$\{\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n\}$ を実内積空間 V の基底とし，その Gram 行列を $G = [g_{ij}] = [(\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j)]$ とする．G は正定値対称行列である．V の基底 $\{\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n\}$ に Gram-Schmidt の正規直交化法を適用して得られる V の正規直交基底 $\{\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n\}$ の明示公式を記す．

G の k 次主対角行列を $G^{(k)}$ とし，その (i, j) 余因子を $\tilde{g}_{ij}^{(k)}$ とする．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 $k-1$ 次行列を表す．

定理 (Gram-Schmidt の正規直交化法の明示公式)**.** 上の設定のもとで

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

とすれば，$\boldsymbol{w}_1, \dots, \boldsymbol{w}_n$ は互いに直交する．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，$\{\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n\}$ は 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. Gram-Shcmidt の正規直交化法により

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

$$\boldsymbol{u}_i = \frac{\boldsymbol{w}_i}{\|\boldsymbol{w}_i\|} \ (1 \leq i \leq n)$$

とすれば，$\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ は V の正規直交基底となる．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，$\{\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_k\}$ を $\mathbb{R}^k$ の標準基底とすれば，各 $i = 1, \ldots, k-1$ に対して

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

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．

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

$\boldsymbol{\mu}_k$ の $\boldsymbol{e}_k$ 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

$$(\boldsymbol{w}_k,\boldsymbol{w}_k) = {}^t\boldsymbol{\mu}_k G^{(k)}\boldsymbol{\mu}_k = {}^t\boldsymbol{\mu}_k \begin{bmatrix} {}^t\boldsymbol{e}_1 G^{(k)}\boldsymbol{\mu}_k \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{e}_k G^{(k)}\boldsymbol{\mu}_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_{1k} & \cdots & \mu_{k-1,k} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ {}^t\boldsymbol{e}_k G^{(k)}\boldsymbol{\mu}_k \end{bmatrix}$$

$$= {}^t\boldsymbol{e}_k G^{(k)}\boldsymbol{\mu}_k = \sum_{i=1}^{k-1} g_{ki}\mu_{ik} + g_{kk} = \frac{1}{\left|G^{(k-1)}\right|}\sum_{i=1}^{k} g_{ik}\ \tilde{g}_{ik}^{(k)} = \frac{\left|G^{(k)}\right|}{\left|G^{(k-1)}\right|}$$

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，

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

$$= \left[\begin{array}{c|c} & g_{1k} \\ G^{(k-1)} & \vdots \\ & g_{k-1,k} \end{array}\right]\begin{bmatrix} \mu_{1k} \\ \vdots \\ \mu_{k-1,k} \\ 1 \end{bmatrix} = G^{(k-1)}\begin{bmatrix} \mu_{1k} \\ \vdots \\ \mu_{k-1,k} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} g_{1k} \\ \vdots \\ g_{k-1,k} \end{bmatrix}$$

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．

実内積空間の Gram 行列 G から行基本変形を用いて直交基底への変換行列 M を計算できる．

G は正定値対称行列なので，$n \times 2n$ 行列 $[G \mid E_n]$ に「ある行に別の行のスカラー倍を加える」という行基本変形だけを有限回施して左 n 列が上三角行列 U となるように変形できる． このとき，$[G \mid E_n] \to [U \mid {}^tM]$ となる．さらに，U の対角成分には直交基底の 2 乗ノルムが並ぶ．

例． 4 次元実内積空間 V の基底 $\{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3, \boldsymbol{v}_4\}$ の Gram 行列 $G = [(\boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{v}_j)]$ が

$$G = \begin{bmatrix} 27 & 8 & 5 & 14 \\ 8 & 3 & 2 & 4 \\ 5 & 2 & 13 & 5 \\ 14 & 4 & 5 & 11 \end{bmatrix}$$

であるとする．このとき，直交基底 $\{\boldsymbol{w}_1, \dots, \boldsymbol{w}_n\}$ を計算しよう．4×8 行列 $[G \mid E_4]$ に「ある行に別の行のスカラー倍を加える」という行基本変形だけを適宜施して

$$\left[\begin{array}{cccc|cccc} 27 & 8 & 5 & 14 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 8 & 3 & 2 & 4 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 2 & 13 & 5 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 14 & 4 & 5 & 11 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right] \longrightarrow \left[\begin{array}{cccc|cccc} 27 & 8 & 5 & 14 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{17}{27} & \frac{14}{27} & -\frac{4}{27} & -\frac{8}{27} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{198}{17} & \frac{43}{17} & \frac{1}{17} & -\frac{14}{17} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{625}{198} & -\frac{119}{198} & \frac{41}{99} & -\frac{43}{198} & 1 \end{array}\right]$$

とできる．これより

$$U = \begin{bmatrix} 27 & 8 & 5 & 14 \\ 0 & \frac{17}{27} & \frac{14}{27} & -\frac{4}{27} \\ 0 & 0 & \frac{198}{17} & \frac{43}{17} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{625}{198} \end{bmatrix}, \quad M = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{8}{27} & \frac{1}{17} & -\frac{119}{198} \\ 0 & 1 & -\frac{14}{17} & \frac{41}{99} \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{43}{198} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

である．従って，

$$(\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \boldsymbol{w}_3, \boldsymbol{w}_4) = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3, \boldsymbol{v}_4)M$$

とすれば，$\{\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \boldsymbol{w}_3, \boldsymbol{w}_4\}$ は V の直交基底である．さらに，U の対角成分がそれぞれの 2 乗ノルムである．つまり，

$$(\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_1) = 27, \quad (\boldsymbol{w}_2, \boldsymbol{w}_2) = \frac{17}{27}, \quad (\boldsymbol{w}_3, \boldsymbol{w}_3) = \frac{198}{17}, \quad (\boldsymbol{w}_4, \boldsymbol{w}_4) = \frac{625}{198}$$

なので

$$\boldsymbol{u}_1 = \sqrt{\frac{1}{27}}\boldsymbol{w}_1, \quad \boldsymbol{u}_2 = \sqrt{\frac{27}{17}}\boldsymbol{w}_2, \quad \boldsymbol{u}_3 = \sqrt{\frac{17}{198}}\boldsymbol{w}_3, \quad \boldsymbol{u}_4 = \sqrt{\frac{198}{625}}\boldsymbol{w}_4$$

とすれば，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3, \boldsymbol{u}_4\}$ は V の正規直交基底である．

参考文献

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