§11. 正規直交基底

以下ではベクトル空間は有限次元であるとする.
内積空間に対しては正規直交基底という特別な基底を考えることができる.

定義 $\{u_1, u_2, u_3, \ldots, u_n\}$ を内積空間 V の基底とする. 任意の $i, j = 1, 2, 3, \ldots, n$ に対して

$$\langle u_i, u_j \rangle = \begin{cases} 1 & (i = j), \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

がなりたつとき, $\{u_1, u_2, u_3, \ldots, u_n\}$ を V の正規直交基底という.

なお, 上の式は Kronecker の δ を用いると,

$$\langle u_i, u_j \rangle = \delta_{ij}$$

と表すことができる.

例 $\mathbf{R}^n$ の標準基底は標準内積に関して正規直交基底となる.

正規直交基底の定義より, 直ちに次がなりたつ.

命題 $\{u_1, u_2, u_3, \ldots, u_n\}$ を内積空間 V の正規直交基底とし, $x, y \in V$ とする. 正規直交基底 $\{u_1, u_2, u_3, \ldots, u_n\}$ に関する x, y の成分をそれぞれ $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n$ および $y_1, y_2, y_3, \ldots, y_n$ とすると,

$$\langle x, y \rangle = x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3 + \cdots + x_n y_n.$$

内積空間の基底があたえられると, 次のようにして正規直交基底を構成することができる.

Gram-Schmidt の直交化法 $\{u_1, u_2, \ldots, u_n\}$ を内積空間 V の基底とする. $v_1, v_2, \ldots, v_n \in V$ を

$$\begin{aligned}
v_1 &= \frac{1}{\|u_1\|} u_1, \\
v_2' &= u_2 - \langle u_2, v_1 \rangle v_1, \\
v_2 &= \frac{1}{\|v_2'\|} v_2', \\
&\ \vdots \\
v_m' &= u_m - \langle u_m, v_1 \rangle v_1 - \langle u_m, v_2 \rangle v_2 - \cdots - \langle u_m, v_{m-1} \rangle v_{m-1}, \\
v_m &= \frac{1}{\|v_m'\|} v_m', \\
&\ \vdots \\
v_n' &= u_n - \langle u_n, v_1 \rangle v_1 - \langle u_n, v_2 \rangle v_2 - \cdots - \langle u_n, v_{n-1} \rangle v_{n-1}, \\
v_n &= \frac{1}{\|v_n'\|} v_n'
\end{aligned}$$

により定めると, $\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ は V の正規直交基底で, 任意の $m = 1, 2, \ldots, n$ に対して

$$\langle v_1, v_2, \ldots, v_m \rangle_{\mathbf{R}} = \langle u_1, u_2, \ldots, u_m \rangle_{\mathbf{R}}$$

がなりたつ.

上の $v_1, v_2, \dots, v_n$ の定め方に見られるような, ベクトルをその長さで割って, 長さが 1 のベクトルを得る操作を正規化という.

例 $\mathbf{R}^2$ の基底 $\{u_1, u_2\}$ を

$$u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},\ u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

により定める. $\mathbf{R}^2$ の標準内積を考え, Gram-Schmidt の直交化法を用いて, 基底 $\{u_1, u_2\}$ から正規直交基底 $\{v_1, v_2\}$ を求めてみよう.
まず,

$$\begin{aligned} v_1 &= \frac{1}{\|u_1\|}u_1 \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

次に,

$$\begin{aligned} v_2' &= u_2 - \langle u_2, v_1 \rangle v_1 \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

よって,

$$\begin{aligned} v_2 &= \frac{1}{\|v_2'\|}v_2' \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

内積空間に対しては直交変換という特別な線形変換を考えることができる. これは次のように定義される内積を保つ線形変換である.

定義 f を内積空間 V の線形変換とする. 任意の $u, v \in V$ に対して

$$\langle f(u), f(v) \rangle = \langle u, v \rangle$$

がなりたつとき, f を直交変換という.

次は直交変換に関する重要な事実である.

定理 f を内積空間 V の線形変換, $\{u_1, u_2, u_3, \dots, u_n\}$ を V の正規直交基底とする. このとき, 次の (1)〜(4) は同値.

(1) f は直交変換.

(2) $\{f(u_1), f(u_2), f(u_3), \dots, f(u_n)\}$ は V の正規直交基底.

(3) 任意の $u \in V$ に対して $\|f(u)\| = \|u\|$.

(4) A を正規直交基底 $\{u_1, u_2, u_3, \dots, u_n\}$ に関する f の表現行列とすると, ${}^tAA = E$. ただし, E は n 次の単位行列.

証明　(1)⇒(2) のみ示す.
$i, j = 1, 2, 3, \ldots, n$ とすると, 仮定より,

$$\begin{aligned}\langle f(u_i), f(u_j)\rangle &= \langle u_i, u_j\rangle \\ &= \delta_{ij}.\end{aligned}$$

$i = j$ のときを考えると,

$$f(u_i) \neq 0.$$

また, $i \neq j$ のときを考えると, $f(u_1), f(u_2), f(u_3), \ldots, f(u_n)$ は互いに直交する.
よって, $f(u_1), f(u_2), f(u_3), \ldots, f(u_n)$ は n 次元ベクトル空間 V の n 個の 1 次独立なベクトル.
したがって, $\{f(u_1), f(u_2), f(u_3), \ldots, f(u_n)\}$ は V の正規直交基底. □

上の定理に現れた ${}^tAA = E$ をみたす正方行列を直交行列という. 直交行列は

$${}^tAA = A{}^tA = E$$

をみたす正方行列と定義してもよい. また, 直交行列は正則で, 逆行列は転置行列に一致する.
更に, 直交行列の逆行列も直交行列である.
標準内積をもつ $\mathbf{R}^n$ に対しては次がなりたつ.

定理　n 次の正方行列 A に対して $\mathbf{R}^n$ の線形変換 f_A を

$$f_A(x) = Ax \quad (x \in \mathbf{R}^n)$$

により定め, $\mathbf{R}^n$ の標準内積を考える. このとき, 次の (1)〜(3) は同値.

(1) f_A は直交変換.
(2) A は直交行列.
(3) A の n 個の列ベクトルは $\mathbf{R}^n$ の正規直交基底.

証明　(1)⇒(2) のみ示す.
$e_1, e_2, e_3, \ldots, e_n$ を $\mathbf{R}^n$ の基本ベクトルとすると, 仮定より,

$$\begin{aligned}\delta_{ij} &= \langle e_i, e_j\rangle \\ &= \langle Ae_i, Ae_j\rangle \\ &= {}^t(Ae_i)(Ae_j) \\ &= {}^te_i{}^tAAe_j.\end{aligned}$$

ここで, ${}^te_i{}^tAAe_j$ は ${}^tAA$ の (i, j) 成分だから,

$${}^tAA = E.$$

すなわち, A は直交行列. □

なお, n 次の行ベクトル全体も $\mathbf{R}^n$ と同様に標準内積をもつ数ベクトル空間とみなすことができる. このとき, 上の (1)〜(3) は A の n 個の行ベクトルが正規直交基底をもつことと同値となる.

問題 11

1. $\mathbf{R}^3$ の基底 $\{u_1, u_2, u_3\}$ を

$$u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \ u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \ u_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

により定める. $\mathbf{R}^3$ の標準内積を考え, Gram-Schmidt の直交化法を用いて, 基底 $\{u_1, u_2, u_3\}$ から正規直交基底 $\{v_1, v_2, v_3\}$ を求めよ.

2. 2 次の直交行列は $0 \leq \theta < 2\pi$ をみたす θ を用いて,

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \mp\sin\theta \\ \sin\theta & \pm\cos\theta \end{pmatrix} \quad \text{(複号同順)}$$

と表されることを示せ.

3. A, B を n 次の直交行列とすると, AB も直交行列であることを示せ.

4. 直交行列の行列式は 1 か -1 であることを示せ.

問題 11 の解答

1. まず,

$$\begin{aligned} v_1 &= \frac{1}{\|u_1\|}u_1 \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

次に,

$$\begin{aligned} v_2' &= u_2 - \langle u_2, v_1 \rangle v_1 \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{3}\begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

よって,

$$\begin{aligned} v_2 &= \frac{1}{\|v_2'\|}v_2' \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

更に,

$$\begin{aligned} v_3' &= u_3 - \langle u_3, v_1 \rangle v_1 - \langle u_3, v_2 \rangle v_2 \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

したがって,

$$\begin{aligned} v_3 &= \frac{1}{\|v_3'\|}v_3' \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

2. 2 次の直交行列を

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

とおくと, 直交行列の定義より,

$$\begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

よって,

$$a^2 + c^2 = 1,\ ab + cd = 0,\ b^2 + d^2 = 1.$$

第 1 式と第 3 式より, $0 \leq \theta < 2\pi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$ をみたす θ, φ を用いて,

$$a = \cos\theta,\ c = \sin\theta,\ b = \sin\varphi,\ d = \cos\varphi$$

と表される.
第 2 式と加法公式より,

$$\sin(\theta + \varphi) = 0.$$

$0 \leq \theta + \varphi < 4\pi$ だから,

$$\theta + \varphi = 0, \pi, 2\pi, 3\pi.$$

したがって,

$$(\sin\varphi, \cos\varphi) = \begin{cases} (-\sin\theta, \cos\theta) & (\theta + \varphi = 0, 2\pi), \\ (\sin\theta, -\cos\theta) & (\theta + \varphi = \pi, 3\pi) \end{cases}$$

だから,

$$A = \begin{pmatrix} \cos\theta & \mp\sin\theta \\ \sin\theta & \pm\cos\theta \end{pmatrix} \quad (\text{複号同順}).$$

3. A, B は直交行列だから,

$$\begin{aligned} {}^t(AB)(AB) &= {}^tB{}^tAAB \\ &= {}^tBEB \\ &= {}^tBB \\ &= E. \end{aligned}$$

よって, AB も直交行列.

4. 直交行列の定義と行列式の性質より,

$$\begin{aligned} 1 &= |E| \\ &= |{}^tAA| \\ &= |{}^tA||A| \\ &= |A|^2. \end{aligned}$$

よって,

$$|A| = \pm 1.$$