4　ベクトルの直交化

ベクトル $\vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^3$ に対して、$\vec{a}$ を固定して、$\vec{b}$ を直交するよう、向きを変えます。正規直交化（normal orthogonarization）による**正規直交基底**の構成準備です。normal とはベクトルのノルムが 1 であることを意味します。この方法は、グラム・シュミット (Gram - Schmidt) の直交化法といいます。正規直交基底 (orthonormal basis) をベクトル列から作ることです。

２つの操作：

(i) $\vec{u}$ の **正規化** とは $\vec{e} = \dfrac{\vec{u}}{|\vec{u}|} \Leftrightarrow |\vec{e}| = 1,$

(ii) **射影** $\mathrm{Proj}_{\vec{u}}(\vec{a}) = \dfrac{(\vec{a}, \vec{u})}{(\vec{u}, \vec{u})}\vec{u} \in W$; $\vec{a}$ を $\vec{u}$ の張る空間 $W = \langle \vec{u} \rangle$ へ射影; (スカラー) $= \dfrac{(\vec{a}, \vec{u})}{(\vec{u}, \vec{u})},$

$$\mathrm{Proj}_{\vec{u}}(\vec{a}) \in \langle \vec{u} \rangle$$

2 ベクトルの直交化（内積がゼロ）$\Leftrightarrow (\vec{u}, \vec{v}) = \vec{u}.\vec{v} = 0$ になるようにすることが目的で、射影によって直交化し、ノルムを（大きさで割り）正規化します。つぎのように定め、$|\vec{u_1}| = |\vec{u_2}| = 1$ と $(\vec{u_1}, \vec{u_2}) = 0$ が得られます。

$$\begin{aligned} \vec{u_1} &= \frac{\vec{a}}{|\vec{a}|}, & \vec{e_1} &= \vec{u_1} & &(\vec{a} : \vec{u_1}\text{経由の正規化}) \\ \vec{u_2} &= \vec{b} - \mathrm{Proj}_{\vec{u_1}}(\vec{b}), & \vec{e_2} &= \frac{\vec{u_2}}{|\vec{u_2}|} & &(\text{射影して正規化}) \end{aligned}$$

このように定めると、$|\vec{u_1}| = \left| \dfrac{\vec{a}}{|\vec{a}|} \right| = \dfrac{|\vec{a}|}{|\vec{a}|} = 1,$ さらに射影したベクトルとの内積は $(\mathrm{proj}_{\vec{u_1}}(\vec{b}), \vec{u_1}) = (\vec{b}, \vec{u_1})$ より、$(\vec{u_2}, \vec{u_1}) = (\vec{b} - \mathrm{proj}_{\vec{u_1}}(\vec{b}), \vec{u_1}) = (\vec{b}, \vec{u_1}) - (\mathrm{proj}_{\vec{u_1}}(\vec{b}), \vec{u_1}) = 0$ から、直交化が示されます。 ノルムの正規化 $|\vec{e_2}| = 1$ は明らか。

３個のベクトルの場合も正規化を組み合わせて、直交化ができる。すなわち $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ からつくると、

$$\begin{aligned} \vec{u_1} &= \frac{\vec{a}}{|\vec{a}|} \in \langle \vec{a} \rangle, & \vec{e_1} &= \vec{u_1} \\ \vec{u_2} &= \vec{b} - \mathrm{proj}_{\vec{u_1}}(\vec{b}) \in \left\langle \vec{a}, \vec{b} \right\rangle, & \vec{e_2} &= \frac{\vec{u_2}}{|\vec{u_2}|} \\ \vec{u_3} &= \vec{c} - \mathrm{proj}_{\vec{u_1}}(\vec{c}) - \mathrm{proj}_{\vec{u_2}}(\vec{c}) \in \left\langle \vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \right\rangle, & \vec{e_3} &= \frac{\vec{u_3}}{|\vec{u_3}|} \end{aligned}$$

とすると、内積 $\vec{u_i}.\vec{u_j} = 0, (i \neq j)$ から互いに直交している基底，**正規直交基底** $\{\vec{e_1}, \vec{e_2}, \vec{e_3}\}$ が得られる。

例 $\mathbb{R}^2 \ni \vec{a} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}, \vec{b} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix}$ からグラム・シュミットの方法で，$\mathbb{R}^2$ の正規直交基底を定めよ。

まず $|\vec{a}| = \sqrt{3^2 + 4^2} = 5$ から $\vec{e_1} = \vec{u_1} = \dfrac{\vec{a}}{|\vec{a}|} = \dfrac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$、$|\vec{u_1}| = 1$ から, 射影は $\mathrm{proj}_{\vec{u_1}}(\vec{b}) = (\vec{b}, \vec{u_1})\vec{u_1} = \dfrac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ となる。 つぎに $\vec{u_2} = \vec{b} - \mathrm{proj}_{\vec{u_1}}(\vec{b}) = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} - \dfrac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \dfrac{1}{5}\begin{pmatrix} 12 \\ 24 \end{pmatrix} = \dfrac{3}{5}\begin{pmatrix} 1 \\ 24 \end{pmatrix}$ であるから、$\vec{u_2} = \begin{pmatrix} 5 \\ 6 \end{pmatrix} - 39/5 \begin{pmatrix} 3/5 \\ 4/5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8/25 \\ -6/25 \end{pmatrix} = \dfrac{2}{25}\begin{pmatrix} 4 \\ -3 \end{pmatrix}$ です。ここで検算をすると、$\vec{u_1}.\vec{u_2} = \begin{pmatrix} 3/5 \\ 4/5 \end{pmatrix} . \dfrac{2}{25}\begin{pmatrix} 4 \\ -3 \end{pmatrix} = \dfrac{2}{25}(3/5 * 4 + 4/5 * (-3)) = 0$ で直交しています。$\vec{e_2}$ は $\vec{u_2}$ を正規化して、$\vec{e_2} = \dfrac{\vec{u_2}}{|\vec{u_2}|} = \dfrac{1}{5}\begin{pmatrix} 4 \\ -3 \end{pmatrix}$ が求められました。直感的には $\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 4 \\ -3 \end{pmatrix} = 0$ が明らかですから、直交していて、それぞれを正規化すればよいだけです。2 本の原点を通る直線の傾き、$y = \dfrac{4}{3}x$ と $y = -\dfrac{3}{4}x$ の直交は当たり前ですね！しかし射影の公式 $\mathrm{Proj}_{\vec{u}}(\vec{a}) = (\vec{a}$ に依存したスカラー$)\ \vec{u}$ は覚えておきましょう。このように $\mathbb{R}^2$ における標準基底でない正規直交基底が得られます。

5　直交補空間，直交行列

5.1　直交補空間

直交 (perpendicular) とは角度が $90°, \cos 90° = \cos\dfrac{\pi}{2} = 0$、内積の値が $(\vec{a}, \vec{b}) = 0$ のことをいいます。(余弦定理：$\cos\theta = \dfrac{(\vec{x}, \vec{y})}{|\vec{x}||\vec{y}|}$ を思い出しましょう) ベクトル空間 V の部分空間 W から，直交する部分空間 $W^\perp$：

$$W^\perp = \{\vec{x} \in V \mid (\vec{x}, \vec{y}) = 0 \,\text{for all}\, \vec{y} \in W\}$$

を W の直交補空間と定義します。空間という言葉が含まれるのですが，W がベクトル空間でなくても，直交するベクトルを集めて作られる $W^\perp \subset V$ は部分空間となります。また

(i)　$V \in W_1, W_2$ に対して，　$W_1 \subset W_2 \Rightarrow W_1 \supset W_2$　(包含関係が逆になる)

(ii)　$\dim(V) = n$ のとき，$\dim(W) = k \quad \Leftrightarrow \quad \dim(W^\perp) = n - k \quad (\dim(W) + \dim(W^\perp) = \dim(V))$

いいかえると

$$V = W + W^\perp,\, W \cap W^\perp = \{\vec{0}\}$$

これを記号で

$$V = W \oplus W^\perp$$

と表す．直和 (direct sum) という．

$\boxed{\text{例}}$ $V = \mathbb{R}^3$ において $\vec{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{y} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{z} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \in V$ とするとき，$W = \langle \vec{x}, \vec{y} \rangle$, $W^\perp = \langle \vec{z} \rangle$ で $\mathbb{R}^3 = W \oplus W^\perp$ となる．ここで W は 3 次元平面 $y - z = 0$，一方これに直交する（原点における平面 W の法線ベクトル）$W^\perp = \left\{ yz\,\text{平面での直線}; x = 0, \dfrac{y}{-1} = \dfrac{z}{1} \right\}$ となる．より具体的には W は原点および $\vec{x}.\vec{y}$ の 3 点からなる三角形を含む平面で，原点から立てた直線で $(x, y, z) = (0, -1, 1), (0, 1, -1)$ を通るもの．一次結合式：左辺は $\mathbb{R}^3$, 右辺の第 1 項，第 2 項は W で，第 3 項は $W^\perp$ からとってきたもので

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = k_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + k_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + k_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_2 \end{pmatrix}$$

この関係式では

$$V \ni \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_2 \end{pmatrix} \in W + W^\perp$$

$$\Leftrightarrow \quad \begin{cases} W + W^\perp = \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/4 & 1/4 \\ -1/2 & 1/4 & 1/4 \\ 0 & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \\ W \cap W^\perp = \vec{0} \end{cases}$$

が得られるから．ここでベクトルの一次独立，行列の逆行列の存在がポイント

5.2　直交行列

定義：行列 A が直交行列（orthogonal matrix）とは

$$A^\mathsf{T}.A = A.A^\mathsf{T} = E(\text{単位行列})$$

を満たすとき．（ A^T は A の転置行列 (transpase matrix) , ${}^tA$ とも表す. 左側に書くのはべき乗との区別のため).
このとき両辺の行列式 (determinant) をとると，$\det|A^\mathsf{T}.A| = \det|A.A^\mathsf{T}| = \det|A| \det|A^\mathsf{T}| = \det|E| = 1$ で積がゼ

ロでないから，逆数が存在し，逆行列も存在する．すなわち直交行列は $A^{-1} = A^{\mathsf{T}}$ が成り立つとき，となるから，逆行列が転置行列に等しいことです．たとえば，

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{-1} = \left[\frac{1}{ad-bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{\mathsf{T}}$$

このような関係式を満たす例として，座標の回転を表現する, 角度 θ, ϕ より

(i)　2 次正方行列 $\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$　　(ii)　3 次正方行列 $\begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi & \cos\theta\cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\theta\sin\phi & \cos\theta\sin\phi & \cos\phi \\ \cos\theta & -\sin\theta & 0 \end{pmatrix}$

はいずれも直交行列である。

6　複素数化した行列

行列の要素（スカラー）を実数から複素数に拡張したものを複素行列とよび、直交行列を複素数化したものが、ユニタリー行列、対称行列に対しては、エルミート行列と定める。以下に定義を述べよう。

要素が複素数であるが、a を複素数として、その共役複素数を $\overline{a}$ と表すことから、$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ から、行列の共役を $\overline{A} = \begin{pmatrix} \overline{a} & \overline{b} \\ \overline{c} & \overline{d} \end{pmatrix}$ と表すことにする。$\mathrm{def}\left|\overline{A}\right| = \overline{a} * \overline{d} - \overline{b} * \overline{c} = \overline{a * d - b * c} = \overline{\mathrm{def}|A|}$ などから、順序の交換ができる。また転置に対しても同様で 転置と共役も交換できる。あえてカッコを書き順序を強調するが、これをもちいて、複素行列 A に対して、新しい変換操作の記号

$$A^* = (\overline{A})^{\mathsf{T}} = \overline{(A^{\mathsf{T}})}$$

を定める。実数行列であれば、$\overline{A} = A$ であるから、$A^* = A^{\mathsf{T}}$ でなり、その複素数化への拡張となっている。

ユニタリー行列 (unitary matrix):

$$A^*.A = A.A^* = E(\text{単位行列})$$

(注：A^* と A との積は交換可能とは限らない。交換可能であるとき、**正規行列**という)

エルミート行列 (Hermitian matrix):

$$A = A^*$$

ユニタリー行列は、実数行列における対称行列が正規直交基底をなすこと、変換のノルムが等長 $|Ax| = |x|$ であり、複素数での変換（対角化）に対して重要な役割をもつ。Hermit とはフランスのシャルル・エルミート（1822-1901）に因む。これから学ぶ固有値がエルミート行列では実数になることを示した。対称行列の場合での固有値が実数であることの拡張になる。

★★★　練習問題　★★★

$\boxed{1}$ 連立方程式の解集合 $W=\{(x,y,z);x+y-z=0,y+2z=0\}$ が $\mathbb{R}^3$ の部分空間をなすことを示し、1 個の正規ベクトル $W=\langle\vec{w}\rangle$ で張られる。これをもとめよ。

（ヒント；ベクトルのノルムは $\vec{w}=\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}$ に対して $\sqrt{a^2+b^2+c^2}=1$ を満たす。答え、$\vec{w}=\dfrac{1}{\sqrt{3^2+(-2)^2+1^2}}\begin{pmatrix}3\\-2\\1\end{pmatrix}=\dfrac{1}{\sqrt{15}}\begin{pmatrix}3\\-2\\1\end{pmatrix}$ で、これは 2 つの平面を表すの共通部分の直線 $\dfrac{x}{3}=\dfrac{y}{-2}=\dfrac{z}{1}$ である。

$\boxed{2}$ 2 次正方行列 $\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}$ が，列ベクトルの内積が

$$\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=1,\qquad\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}c\\d\end{pmatrix}=0,\qquad\begin{pmatrix}c\\d\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}c\\d\end{pmatrix}=1$$

であるとき，直交行列であることを示せ.

$\boxed{3}$ 3 次正方行列

$$\begin{pmatrix}\sin\theta\cos\phi & \cos\theta\cos\phi & -\sin\phi\\ \sin\theta\sin\phi & \cos\theta\sin\phi & \cos\phi\\ \cos\theta & -\sin\theta & 0\end{pmatrix}$$

は直交行列であることを示せ。

（注） 3 個の列ベクトルを $\vec{x_i},i=1,2,3$ とすると、内積 $(\vec{x_i},\vec{x_{\mathrm{j}}})=1(i=j),=0(i\neq j)$ であり、各ベクトルの大きさは“1”で互いに直交している。斜辺の長さが 1 の直角三角形！