

$\{v_1, \dots, v_n\}$  を実内積空間  $V$  の基底とし、その Gram 行列を  $G = [g_{ij}] = [(v_i, v_j)]$  とする。  $G$  は正定値対称行列である。  $V$  の基底  $\{v_1, \dots, v_n\}$  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  $\{u_1, \dots, u_n\}$  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、

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

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

$$w_1 = v_1, \quad w_k = \frac{1}{|G^{(k-1)}|} \sum_{i=1}^k \tilde{g}_{ik}^{(k)} v_i = \frac{1}{|G^{(k-1)}|} \begin{vmatrix} g_{11} & \cdots & g_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{k-1,k} & \cdots & g_{k-1,k} \\ v_1 & \cdots & v_k \end{vmatrix} \quad (2 \leq k \leq n)$$

とすれば、 $w_1, \dots, w_n$  は互いに直交する。さらに、

$$(w_1, w_1) = g_{11}, \quad (w_k, w_k) = \frac{|G^{(k)}|}{|G^{(k-1)}|} \quad (2 \leq k \leq n)$$

となる。これより

$$u_1 = \frac{w_1}{\sqrt{g_{11}}}, \quad u_k = \sqrt{\frac{|G^{(k-1)}|}{|G^{(k)}|}} w_k \quad (2 \leq k \leq n)$$

とすれば、 $\{u_1, \dots, u_n\}$  は  $V$  の正規直交基底である。つまり、

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

とにおいて

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

とすれば、以下が成り立つ。

$$(u_1, u_2, \dots, u_n) = (w_1, w_2, \dots, w_n) N = (v_1, v_2, \dots, v_n) M N$$

証明. Gram-Schmidt の正規直交化法により

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_1 &= \mathbf{v}_1, \quad \mathbf{w}_k = \mathbf{v}_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{(\mathbf{v}_k, \mathbf{w}_i)}{(\mathbf{w}_i, \mathbf{w}_i)} \mathbf{w}_i \quad (2 \leq k \leq n) \\ \mathbf{u}_i &= \frac{\mathbf{w}_i}{\|\mathbf{w}_i\|} \quad (1 \leq i \leq n) \end{aligned}$$

とすれば,  $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$  は  $V$  の正規直交基底となる. このとき, 各  $k = 2, \dots, n$  に対して

$$\langle \mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_{k-1} \rangle = \langle \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{k-1} \rangle$$

なので,

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

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  $(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_n) = (\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)M$  と書ける. この各  $\mu_{ij}$  を決定する.

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

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

である. 従って,  $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k\}$  を  $\mathbb{R}^k$  の標準基底とすれば, 各  $i = 1, \dots, k-1$  に対して

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

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

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

$\mu_k$  の  $e_k$  成分は 1 なので  $m_k = 1/\tilde{g}_{kk}^{(k)} = 1/|G^{(k-1)}|$  である. 以上から,  $k = 2, \dots, n$  に対して

$$w_k = (v_1, \dots, v_k) \mu_k = \frac{1}{|G^{(k-1)}|} \sum_{i=1}^k \tilde{g}_{ik}^{(k)} v_k = \frac{1}{|G^{(k-1)}|} \begin{bmatrix} g_{11} & \cdots & g_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{k-1,1} & \cdots & g_{k-1,k} \\ v_1 & \cdots & v_k \end{bmatrix}$$

を得る. さらに,  $\|w_1\| = \sqrt{g_{11}}$  であり,  $k = 2, \dots, n$  に対しては

$$\begin{aligned} (w_k, w_k) &= {}^t \mu_k G^{(k)} \mu_k = {}^t \mu_k \begin{bmatrix} {}^t e_1 G^{(k)} \mu_k \\ \vdots \\ {}^t e_k G^{(k)} \mu_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_{1k} & \cdots & \mu_{k-1,k} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ {}^t e_k G^{(k)} \mu_k \end{bmatrix} \\ &= {}^t e_k G^{(k)} \mu_k = \sum_{i=1}^{k-1} g_{ki} \mu_{ik} + g_{kk} = \frac{1}{|G^{(k-1)}|} \sum_{i=1}^k g_{ik} \tilde{g}_{ik}^{(k)} = \frac{|G^{(k)}|}{|G^{(k-1)}|} \end{aligned}$$

なので,  $\nu_k = 1/\|w_k\| = \sqrt{|G^{(k-1)}|/|G^{(k)}|}$  として

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

によって  $(u_1, \dots, u_m) = (w_1, \dots, w_n)N$  と書ける. □

**注意.** 各  $w_k$  ( $k \geq 2$ ) は  $v_1, \dots, v_{k-1}$  に直交するので,

$$\begin{aligned} 0_{k-1} &= \begin{bmatrix} (v_1, w_k) \\ \vdots \\ (v_{k-1}, w_k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} {}^t e_1 G^{(k)} \mu_k \\ \vdots \\ {}^t e_{k-1} G^{(k)} \mu_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} {}^t e_1 G^{(k)} \\ \vdots \\ {}^t e_{k-1} G^{(k)} \end{bmatrix} \mu_k \\ &= \begin{bmatrix} & g_{1k} \\ G^{(k-1)} & \vdots \\ & g_{k-1,k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_{1k} \\ \vdots \\ \mu_{k-1,k} \\ 1 \end{bmatrix} = G^{(k-1)} \begin{bmatrix} \mu_{1k} \\ \vdots \\ \mu_{k-1,k} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} g_{1k} \\ \vdots \\ g_{k-1,k} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

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  $G^{(k-1)} x = - \begin{bmatrix} g_{1k} \\ \vdots \\ g_{k-1,k} \end{bmatrix}$  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,  $[G \mid E_n] \rightarrow [U \mid {}^t M]$  となる. このとき,  $U$  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  $\{v_1, v_2, v_3, v_4\}$  の Gram 行列  $G = [(v_i, v_j)]$  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  $\{w_1, \dots, w_n\}$  を計算しよう.  $4 \times 8$  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

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

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,

$$(w_1, w_2, w_3, w_4) = (v_1, v_2, v_3, v_4)M$$

とすれば,  $\{w_1, w_2, w_3, w_4\}$  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,

$$(w_1, w_1) = 27, \quad (w_2, w_2) = \frac{17}{27}, \quad (w_3, w_3) = \frac{198}{17}, \quad (w_4, w_4) = \frac{625}{198}$$

なので

$$u_1 = \sqrt{\frac{1}{27}}w_1, \quad u_2 = \sqrt{\frac{27}{17}}w_2, \quad u_3 = \sqrt{\frac{17}{198}}w_3, \quad u_4 = \sqrt{\frac{198}{625}}w_4$$

とすれば,  $\{u_1, u_2, u_3, u_4\}$  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.