正規直交基底

n 項数ベクトル $\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ に対し，

$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = a_1 b_1 + \cdots + a_n b_n \ (= {}^t\boldsymbol{a}\boldsymbol{b})$$

と定義し，これを $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の**内積**とよぶ．

幾何ベクトルと同様の性質（p.14, 命題 1.37）が成り立つ．つまり，我々は $n = 2, 3$ の場合には，次の命題 1, 2 は既に知っている．

平面ベクトルや空間ベクトルの内積をそのまま一般化しただけのことである．
証明は，$n = 2, 3$ でも一般の n でも同様なので，省略する．

命題 1. (1) $(\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}) \cdot \boldsymbol{c} = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{c} + \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{c}$

(2) $(k\boldsymbol{a}) \cdot \boldsymbol{b} = k(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b})$

(3) $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{a}$

(4) $\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a} \geq 0, \quad \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a} = 0 \iff \boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}$

$\sqrt{\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a}}$ を $\boldsymbol{a}$ の**長さ**とよび，$|\boldsymbol{a}|$ で表す．$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = 0$ であるとき，$\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ は**直交**するといい，$\boldsymbol{a} \perp \boldsymbol{b}$ と表す．

命題 2. (1) $|\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}| \leq |\boldsymbol{a}||\boldsymbol{b}|$, 等号成立条件は $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ が 1 次従属なことである．

(2) $|\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}| \leq |\boldsymbol{a}| + |\boldsymbol{b}|$.

(1) は**コーシー・シュワルツの不等式**とよばれる．

(証明). (1) $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}$ のとき，示すべき不等式は両辺がともに 0 であるから，明らかに正しい．また，等号成立条件も満たされている．

以下，$\boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{0}$ とする．

$$0 \leq |t\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}|^2 = t^2|\boldsymbol{a}|^2 + 2t\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} + |\boldsymbol{b}|^2 \tag{1.1}$$

が成り立つが，これは t に関して常に成り立つ不等式だから，t の 2 次式として判別式が 0 以下でなければならない．すなわち，$(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b})^2 - |\boldsymbol{a}|^2|\boldsymbol{b}|^2 \leq 0$. よって主張の不等式が示された．$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ が 1 次従属なとき，等号が成立することは簡単に確かめられる．逆に (1) において等号が成り立つならば，(1.1) で等号を成立させる実数 t がただ 1 つ存在する．その値を t_0 とすれば $0 = |t_0\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}|^2$ ゆえ $t_0\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$. これは $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ が 1 次従属であることを意味する．

(2) $|\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}|^2 \leq (|\boldsymbol{a}|+|\boldsymbol{b}|)^2$ を示せばよい．(1) より $(|\boldsymbol{a}|+|\boldsymbol{b}|)^2 - |\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}|^2 = 2|\boldsymbol{a}||\boldsymbol{b}| - 2\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} \geq 0$ だから (2) も正しいと言える． □

問 3. $\boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{b} + \boldsymbol{c}) = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} + \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{c}$ や $\boldsymbol{a} \cdot (k\boldsymbol{b}) = k(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b})$ であることも確認せよ．

命題 4. $\boldsymbol{0}$ を含まない $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m \in \mathbb{R}^n$ が互いに直交するならば，それらは 1 次独立である．

(証明). 1 次関係 $c_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c_m\boldsymbol{a}_m = \boldsymbol{0}$ を考える．両辺に対して，$\boldsymbol{a}_j$ との内積をとった式 $(c_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c_m\boldsymbol{a}_m) \cdot \boldsymbol{a}_j = \boldsymbol{0} \cdot \boldsymbol{a}_j$ より

$$0 + \cdots + 0 + c_j|\boldsymbol{a}_j|^2 + 0 + \cdots + 0 = 0 \text{ ゆえ } c_j = 0$$

を得る．j は任意だから，$c_1 = \cdots = c_m = 0$ ということである． □

$\mathbb{R}^n$ のベクトル $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m$ は，各々が長さ 1 で互いに直交するとき，すなわち，

$$\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{a}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j \text{ のとき}) \\ 0 & (i \neq j \text{ のとき}) \end{cases}$$

が成り立つとき，**正規直交系**とよばれる．

δ_{ij} は**クロネッカーのデルタ**とよばれる便利な記号である．

命題 5 (**シュミットの直交化法**)**.** 1 次独立なベクトル $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m \in \mathbb{R}^n$ が与えられたとき，次の手順で正規直交系 $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_m \in \mathbb{R}^n$ を構成することができる．

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{b}_1 &= \frac{\boldsymbol{a}_1}{|\boldsymbol{a}_1|}. \\
\boldsymbol{b}'_2 &= \boldsymbol{a}_2 - (\boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{b}_1)\boldsymbol{b}_1, \quad \boldsymbol{b}_2 = \frac{\boldsymbol{b}'_2}{|\boldsymbol{b}'_2|}. \\
\boldsymbol{b}'_3 &= \boldsymbol{a}_3 - (\boldsymbol{a}_3 \cdot \boldsymbol{b}_1)\boldsymbol{b}_1 - (\boldsymbol{a}_3 \cdot \boldsymbol{b}_2)\boldsymbol{b}_2, \quad \boldsymbol{b}_3 = \frac{\boldsymbol{b}'_3}{|\boldsymbol{b}'_3|}. \\
&\ \vdots \\
\boldsymbol{b}'_m &= \boldsymbol{a}_m - \sum_{j=1}^{m-1} (\boldsymbol{a}_m \cdot \boldsymbol{b}_j)\boldsymbol{b}_j, \quad \boldsymbol{b}_m = \frac{\boldsymbol{b}'_m}{|\boldsymbol{b}'_m|}.
\end{aligned}$$

そしてこのとき，

$$\mathrm{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m\} = \mathrm{Span}\{\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_m\}$$

が成り立つ．

(証明). $m = 1$ のときは自明である．$m \geq 2$ の場合について帰納法で証明する．

$m = 2$ のとき，上記の $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2$ が $\boldsymbol{b}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = \delta_{ij}$ を満たすこと，および $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2\} = \mathrm{Span}\{\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2\}$ は直接確かめられる．(読者に任せる．)

自然数 $m-1$ で主張は正しいとして，m のときを考える．このとき，$\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_{m-1}, \boldsymbol{a}_m$ の $\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_{m-1}$ の部分に対しては，上記手順で正規直交系 $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_{m-1}$ を作ることができる．その上で，上記の $\boldsymbol{b}'_m$ は，$i = 1, \ldots, m-1$ に対して

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{b}'_m \cdot \boldsymbol{b}_i &= \left(\boldsymbol{a}_m - \sum_{j=1}^{m-1} (\boldsymbol{a}_m \cdot \boldsymbol{b}_j)\boldsymbol{b}_j \right) \cdot \boldsymbol{b}_i \\
&= \boldsymbol{a}_m \cdot \boldsymbol{b}_i - \sum_{j=1}^{m-1} (\boldsymbol{a}_m \cdot \boldsymbol{b}_j)\delta_{ji} = \boldsymbol{a}_m \cdot \boldsymbol{b}_i - \boldsymbol{a}_m \cdot \boldsymbol{b}_i = 0
\end{aligned}$$

を満たす．つまり，$\boldsymbol{b}'_m \perp \boldsymbol{b}_i$ である．同時に，$\boldsymbol{b}'_m \neq \boldsymbol{0}$ である．(なぜなら，仮に $\boldsymbol{b}'_m = \boldsymbol{0}$ であったとすると，$\boldsymbol{a}_m, \boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_{m-1}$ が非自明な 1 次関係をもつこととなるが，帰納法の仮定 $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_{m-1}\} = \mathrm{Span}\{\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_{m-1}\}$ より，$\boldsymbol{a}_m, \boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_{m-1}$ も非自明な 1 次関係をもつこととなり矛盾である．) 従って，$\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_{m-1}$ に $\boldsymbol{b}_m = \boldsymbol{b}'_m / |\boldsymbol{b}'_m|$ を加えたベクトルの集まりは，m 個のベクトルからなる正規直交系をなす．また，$\boldsymbol{b}_m$ の構成法より，$\boldsymbol{b}_m \in \mathrm{Span}\{\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_{m-1}, \boldsymbol{a}_m\} = \mathrm{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_{m-1}, \boldsymbol{a}_m\}$ であるから，$\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_m$ は $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m\}$ に属する m 個の 1 次独立なベクトルとなる．ゆえに $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m\} = \mathrm{Span}\{\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_m\}$ を得る． □

定義 6. 正規直交系である基底は**正規直交基底**とよばれる．

例えば，$\mathbb{R}^n$ の標準基底 $\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n$ は正規直交基底である．

例 7. 1 次独立なベクトル $\boldsymbol{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ から，シュミットの直交化法で $\mathbb{R}^3$ の正規直交基底 $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ を構成してみよう．

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

$$\boldsymbol{b}_2' = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{2}{\sqrt{5}} \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}_2 = \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix}.$$

$$\boldsymbol{b}_3' = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - 0\boldsymbol{b}_1 - \frac{5}{\sqrt{30}} \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}_3 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

定義 8. 内積を保つ線形変換 $f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ を**直交変換**とよぶ．ここで「内積を保つ」とは，任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対し，$f(\boldsymbol{x}) \cdot f(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}$ が成り立つことを意味する．

命題 9. $\mathbb{R}^n$ の線形変換 $f(\boldsymbol{x}) = A\boldsymbol{x}$ が直交変換であるための必要十分条件は，行列 A が ${}^tAA = I_n$ を満たすことである．

(証明). 内積 $\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}$ は ${}^t\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}$ とも記述できるから，内積を保つという条件は ${}^t(A\boldsymbol{x})A\boldsymbol{y} = {}^t\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}$, すなわち ${}^t\boldsymbol{x}\,{}^tAA\boldsymbol{y} = {}^t\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}$ が任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ について成り立つことと述べられる．実際そのためには，${}^tAA = I_n$ でなければならない． □

${}^tAA = I_n$ を満たす行列 A は**直交行列**とよばれる．その定義より，直交行列は正則であり，直交行列の逆行列は転置行列で与えられることが直ちに従う．

問 10. 直交行列の行列式は 1 か -1 であることを示せ．

問 11. A を n 次正方行列とし，A の縦ベクトルによる分割を $A = (\boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_n)$ とする．このとき，A が直交行列であるためには，$\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ が $\mathbb{R}^n$ の正規直交基底であることが必要十分である．これを示せ．

問 12. 2 次の直交行列は，ある $\theta \in \mathbb{R}$ を用いて

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \text{ または } \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

と与えられることを示せ．

W が $\mathbb{R}^n$ の線形部分空間であるとき，W に属する任意のベクトルに直交するベクトルをすべて集めた集合を $W^\perp$ と記す．すなわち，

$$W^\perp = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \mid \text{すべての } \boldsymbol{a} \in W \text{ に対し } \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x} = 0\}$$

とする．$W^\perp$ は $\mathbb{R}^n$ の線形部分空間である．（確かめよ．）$W^\perp$ は $\mathbb{R}^n$ の**直交補空間**とよばれる．今，$\dim W = m$ であり，$\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_m$ が W の基底であるとしよう．このとき，

$$W^\perp = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n \mid \boldsymbol{a}_j \cdot \boldsymbol{x} = 0 \ (j = 1, \ldots, m)\}$$

と記述することができる．このことより，$W^\perp$ は，同次連立 1 次方程式

$$\begin{pmatrix} {}^t\boldsymbol{a}_1 \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{a}_m \end{pmatrix} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

の解空間であるとの解釈も可能である．従って，その次元は

$$n - \operatorname{rank} \begin{pmatrix} {}^t\boldsymbol{a}_1 \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{a}_m \end{pmatrix} = n - \operatorname{rank} (\boldsymbol{a}_1 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_m) = n - m$$

である．（定理 5.56, Web「行および列基本変形による階数の理解」の定理 23, 定理 5.17 参照．）すなわち，

$$\dim W^\perp = \dim \mathbb{R}^n - \dim W \tag{1.2}$$

を得る．