グラム・シュミットの直交化法

平成 21 年 3 月
小澤　徹
http://www.ozawa.phys.waseda.ac.jp/index2.html

複素ベクトル空間 X に内積 $(\cdot,\cdot)$ が与えられているものとする。X の一次独立な系 $\{f_j; 1 \le j \le n\}$ が与えれたとき次の性質を満たす一次独立系 $\{e_j; 1 \le j \le n\}$ の存在を考えよう：

(NOS1)　$1 \le j,\ k \le n$ なる任意の j, k に対し $(e_j, e_k) = \delta_{jk}$

(NOS2)　$1 \le j \le n$ なる任意の j に対し

$$\mathrm{L.h.}\{e_k; 1 \le k \le j\} = \mathrm{L.h.}\{f_k; 1 \le k \le j\}$$

グラム・シュミットの方法によりこの様な $\{e_j\}$ を構成しよう。先ず $\{f_j\}$ の一次独立性より $f_1 \neq 0$ である。そこで f_1 を規格化して $e_1 = f_1/\|f_1\|$ と置く。このとき $\mathrm{L.h.}\{e_1\} = \{\lambda e_1; \lambda \in \mathbb{C}\} = \{\lambda f_1; \lambda \in \mathbb{C}\} = \mathrm{L.h.}\{f_1\}$ となる。次に $\mathrm{L.h.}\{e_1, e_2\} = \mathrm{L.h.}\{f_1, f_2\} = \left\{\sum_{k=1}^{2} \lambda_k f_k; \lambda_k \in \mathbb{C}\right\}$ かつ $(e_2, e_1) = 0$ となる e_2 を決定しよう。$\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ により $e_2 = \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2$ と表されているものとして e_1 との内積を取ると等式

$$(e_2, e_1) = \lambda_1(f_1, e_1) + \lambda_2(f_2, e_1)$$

が得られる。ここで

$$(e_2, e_1) = 0 \Leftrightarrow \lambda_1(f_1, e_1) + \lambda_2(f_2, e_1) = 0$$

である事に注目し後者の等式及び $(f_1, e_1) = \|f_1\|$ を用いると

$$\begin{aligned} e_2 = \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 &= \left(-\lambda_2 \frac{(f_2, e_1)}{(f_1, e_1)}\right) f_1 + \lambda_2 f_2 \\ &= -\lambda_2 \frac{(f_2, e_1)}{\|f_1\|} f_1 + \lambda_2 f_2 \\ &= \lambda_2 (f_2 - (f_2, e_1) e_1) \end{aligned}$$

を得る。逆に e_2 が最後の式で与えられるものとすると

$$\begin{aligned} (e_1, f_2 - (f_2, e_1)e_1) &= (e_1, f_2) - \overline{(f_2, e_1)}(e_1, e_1) \\ &= (e_1, f_2) - (e_1, f_2)\|e_1\|^2 = 0 \end{aligned}$$

となり直交条件 $(e_1, e_2) = 0$ が従う。$f_2 - (f_2, e_1)e_1 = 0$ ならば $\{f_1, f_2\}$ は一次従属となってしまうので $f_2 - (f_2, e_1)e_1 \neq 0$ となる。そこで λ_2 を

$$\lambda_2 = 1/\|f_2 - (f_2, e_1)e_1\|$$

と定めると $\|e_1\| = 1$ が従う。e_2 の定義より $e_2 \in \mathrm{L.h.}\{f_1, f_2\}$ であり $\dim \mathrm{L.h.}\{e_1, e_2\} = 2 = \dim \mathrm{L.h.}\{f_1, f_2\}$ となるから $\mathrm{L.h.}\{e_1, e_2\} = \mathrm{L.h.}\{f_1, f_2\}$ が従う。

以下 $j \ge 3$ に対し次の性質を満たす $\{e_k; 1 \le k \le j-1\}$ が構成出来たものとする：

- $1 \le k, \ell \le j-1$ なる任意の k, ℓ に対し $(e_k, e_\ell) = \delta_{k,\ell}$
- $1 \le k \le j-1$ なる任意の k に対し

$$\mathrm{L.h.}\{e_\ell; 1 \le \ell \le k\} = \mathrm{L.h.}\{f_\ell; 1 \le \ell \le k\}$$

このとき

- $\mathrm{L.h.}\{e_k; 1 \le k \le j\} = \mathrm{L.h.}\{f_k; 1 \le k \le j\}$
- $\ell \le j-1 \Rightarrow (e_j, e_\ell) = 0$

なる e_j を決定しよう。$\lambda_1, \cdots, \lambda_j \in \mathbb{C}$ により $e_j = \sum_{k=1}^{j} \lambda_k f_k$ と表されているものとする。$\mathrm{L.h.}\{f_k; 1 \le k \le j-1\} = \mathrm{L.h.}\{e_k; 1 \le k \le j-1\}$ であるから或る $\mu_1, \cdots, \mu_{j-1} \in \mathbb{C}$ により

$$e_j = \lambda_j f_j + \sum_{\ell=1}^{j-1} \mu_\ell e_\ell$$

と表される。そこで $\ell \le j-1$ に対して e_ℓ との内積を取ると等式

$$(e_j, e_\ell) = \lambda_j (f_j, e_\ell) + \mu_\ell$$

が得られる。ここで

$$(e_j, e_\ell) = 0 \Leftrightarrow \lambda_j (f_j, e_\ell) + \mu_\ell = 0$$

である事に注目し後者の等式を用いると

$$\begin{aligned} e_j &= \lambda_j f_j + \sum_{\ell=1}^{j-1} \mu_\ell e_\ell \\ &= \lambda_j \left(f_j - \sum_{\ell=1}^{j-1} (f_j, e_\ell) e_\ell \right) \end{aligned}$$

を得る。逆に e_j が最後の式で与えられるものとすると $k \le j-1$ ならば

$$\begin{aligned} (e_k, f_j - \sum_{\ell=1}^{j-1} (f_j, e_\ell) e_\ell) &= (e_k, f_j) - \sum_{\ell=1}^{j-1} \overline{(f_j, e_\ell)} (e_k, e_\ell) \\ &= (e_k, f_j) - \overline{(f_j, e_k)} \|e_k\|^2 = 0 \end{aligned}$$

となり直交条件 $(e_k, e_j) = 0$ が従う。$f_j - \sum_{\ell=1}^{j-1} (f_j, e_\ell) e_\ell = 0$ ならば $f_j \in \mathrm{L.h.}\{e_k; 1 \le \ell \le j-1\} = \mathrm{L.h.}\{f_\ell; 1 \le \ell \le j-1\}$ となり $\{f_\ell; 1 \le \ell \le j\}$ は一次従属となってしまうので $f_j - \sum_{\ell=1}^{j-1} (f_j, e_\ell) e_\ell \neq 0$ となる。そこで λ_j を

$$\lambda_j = 1 \Bigg/ \left\| f_j - \sum_{\ell=1}^{j-1} (f_j, e_\ell) e_\ell \right\|$$

と定めると $\|e_j\| = 1$ が従う。e_j の定義より $e_j \in \mathrm{L.h.}\{f_k; 1 \leq k \leq j\}$ であり $\dim \mathrm{L.h.}\{e_k; 1 \leq k \leq j\} = j = \dim \mathrm{L.h.}\{f_k; 1 \leq k \leq j\}$ となるから $\mathrm{L.h.}\{e_k; 1 \leq k \leq j\} = \mathrm{L.h.}\{f_k; 1 \leq k \leq j\}$ が従う。

以上の議論を定理の形に纏めて置こう。直接証明する事は容易であろう。

定理 1.(グラム・シュミットの直交化法) 複素内積空間 X の任意の一次独立な系 $\{f_j; 1 \leq j \leq n\}$ に対し

$$e_1 = \frac{f_1}{\|f_1\|},\ e_2 = \frac{f_2 - (f_2, e_1)e_1}{\|f_2 - (f_2, e_1)e_1\|},$$
$$e_j = \frac{f_j - \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1}(f_j, e_k)e_k}{\|f_j - \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1}(f_j, e_k)e_k\|},\ 2 \leq j \leq n$$

と順に定めた $\{e_j; 1 \leq j \leq n\}$ は (NOS1)(NOS2) を満たす。

定理 2.(正規直交系の一意性) 内積を持った複素ベクトル空間に於いて高々可算個の一次独立系に対する正規直交系は絶対値 1 の複素数列倍を除いて一意に定まる。即ち与えられた一次独立系 $\{f_n; n \in \mathbb{Z}_{>0}\}$ に対し二つの正規直交系 $\{e_n; n \in \mathbb{Z}_{>0}\}$ 及び $\{e'_n; n \in \mathbb{Z}_{>0}\}$ が存在して任意の $n \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対し

$$\mathrm{L.h.}\{e_j; 1 \leq j \leq n\} = \mathrm{L.h.}\{e'_j; 1 \leq j \leq n\} = \mathrm{L.h.}\{f_j; 1 \leq j \leq n\}$$

を満たすものとすると $\{\alpha_n; n \in \mathbb{Z}_{>0}\} \subset \mathbb{C}$ が存在して任意の $n \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対し

$$e_n = \alpha_n e'_n, \quad |\alpha_n| = 1$$

を満たす。更に、各 $n \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対し e_n の $\{f_j; 1 \leq j \leq n\}$ による一次結合表示に於いて f_n の係数を正または負のどちらか一方に揃えれば $\{e_n; n \in \mathbb{Z}_{>0}\}$ は一意的に定まる。

注. 実ベクトル空間の場合は $\alpha_n = 1$ または $\alpha_n = -1$ の二通りである。

(証明) n に就いての帰納法による。$\mathrm{L.h.}\{e_1\} = \mathrm{L.h.}\{e'_1\} = \mathrm{L.h.}\{f_1\}$ より $a_1, a'_1 \in \mathbb{C}$ が存在し $e_1 = a_1 f_1,\ e'_1 = a'_1 f_1$ となる。$\|e_1\| = \|e'_1\| = 1,\ f_1 \neq 0$ であるから $|a_1| = |a'_1| \neq 0$ が従う。$\alpha_1 = a_1/a'_1$ として $e_1 = \alpha_1 e'_1$ を得る。$n \geq 2$ とし $n-1$ 迄成立つものとする。$e_n \in \mathrm{L.h.}\{f_j; 1 \leq j \leq n\}$ と $\mathrm{L.h.}\{f_j; 1 \leq j \leq n-1\} = \mathrm{L.h.}\{e_j; 1 \leq j \leq n-1\}$ 更に $\{e_j; 1 \leq j \leq n\}$ の一次独立性を用いると e_n は

$$e_n = \sum_{j=1}^{n-1} a_j e_j + a_n f_n, \quad a_n \neq 0$$

と表される。

$\{e_j; 1 \le j \le n\}$ の正規直交性より $k \le n-1$ なる任意の k に対し

$$\begin{aligned} 0 = (e_n, e_k) &= \sum_{j=1}^{n-1} a_j(e_j, e_k) + a_n(f_n, e_k) = a_k + a_n(f_n, e_k), \\ a_k &= -a_n(f_n, e_k) \end{aligned}$$

を得る。$\{e'_j; 1 \le j \le n\}$ に対しても同様に

$$e'_n = \sum_{j=1}^{n-1} e'_j e'_j + a'_n f_n, \quad a'_n \ne 0$$

と表して $k \le n-1$ なる任意の k に対し

$$a'_k = -a'_n(f_n, e'_k)$$

を得る。帰納法の仮定により $\{\alpha_j; 1 \le j \le n-1\} \subset \mathbb{C}$ が存在し $|\alpha_j| = 1,\ e_j = \alpha_j e'_j,\ j \le n-1$ を満たす。従って

$$\begin{aligned} a_k &= -a_n(f_n, \alpha_k e'_k) = -a_n \overline{\alpha_k}(f_n, e'_k) = \frac{a_n}{a'_n}\overline{\alpha_k}(-a'_n(f_n, e_k)) = \frac{a_n}{a'_n}\overline{\alpha_k} a'_k, \\ e_n &= \sum_{j=1}^{n-1} \left(\frac{a_n}{a'_n} \overline{\alpha_j} a'_j \right) e_j + a_n f_n \\ &= \frac{a_n}{a'_n} \left(\sum_{j=1}^{n-1} a'_j \overline{\alpha_j} e_j + a'_n f_n \right) \\ &= \frac{a_n}{a'_n} \left(\sum_{j=1}^{n-1} a'_j e'_j + a'_n f_n \right) = \frac{a_n}{a'_n} e'_n \end{aligned}$$

が成立つ。$\|e_n\| = \|e'_n\| = 1$ より $|a_n/a'_n| = 1$ を得る。よって $\alpha_n = a_n/a'_n$ とすれば良い。

グラム・シュミットの直交化法は幾何学的観点からは自然であるが $e_1, e_2, \cdots$ と順々に構成して行く為 $\{e_j; 1 \le j \le n\}$ を $\{f_j; 1 \le j \le n\}$ の一次結合で直接書き表している訳ではない。そこで二つの系の直接的な関係を知る為 $n = 3$ の場合を計算しよう。先ず

$$e_1 = \frac{f_1}{\|f_1\|}$$

は定義自体が e_1 を f_1 で表したものとなっている。次に

$$e_2 = \frac{f_2 - (f_2, e_1)e_1}{\|f_2 - (f_2, e_1)e_1\|}$$

の右辺を $\{f_1, f_2\}$ の一次結合で表す為にその分子を考える：

$$\begin{aligned} f_2 - (f_2, e_1)e_1 &= f_2 - \left(f_2, \frac{f_1}{\|f_1\|} \right) \frac{f_1}{\|f_1\|} \\ &= \frac{(f_1, f_1)f_2 - (f_2, f_1)f_1}{\|f_1\|^2} \end{aligned}$$

最後の分子を規格化したものが e_2 に等しいのでその長さを計算すれば良い。

$$
\begin{aligned}
&\|(f_1,f_1)f_2-(f_2,f_1)f_1\|^2 \\
&=|(f_1,f_1)|^2\|f_2\|^2-2\mathrm{Re}((f_1,f_1)f_2,(f_2,f_1)f_1)+|(f_2,f_1)|^2\|f_1\|^2 \\
&=\|f_1\|^4\|f_2\|^2-2\|f_1\|^2\overline{(f_2,f_1)}(f_2,f_1)+|(f_2,f_1)|^2\|f_1\|^2 \\
&=\|f_1\|^2(\|f_1\|^2\|f_2\|^2-|(f_2,f_1)|^2)
\end{aligned}
$$

となるので

$$
e_2=\frac{(f_1,f_1)f_2-(f_2,f_1)f_1}{\|f_1\|(\|f_1\|^2\|f_2\|^2-|(f_2,f_1)|^2)^{1/2}}
$$

を得る。これを

$$
\begin{aligned}
e_2 &= \frac{1}{\sqrt{G_1G_2}}\begin{vmatrix}(f_1,f_1) & (f_2,f_1)\\ f_1 & f_2\end{vmatrix}=\frac{1}{\sqrt{G_1G_2}}\begin{vmatrix}(f_1,f_1) & f_1\\ (f_2,f_1) & f_2\end{vmatrix}, \\
G_1 &= \|f_1\|^2=(f_1,f_1), \\
G_2 &= \begin{vmatrix}(f_1,f_1) & (f_1,f_2)\\ (f_2,f_1) & (f_2,f_2)\end{vmatrix}
\end{aligned}
$$

と表す事にする。このとき

$$
e_1=\frac{1}{\sqrt{G_1}}f_1
$$

となる。最後に

$$
e_3=\frac{f_3-(f_3,e_2)e_2-(f_3,e_1)e_1}{\|f_3-(f_3,e_2)e_2-(f_3,e_1)e_1\|}
$$

の右辺を $\{f_1,f_2,f_3\}$ の一次結合で表す為にその分子を考える：

$$
\begin{aligned}
(f_3,e_1)e_1 &= \frac{(f_3,f_1)f_1}{G_1}, \\
(f_3,e_2)e_2 &= \frac{1}{G_1G_2}((f_3,(f_1,f_1)f_2-(f_2,f_1)f_1)e_2) \\
&= \frac{1}{G_1G_2}((((f_1,f_1)(f_3,f_2)-(\overline{f_2,f_1})(f_3,f_1))e_2) \\
&= \frac{1}{G_1G_2}((f_1,f_1)(f_3,f_2)-(f_1,f_2)(f_3,f_1))(f_1,f_1)f_2 \\
&\quad -\frac{1}{G_1G_2}((f_1,f_1)(f_3,f_2)-(f_1,f_2)(f_3,f_1))(f_2,f_1)f_1
\end{aligned}
$$

となるので

$$
\begin{aligned}
& f_3 - (f_3, e_2)e_2 - (f_3, e_1)e_1 \\
= & \frac{1}{G_2}((f_1, f_1)(f_2, f_2) - (f_1, f_2)(f_2, f_1))f_3 \\
& - \frac{1}{G_2}((f_1, f_1)(f_3, f_2) - (f_1, f_2)(f_3, f_1))f_2 \\
& + \frac{1}{G_1 G_2}((f_1, f_1)(f_3, f_2) - (f_1, f_2)(f_3, f_1))(f_2, f_1)f_1 \\
& - \frac{1}{G_1 G_2}((f_1, f_1)(f_2, f_2) - (f_1, f_2)(f_2, f_1))(f_3, f_1)f_1 \\
= & \frac{1}{G_2}((f_1, f_1)(f_2, f_2) - (f_1, f_2)(f_2, f_1))f_3 \\
& - \frac{1}{G_2}((f_1, f_1)(f_3, f_2) - (f_1, f_2)(f_3, f_1))f_2 \\
& + \frac{1}{G_2}((f_3, f_2)(f_2, f_1) - (f_2, f_2)(f_3, f_1))f_1
\end{aligned}
$$

を得る。最後の右辺に現れる分子、即ち各辺に G_2 を掛けたものを規格化したものが e_3 に等しいのでその長さを計算すれば良い。その為に

$$
\begin{aligned}
A_1 &= (f_3, f_2)(f_2, f_1) - (f_2, f_2)(f_3, f_1) = \begin{vmatrix} (f_2, f_1) & (f_3, f_1) \\ (f_2, f_2) & (f_3, f_2) \end{vmatrix}, \\
A_2 &= (f_1, f_2)(f_3, f_1) - (f_1, f_1)(f_3, f_2) = \begin{vmatrix} (f_1, f_1) & (f_1, f_2) \\ (f_3, f_1) & (f_3, f_2) \end{vmatrix}, \\
A_3 &= (f_1, f_1)(f_2, f_2) - (f_1, f_2)(f_2, f_1) = \begin{vmatrix} (f_1, f_1) & (f_2, f_1) \\ (f_1, f_2) & (f_2, f_2) \end{vmatrix} = G_2
\end{aligned}
$$

と置いて $A_3 f_3 + A_2 f_2 + A_1 f_1$ の長さを求めよう：

$$
\begin{aligned}
& \|A_3 f_3 + A_2 f_2 + A_1 f_1\|^2 \\
= & |A_3|^2 \|f_3\|^2 + |A_2|^2 \|f_2\|^2 + |A_1|^2 \|f_1\|^2 \\
& + 2\mathrm{Re}(A_3 \overline{A_2}(f_3, f_2)) + 2\mathrm{Re}(A_2 \overline{A_1}(f_2, f_1)) + 2\mathrm{Re}(A_3 \overline{A_1}(f_3, f_1))
\end{aligned}
$$

右辺の各項を展開する。先ず自乗の項を考えると

$$\begin{aligned}
|A_3|^2\|f_3\|^2 &= G_2^2\|f_3\|^2 = G_2(\|f_1\|^2\|f_2\|^2\|f_3\|^2 - |(f_1, f_2)|^2\|f_3\|^2),\\
|A_2|^2\|f_2\|^2 &= |(f_1, f_2)(f_3, f_1) - (f_1, f_1)(f_3, f_2)|^2\|f_2\|^2\\
&= |(f_1, f_2)(f_3, f_1)|^2\|f_2\|^2 + |(f_1, f_1)(f_3, f_2)|^2\|f_2\|^2\\
&\quad - 2\mathrm{Re}((f_1, f_2)(f_3, f_1)(f_1, f_1)\overline{(f_3, f_2)})\|f_2\|^2\\
&= |(f_1, f_2)|^2|(f_3, f_1)|^2\|f_2\|^2 + |(f_2, f_3)|^2\|f_1\|^4\|f_2\|^2\\
&\quad - 2\mathrm{Re}((f_1, f_2)(f_2, f_3)(f_3, f_1))\|f_1\|^2\|f_2\|^2,\\
|A_1|^2\|f_1\|^2 &= |(f_3, f_2)(f_2, f_1) - (f_2, f_2)(f_3, f_1)|^2\|f_1\|^2\\
&= |(f_3, f_2)(f_2, f_1)|^2\|f_1\|^2 + |(f_2, f_2)(f_3, f_1)|^2\|f_1\|^2\\
&\quad - 2\mathrm{Re}((f_3, f_2)(f_2, f_1)(f_2, f_2)\overline{(f_3, f_1)})\|f_1\|^2\\
&= |(f_1, f_2)|^2|(f_2, f_3)|^2\|f_1\|^2 + |(f_3, f_1)|^2\|f_1\|^2\|f_2\|^4\\
&\quad - 2\mathrm{Re}((f_1, f_2)(f_2, f_3)(f_3, f_1))\|f_1\|^2\|f_2\|^2
\end{aligned}$$

となるから

$$\begin{aligned}
&|A_3|^2\|f_2\|^2 + |A_2|^2\|f_2\|^2 + |A_1|^2\|f_1\|^2\\
&= G_2(\|f_1\|^2\|f_2\|^2\|f_3\|^2 - |(f_1, f_2)|^2\|f_3\|^2)\\
&\quad + |(f_1, f_2)|^2(|(f_3, f_1)|^2\|f_2\|^2 + |(f_2, f_3)|^2\|f_1\|^2)\\
&\quad + \|f_1\|^2\|f_2\|^2(|(f_2, f_3)|^2\|f_1\|^2 + |(f_3, f_1)|^2\|f_2\|^2)\\
&\quad - 4\mathrm{Re}((f_1, f_2)(f_2, f_3)(f_3, f_1))\|f_1\|^2\|f_2\|^2
\end{aligned}$$

を得る。

同様にして

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Re}(A_3\overline{A_2}(f_3, f_2))\\
&= G_2\mathrm{Re}(\overline{((f_1, f_2)(f_3, f_1) - (f_1, f_1)(f_3, f_2))}(f_3, f_2))\\
&= G_2\mathrm{Re}((f_1, f_2)(f_2, f_3)(f_3, f_1)) - G_2\|f_1\|^2|(f_2, f_3)|^2,\\
&\mathrm{Re}(A_2\overline{A_1}(f_2, f_1))\\
&= \mathrm{Re}(((f_1, f_2)(f_3, f_1) - (f_1, f_1)(f_3, f_2))\overline{((f_3, f_2)(f_2, f_1) - (f_2, f_2)(f_3, f_1))}(f_2, f_1))\\
&= \mathrm{Re}((f_1, f_2)(f_2, f_3)(f_3, f_1))|(f_1, f_2)|^2 - |(f_1, f_2)|^2|(f_3, f_1)|^2\|f_2\|^2\\
&\quad - \|f_1\|^2|(f_2, f_3)|^2|(f_1, f_2)|^2 + \mathrm{Re}((f_1, f_2)(f_2, f_3)(f_3, f_1))\|f_1\|^2\|f_2\|^2,\\
&\mathrm{Re}(A_3\overline{A_1}(f_3, f_1))\\
&= G_2\mathrm{Re}(\overline{((f_3, f_2)(f_2, f_1) - (f_2, f_2)(f_3, f_1))}(f_3, f_1))\\
&= G_2\mathrm{Re}((f_1, f_2)(f_2, f_3)(f_3, f_1)) - G_2\|f_2\|^2|(f_3, f_1)|^2
\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}
&2\mathrm{Re}(A_3\overline{A_2}(f_3, f_2)) + 2\mathrm{Re}(A_2\overline{A_1}(f_2, f_1)) + 2\mathrm{Re}(A_3\overline{A_1}(f_3, f_1))\\
&= 4G_2\mathrm{Re}((f_1, f_2)(f_2, f_3)(f_3, f_1)) - 2G_2(\|f_1\|^2|(f_2, f_3)|^2 + \|f_2\|^2|(f_3, f_1)|^2)\\
&\quad + 2(|(f_1, f_2)|^2 + \|f_1\|^2\|f_2\|^2)\mathrm{Re}((f_1, f_2)(f_2, f_3)(f_3, f_1))\\
&\quad - 2|(f_1, f_2)|^2(|(f_3, f_1)|^2\|f_2\|^2 + |(f_3, f_2)|^2\|f_1\|^2)
\end{aligned}$$

を得る。

さてこれで $\|A_3f_3+A_2f_2+A_1f_1\|^2$ の全ての展開を得たので各項を次の様に分類してその和を考えよう。

- G_2 を因子として持つ項の和

$$\begin{aligned}&G_2[4\mathrm{Re}((f_1,f_2)(f_2,f_3)(f_3,f_1))-2(\|f_1\|^2|(f_2,f_3)|^2+\|f_2\|^2|(f_3,f_1)|^2)\\&\quad+\|f_1\|^2\|f_2\|^2\|f_3\|^2-|(f_1,f_2)|^2\|f_3\|^2]\end{aligned}$$

- G_2 を因子として持たず $\mathrm{Re}((f_1,f_2)(f_2,f_3)(f_3,f_1))$ を因子として持つ項の和

$$\begin{aligned}&-4\mathrm{Re}((f_1,f_2)(f_2,f_3)(f_3,f_1))\|f_1\|^2\|f_2\|^2\\&+2(|(f_1,f_2)|^2+\|f_1\|^2\|f_2\|^2)\mathrm{Re}((f_1,f_2)(f_2,f_3)(f_3,f_1))\\&=-2G_2\mathrm{Re}((f_1,f_2)(f_2,f_3)(f_3,f_1))\end{aligned}$$

- G_2 も $\mathrm{Re}((f_1,f_2)(f_2,f_3)(f_3,f_1))$ も因子として持たない項の和

$$\begin{aligned}&(|(f_1,f_2)|^2+\|f_1\|^2\|f_2\|^2)(|(f_3,f_1)|^2\|f_2\|^2+|(f_2,f_3)|^2\|f_1\|^2)\\&-2|(f_1,f_2)|^2(|(f_3,f_1)|^2\|f_2\|^2+|(f_3,f_2)|^2\|f_1\|^2)\\&=G_2(|(f_2,f_3)|^2\|f_1\|^2+|(f_3,f_1)|^2\|f_2\|^2)\end{aligned}$$

従って

$$\begin{aligned}&\|A_3f_3+A_2f_2+A_1f_1\|^2\\&=G_2[2\mathrm{Re}((f_1,f_2)(f_2,f_3)(f_3,f_1))-|(f_2,f_3)|^2\|f_1\|^2-|(f_3,f_1)|^2\|f_2\|^2\\&\qquad+\|f_1\|^2\|f_2\|^2\|f_3\|^2-|(f_1,f_2)|^2\|f_3\|^2]\\&=G_2[\|f_1\|^2\|f_2\|^2\|f_3\|^2-\|f_1\|^2|(f_2,f_3)|^2\\&\qquad-|(f_1,f_2)|^2\|f_3\|^2+(f_2,f_1)(f_3,f_2)(f_1,f_3)\\&\qquad-|(f_1,f_3)|^2\|f_2\|^2+(f_1,f_2)(f_2,f_3)(f_3,f_1)]\\&=G_2[(f_1,f_1)((f_2,f_2)(f_3,f_3)-(f_3,f_2)(f_2,f_3))\\&\qquad-(f_2,f_1)((f_1,f_2)(f_3,f_3)-(f_3,f_2)(f_1,f_3))\\&\qquad+(f_3,f_1)((f_1,f_2)(f_2,f_3)-(f_1,f_3)(f_2,f_2))]\\&=G_2\begin{vmatrix}(f_1,f_1)&(f_1,f_2)&(f_1,f_3)\\(f_2,f_1)&(f_2,f_2)&(f_2,f_3)\\(f_3,f_1)&(f_3,f_2)&(f_3,f_3)\end{vmatrix}\equiv G_2G_3\end{aligned}$$

となる。e_2 の記法に倣い

$$A_3f_3+A_2f_2+A_1f_1=\begin{vmatrix}(f_1,f_1)&(f_2,f_1)&(f_3,f_1)\\(f_1,f_2)&(f_2,f_2)&(f_3,f_2)\\f_1&f_2&f_3\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}(f_1,f_1)&(f_1,f_2)&f_1\\(f_2,f_1)&(f_2,f_2)&f_2\\(f_3,f_1)&(f_3,f_2)&f_3\end{vmatrix}$$

とすれば

$$e_3 = \frac{1}{\sqrt{G_2G_3}} \begin{vmatrix} (f_1,f_1) & (f_2,f_1) & (f_3,f_1) \\ (f_1,f_2) & (f_2,f_2) & (f_3,f_2) \\ f_1 & f_2 & f_3 \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{G_2G_3}} \begin{vmatrix} (f_1,f_1) & (f_1,f_2) & f_1 \\ (f_2,f_1) & (f_2,f_2) & f_2 \\ (f_3,f_1) & (f_3,f_2) & f_3 \end{vmatrix}$$

なる表現を得る。

上に見た様にグラム・シュミットの直交化法にはグラム行列が自然に現れる。実際、次が成立つ。

定理 1.(グラム・シュミットの直交化法の直接表示) X を内積を持つ複素ベクトル空間、$\{f_j; 1 \leq j \leq n\}$ を一次独立系とする。

(1) G_j 及び $|G_j|$ を夫々$\{f_\ell; 1 \leq \ell \leq j\}$ に付随するグラム行列及びグラム行列式とする。即ち

$$G_j = \begin{bmatrix} (f_1,f_1) & (f_1,f_2) & \cdots & (f_1,f_j) \\ (f_2,f_1) & (f_2,f_2) & \cdots & (f_2,f_j) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (f_j,f_1) & (f_j,f_2) & \cdots & (f_j,f_j) \end{bmatrix}, \quad |G_j| = \begin{vmatrix} (f_1,f_1) & (f_1,f_2) & \cdots & (f_1,f_j) \\ (f_2,f_1) & (f_2,f_2) & \cdots & (f_2,f_j) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (f_j,f_1) & (f_j,f_2) & \cdots & (f_j,f_j) \end{vmatrix}$$

とする。このとき $|G_j|$ は正の実数となる。

(2) $1 \leq j \leq n$ なる任意の j に対し

$$\begin{aligned} e_j &= \frac{1}{\sqrt{|G_{j-1}||G_j|}} \sum_{i=1}^{j} \Delta_{ij} f_i \\ &= \frac{1}{\sqrt{|G_{j-1}||G_j|}} \begin{vmatrix} (f_1,f_1) & (f_1,f_2) & \cdots & (f_1,f_{j-1}) & f_1 \\ (f_2,f_1) & (f_2,f_2) & \cdots & (f_2,f_{j-1}) & f_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ (f_j,f_1) & (f_j,f_2) & \cdots & (f_j,f_{j-1}) & f_j \end{vmatrix} \end{aligned}$$

と定める。但し $|G_{-1}| = |G_0| = |G_1| = 1,\ \Delta_{ij}$ は G_n の (i,j) 成分に関する余因子とする。即ち

$$\Delta_{ij} = (-1)^{i+j} \begin{array}{cc} \hat{j} & \\ \left|\begin{array}{cc|cc} (f_1,f_1) & \cdots & \cdots & (f_1,f_n) \\ \vdots & & & \vdots \\ \hline \vdots & & & \vdots \\ (f_n,f_1) & \cdots & \cdots & (f_n,f_n) \end{array}\right| & \hat{i} \end{array} \qquad n \geq 2,$$

$$\Delta_{11} = 1 \qquad n = 1$$

このとき $\{e_j; 1 \leq j \leq n\}$ は正規直交系を成す。

(3) (2) で定めた正規直交系とグラム・シュミットの直交化法による正規直交系は同じものである。特に (2) の e_j と定理 1 の e_j は全ての j に対し一致する。

注. X は複素ベクトル空間としているので G_j の各成分は複素数であり G_j は対称行列ではない。

(証明) $\{f_j; 1 \leq j \leq n\}$ の一次独立性より $1 \leq j \leq n$ なる任意の j に対し $\det G_j \neq 0$ である。$\overline{(f_i, f_j)} = (f_j, f_i)$ より $\overline{\det G_j} = \det {}^t G_j = \det G_j$ となるから $\det G_j$ は実数である。$1 \leq j \leq n$ なる任意の j に対し

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{i=1}^{j} \Delta_{ij} f_i \right\|^2 &= \sum_{i=1}^{j} \sum_{k=1}^{j} \Delta_{ij} \overline{\Delta_{kj}} (f_i, f_k) \\ &= \sum_{i=1}^{j} \Delta_{ij} \overline{\left(\sum_{k=1}^{j} \Delta_{kj} (f_k, f_i) \right)} \\ &= \sum_{i=1}^{j} \Delta_{ij} \overline{(\delta_{ij} \det G_j)} \\ &= \Delta_{jj} \det G_j = \det G_{j-1} \det G_j \end{aligned}$$

が成立つ。よって $\det G_{j-1} \det G_j > 0$ であり $\det G_{-1} = \det G_0 = \det G_1 = 1$ より任意の j に対し $\det G_j > 0$ が従う。以下 $|G_j| = \det G_j$ と表す事にする。$1 \leq i < j \leq n$ なる任意の i, j

に対し $(e_i, e_j) = 0$ なる事は

$$\begin{aligned}
\left(\sum_{k=1}^{i} \Delta_{ki} f_k, \sum_{\ell=1}^{j} \Delta_{\ell j} f_\ell\right) &= \sum_{k=1}^{i} \sum_{\ell=1}^{j} \Delta_{ki} \overline{\Delta_{\ell j}} (f_k, f_\ell) \\
&= \sum_{k=1}^{i} \Delta_{ki} \overline{\left(\sum_{\ell=1}^{j} \Delta_{\ell j} (f_\ell, f_k)\right)} \\
&= \sum_{k=1}^{i} \Delta_{ki} (\delta_{jk} |G_j|) = 0
\end{aligned}$$

より従う。ここに $1 \le k \le i < j$ なる関係を用いた。また $\|e_j\| = 1$ なる事は e_j の定義及び前の計算から従う。以上より (1) 及び (2) は証明された。(3) は定理 2 及び両者の e_j の $\{f_k; 1 \le k \le j\}$ による一次結合の f_j の係数が

$$\frac{1}{\sqrt{|G_{j-1}||G_j|}} \Delta_{jj} = \sqrt{\frac{|G_{j-1}|}{|G_j|}}, \quad \frac{1}{\left\| f_j - \sum_{k=1}^{j-1} (f_j, e_k) e_k \right\|}$$

と共に正である事から従う。

参考文献： 佐武一郎、線型代数学、裳華房
クーラン・ヒルベルト、数理物理学の方法、東京図書
H. ホクシュタット、特殊関数、培風館
坂内英一、坂内悦子、球面上の代数的組合せ理論、シュプリンガー・フェアラーク東京