行列式による複素ベクトルの直交化〜Schmidtの直交化法よりエレガント

複素計量線型空間の線型独立なベクトル$\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_n$について$a_{ij}=(\boldsymbol{a}_j,\ \boldsymbol{a}_i)=\overline{(\boldsymbol{a}_i,\ \boldsymbol{a}_j)}=\overline{a_{ji}}$ (Hermite内積) とします. $k=2,\ \cdots,\ n;\ i=1,\ \cdots,\ k;\ j=1,\ \cdots,\ k$について行列式$H_k=|a_{ij}|$ (Gramの行列式の首座行列式) の第k行を$\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_k$で置き換えた行列式 ($\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_k$の線型結合になる) $\boldsymbol{a}'_k$は零ベクトルではなく, $\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}'_2,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}'_n$はたがいに直交します. (a_{ij})はHermite行列ですからH_kは実数で, $H_1=a_{11}$として, $||\boldsymbol{a}'_k||^2=H_{k-1}H_k$となります.

例 1. $\boldsymbol{a}_1=(1,\ i,\ 0),\ \boldsymbol{a}_2=(1+i,\ -1,\ 0),\ \boldsymbol{a}_3=(1,\ i,\ i)$.
$a_{11}=\boldsymbol{a}_1{}^t\overline{\boldsymbol{a}_1}=2,\ a_{12}=\boldsymbol{a}_2{}^t\overline{\boldsymbol{a}_1}=1+2i=\overline{a_{21}},\ a_{13}=2,\ a_{22}=3,\ a_{23}=1-2i$より,

$$\boldsymbol{a}'_2=\begin{vmatrix}a_{11}&a_{12}\\ \boldsymbol{a}_1&\boldsymbol{a}_2\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}2&1+2i\\ \boldsymbol{a}_1&\boldsymbol{a}_2\end{vmatrix}=-(1+2i)\boldsymbol{a}_1+2\boldsymbol{a}_2=(1,\ -i,\ 0),$$
$$\boldsymbol{a}'_3=\begin{vmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}\\ a_{21}&a_{22}&a_{23}\\ \boldsymbol{a}_1&\boldsymbol{a}_2&\boldsymbol{a}_3\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}2&1+2i&2\\ 1-2i&3&1-2i\\ \boldsymbol{a}_1&\boldsymbol{a}_2&\boldsymbol{a}_3\end{vmatrix}=-\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_3=(0,\ 0,\ i)$$

ですから, 正規直交基底は

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(1,\ i,\ 0),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(1,\ -i,\ 0),\ (0,\ 0,\ i).$$

$\boldsymbol{a}'_2$は$\boldsymbol{a}_1$と$\boldsymbol{a}_2$の線型結合ですから,

$$(\boldsymbol{a}'_2,\ \boldsymbol{a}_1)^\dagger=\begin{vmatrix}a_{11}&a_{12}\\ (\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_1)&(\boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_1)\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}a_{11}&a_{12}\\ a_{11}&a_{12}\end{vmatrix}=0,\quad (\boldsymbol{a}'_2,\ \boldsymbol{a}_2)^\dagger=\begin{vmatrix}a_{11}&a_{12}\\ a_{21}&a_{22}\end{vmatrix}=H_2$$

となります. $H_2=0$とすると${}^t(a_{11},\ a_{21})$と${}^t(a_{12},\ a_{22})$は線型従属で, $c_1a_{11}+c_2a_{12}=0,\ c_1a_{21}+c_2a_{22}=0$となる複素数の組$(c_1,\ c_2)\neq(0,\ 0)$があります. このとき,

$$\begin{aligned}||c_1\boldsymbol{a}_1+c_2\boldsymbol{a}_2||^2&=(c_1\boldsymbol{a}_1,\ c_1\boldsymbol{a}_1)+(c_2\boldsymbol{a}_2,\ c_1\boldsymbol{a}_1)+(c_1\boldsymbol{a}_1,\ c_2\boldsymbol{a}_2)+(c_2\boldsymbol{a}_2,\ c_2\boldsymbol{a}_2)\\ &=c_1\bar{c}_1a_{11}+c_2\bar{c}_1a_{12}+c_1\bar{c}_2a_{21}+c_2\bar{c}_2a_{22}=\bar{c}_1\cdot 0+\bar{c}_2\cdot 0=0\end{aligned}$$

より$c_1\boldsymbol{a}_1+c_2\boldsymbol{a}_2=\boldsymbol{o}$, $(c_1,\ c_2)\neq(0,\ 0)$, すなわち$H_2=0\Longrightarrow\boldsymbol{a}_1$と$\boldsymbol{a}_2$は線型従属となって, この対偶より一般に$\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_k$が線型独立$\Longrightarrow(\boldsymbol{a}'_k,\ \boldsymbol{a}_k)=H_k\neq 0\Longrightarrow\boldsymbol{a}'_k\neq\boldsymbol{o}$.

$(\boldsymbol{a}'_2,\ \boldsymbol{a}_1)=0$より$\boldsymbol{a}'_2$は$\boldsymbol{a}_1$と直交します (ともに零ベクトルではない). 同様に$\boldsymbol{a}'_3$は$\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2$と直交し, $\boldsymbol{a}'_2$は$\boldsymbol{a}_1$と$\boldsymbol{a}_2$の線型結合ですから, $\boldsymbol{a}'_3$は$\boldsymbol{a}'_2$と直交し, 一般に$\boldsymbol{a}'_k$は$\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_{k-1},\ \boldsymbol{a}'_2,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}'_{k-1}$と直交します.

$\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2$が$\boldsymbol{a}'_3$と直交することと, $(\boldsymbol{a}_3,\ \boldsymbol{a}'_3)=\overline{(\boldsymbol{a}'_3,\ \boldsymbol{a}_3)}=\overline{H_3}=H_3$ (実数) を用いると,

$$(\boldsymbol{a}'_3,\ \boldsymbol{a}'_3)=\begin{vmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}\\ a_{21}&a_{22}&a_{23}\\ (\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}'_3)&(\boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}'_3)&(\boldsymbol{a}_3,\ \boldsymbol{a}'_3)\end{vmatrix}^{\dagger\dagger}=\begin{vmatrix}a_{11}&a_{12}\\ a_{21}&a_{22}\end{vmatrix}(\boldsymbol{a}_3,\ \boldsymbol{a}'_3)=H_2H_3$$

となり, 一般に$||\boldsymbol{a}'_k||^2=H_{k-1}H_k$となります. $\boldsymbol{a}'_k$は$\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_k$の線型結合で表わされていますので, すべての$\boldsymbol{a}_i$を$a_{ki}$で置き換えれば$H_k$になります. 例では$H_1=a_{11}=2,\ H_2=-(1+2i)a_{21}+2a_{22}=1,$ $H_3=-a_{31}+a_{33}=1$より, $||\boldsymbol{a}'_2||=\sqrt{H_1H_2}=\sqrt{2}$, $||\boldsymbol{a}'_3||=\sqrt{H_2H_3}=1$.

例 2. $\boldsymbol{a}_1=(1,\ 1,\ -1,\ -1),\ \boldsymbol{a}_2=(3,\ 2,\ 1,\ -2),\ \boldsymbol{a}_3=(0,\ 1,\ -4,\ -1),\ \boldsymbol{a}_4=(1,\ 2,\ 3,\ -2)$.

$$\boldsymbol{a}'_2=\begin{vmatrix}4&6\\ \boldsymbol{a}_1&\boldsymbol{a}_2\end{vmatrix}=-6\boldsymbol{a}_1+4\boldsymbol{a}_2=(6,\ 2,\ 10,\ -2)\to\frac{1}{6}(3,\ 1,\ 5,\ -1),$$
$$\boldsymbol{a}'_3=\begin{vmatrix}4&6&6\\ 6&18&0\\ \boldsymbol{a}_1&\boldsymbol{a}_2&\boldsymbol{a}_3\end{vmatrix}=36(-3\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3)=\boldsymbol{o},$$

ここで $\boldsymbol{a}_3' = \boldsymbol{o}$ となるのは $\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_3$ が線型独立ではない $(\boldsymbol{a}_3 = 3\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2)$ からで, 代わりに $\boldsymbol{a}_4$ を使って

$$\boldsymbol{a}_4' = \begin{vmatrix} 4 & 6 & 2 \\ 6 & 18 & 14 \\ \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{a}_4 \end{vmatrix} = 4(12\boldsymbol{a}_1 - 11\boldsymbol{a}_2 + 9\boldsymbol{a}_4) = 4(-12,\ 8,\ 4,\ -8) \to \frac{\sqrt{2}}{6}(3,\ -2,\ -1,\ 2).$$

$\boldsymbol{a}_3 = 3\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2$ より $a_{i3} = 3a_{i1} - a_{i2}\ (i = 1,\ 2,\ 3)$ ですから H_3 の列ベクトルが線型従属となって $H_3 = 0$, すなわち $\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_3$ が線型従属 $\Longrightarrow H_3 = 0$. この対偶より一般に, 例 1. に続く段落の結果と合わせて, $|{}^t\overline{H_n}| = |H_n|$ に注意すると, $|(\boldsymbol{a}_i,\ \boldsymbol{a}_j)| \neq 0 \Longleftrightarrow \boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_n$ が線型独立.

例 3. $\boldsymbol{V} = \{a + bx + cx^2\}$ (2 次以下の多項式すべての集合) の基底 $e_1 = 1$, $e_2 = x$, $e_3 = x^2$ から内積

$$(f,\ g) = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)\,dx$$

について正規直交基底を求めてみます.

$$e_{11} = \int_{-1}^{1} e_1^2\,dx = 2,\ e_{12} = \int_{-1}^{1} e_1e_2\,dx = 0,\ e_{13} = \frac{2}{3},\ e_{22} = \frac{2}{3},\ e_{23} = 0,\ e_{33} = \frac{2}{5}$$

ですから, 直交基底は e_1 と

$$e_2' = \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ e_1 & e_2 \end{vmatrix} = 2x,$$

$$e_3' = \begin{vmatrix} 2 & 0 & 2/3 \\ 0 & 2/3 & 0 \\ e_1 & e_2 & e_3 \end{vmatrix} = \frac{4}{9}(3x^2 - 1)$$

となって,

$$H_1 = e_{11} = 2,\ H_2 = 2e_{22} = \frac{4}{3},\ H_3 = \frac{4}{9}(3e_{33} - e_{31}) = \frac{4}{9} \cdot \frac{8}{15},$$

$$||e_2'||^2 = 2 \cdot \frac{4}{3} = \frac{8}{3},\ ||e_3'||^2 = \frac{4}{3} \cdot \frac{4}{9} \cdot \frac{8}{15} = \frac{8^2 \cdot 2}{9^2 \cdot 5}$$

より, 正規直交基底は

$$\frac{e_1}{\sqrt{e_{11}}} = \frac{\sqrt{2}}{2},\ \frac{2x}{\sqrt{8/3}} = \frac{\sqrt{6}}{2}\,x,\ \frac{9\sqrt{5}}{8\sqrt{2}} \cdot \frac{4}{9}\,(3x^2 - 1) = \frac{\sqrt{10}}{4}\,(3x^2 - 1).$$

なお, Schmidt の直交化法では, e_{11} の積分と $f_1 = e_1/\sqrt{e_{11}} = 1/\sqrt{2}$ に続けて,

$$f_2' = e_2 - \int_{-1}^{1} e_2 f_1\,dx \cdot f_1 = x - \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} x\,dx = x,\ ||f_2'||^2 = \int_{-1}^{1} {f_2'}^2\,dx = \frac{2}{3},$$

$$f_2 = \frac{f_2'}{||f_2'||} = \frac{\sqrt{6}}{2}\,x,$$

$$f_3' = e_3 - \int_{-1}^{1} e_3 f_1\,dx \cdot f_1 - \int_{-1}^{1} e_3 f_2\,dx \cdot f_2 = x^2 - \frac{1}{3},\ ||f_3'||^2 = \int_{-1}^{1} \left(x^4 - \frac{2}{3}x^2 + \frac{1}{9}\right) dx = \frac{8}{45},$$

$$f_3 = \frac{f_3'}{||f_3'||} = \frac{\sqrt{10}}{4}\,(3x^2 - 1)$$

となります. 行列式による直交化はずっとエレガントでしょう！

---

† $(\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2') = \overline{(\boldsymbol{a}_2',\ \boldsymbol{a}_1)} = 0,\ (\boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_2') = \overline{(\boldsymbol{a}_2',\ \boldsymbol{a}_2)} = H_2$ (実数) ですが, $(\boldsymbol{x},\ c\,\boldsymbol{y}) = \overline{c}\,(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})$ に留意すると,

$$(\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2') = \begin{vmatrix} \overline{a_{11}} & \overline{a_{12}} \\ (\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_1) & (\boldsymbol{a}_1,\ \boldsymbol{a}_2) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{11} & a_{21} \end{vmatrix} = 0, \quad (\boldsymbol{a}_2,\ \boldsymbol{a}_2') = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = H_2.$$

†† 第 3 行の内積の順序を入れ替えると, すべての a_{ij} は複素共役になります.