本変形の「 i 行の c 倍を j 行に加える $(i < j)$」のみを有限回施すことで上三角行列 U へ変形できる（補題 1 として後述）．そのような行基本変形に対応する基本行列は，いずれも全ての対角成分が 1 の下三角行列なので，それら全ての積 L も対角成分が全て 1 の下三角行列であり，$U = LG$ となる．従って，$[G \mid E]$ に上記のような行基本変形を施せば

$$[G \mid E] \to L\,[G \mid E] = [LG \mid L] = [U \mid L]$$

となる．ここで，$M = {}^tL$ として

$$(\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \ldots \boldsymbol{w}_n) = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n)\,M$$

と基底を変換し，$\{\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_n\}$ の Gram 行列を H とすると H は対称行列であり，

$$H = [(\boldsymbol{w}_i, \boldsymbol{w}_j)] = {}^tMGM = LGM = UM$$

より H は上三角行列でもある．従って，H は対角行列なので $\{\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_n\}$ は V の直交基底である．また，M の対角成分は全て 1 なので，H と U の対角成分は等しい．つまり，$(\boldsymbol{w}_i, \boldsymbol{w}_i)$ は U の (i, i) 成分に等しい．さらに，M の対角成分が全て 1 であることはこの $\{\boldsymbol{w}_1, \ldots, \boldsymbol{w}_n\}$ が定理 2.1 の直交基底に等しいことを表している．

先の説明で省いた部分を補題 1 として示しておく．

補題 1. 正定値対称行列 G は，$i<j$ である行基本変形「 i 行の c 倍を j 行に加える」のみを有限回施すことで，上三角行列へと変形できる．

証明. $G=[g_{ij}]$ とし，その次数 n に関する帰納法による．$n=1$ のときは明らか．$n\geq 2$ とする．G の正定値性から $g_{11}>0$ なので，G に行基本変形「1 行の $-g_{i1}/g_{11}$ 倍を i 行に加える」を $i=2,\ldots,n$ として順次施して

$$G\to LG=\begin{bmatrix} g_{11} & \boldsymbol{*} \\ \mathbf{0} & G' \end{bmatrix}$$

と変形できる．ここで，L は上記の行基本変形に対応する基本行列たちの積であり，下三角行列である．$H:=LG\,{}^tL$ は対称行列なので

$$L=\begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \boldsymbol{*} & L' \end{bmatrix}$$

とおくと，

$$H=\begin{bmatrix} g_{11} & * \\ \mathbf{0} & G' \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & * \\ \mathbf{0} & {}^tL' \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} g_{11} & * \\ \mathbf{0} & G'\,{}^tL' \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} g_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & H' \end{bmatrix}$$

となり，$H':=G'\,{}^tL'$ も対称行列である．さらに，任意の $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ に対して ${}^tL\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ なので，G の正定値性から

$${}^t\boldsymbol{x}H\boldsymbol{x}={}^t\boldsymbol{x}\left(LG\,{}^tL\right)\boldsymbol{x}={}^t\left({}^tL\boldsymbol{x}\right)G\left({}^tL\boldsymbol{x}\right)>0$$

より，H は正定値である．従って，H' も正定値対称行列なので，帰納法の仮定から行基本変形「i 行の c 倍を j 行に加える $(i<j)$」のみを有限回施して上三角行列 U_1' へと変形でき，そのような行基本変形に対応する基本行列たちの積を L_1' とすれば $U'=L_1'H'=L_1'G'\,{}^tL'$ である．${}^tL'$ は対角成分が全て 1 の上三角行列なので正則で，その逆行列 $({}^tL')^{-1}$ は上三角行列だから

$$L_1'G'=U'\left({}^tL'\right)^{-1}$$

は上三角行列である．よって，

$$L_1=\begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & L_1' \end{bmatrix}$$

とおけば

$$L_1LG=\begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & L_1' \end{bmatrix}\begin{bmatrix} g_{11} & \boldsymbol{*} \\ \mathbf{0} & G' \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} g_{11} & \boldsymbol{*} \\ \mathbf{0} & L_1'G' \end{bmatrix}$$

より，L_1LG は上三角行列である．$\square$

例 2. 2 次以下の多項式のなすベクトル空間 $\mathbb{R}[x]_2$ に

$$(f, g) = \int_0^1 f(x)g(x)dx \quad (f, g \in \mathbb{R}[x]_2)$$

として内積を定める．この内積空間の直交基底を求めるために，基底 $\{1, x, x^2\}$ を直交化する．まず，$i, j = 0, 1, 2$ に対して

$$(x^i, x^j) = \int_0^1 x^{i+j}\ dx = \left[\frac{1}{i+j+1}x^{i+j+1}\right]_0^1 = \frac{1}{i+j+1}$$

より，基底 $\{1, x, x^2\}$ の Gram 行列は

$$G = \left[\frac{1}{i+j-1}\right] = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \end{bmatrix}$$

である．$[G \mid E_3]$ を変形する．

$$\left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & 0 & 0 & 1 \end{array}\right] \to \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{12} & \frac{1}{12} & -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{12} & \frac{4}{45} & -\frac{1}{3} & 0 & 1 \end{array}\right] \to \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{12} & \frac{1}{12} & -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{180} & \frac{1}{6} & -1 & 1 \end{array}\right]$$

これより

$$(f_1, f_2, f_3) = \left(1, x, x^2\right) \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{6} \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \left(1, \quad -\frac{1}{2} + x, \quad \frac{1}{6} - x + x^2\right)$$

とすれば，$\{f_1, f_2, f_3\}$ は直交基底で，各多項式の自己内積は以下の通りである．

$$(f_1, f_1) = 1, \quad (f_2, f_2) = \frac{1}{12}, \quad (f_3, f_3) = \frac{1}{180}$$

参考文献

[1] 三宅敏恒,「入門線形代数」(1991)，培風館.

[2] L. Pursell and S. Y. Trimble, “Gram-Schmidt Orthogonalization by Gauss Elimination”, The American Mathematical Monthly, **98**, No.6 (1991), p.544-549.