13　正規直交基と直交行列

ここでは V は内積空間とする．

13.1　正規直交基

定義 13.1 次の条件を満たす V の基 $\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ を V の**正規直交基**という．

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

右辺の δ_{ij} は**クロネッカーのデルタ**と呼ばれる．

正規直交基は, V の任意の基を使って作ることができる．その方法がシュミットの直交化法として知られている．

定理 13.1 (**シュミットの直交化**, 教科書 p.116, 定理 6.2.1)
V の基 $\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ に対して V の正規直交基 $\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ を任意の $1 \leq r \leq n$ に対して

$$\langle \boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_r \rangle = \langle \boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r \rangle$$

を満たすようにとることができる．とくに有限次元の内積空間は正規直交基を必ず持つ．

証明　まず $\boldsymbol{u}_1 = \boldsymbol{v}_1 / \parallel \boldsymbol{v}_1 \parallel$ とおく．$\parallel \boldsymbol{u}_1 \parallel = 1$ である．$\boldsymbol{v}_2' = \boldsymbol{v}_2 - (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{v}_2)\boldsymbol{u}_1$ とおき，$\boldsymbol{u}_2 = \boldsymbol{v}_2' / \parallel \boldsymbol{v}_2' \parallel$ と長さを 1 に正規化する．

$$(\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2) = \frac{1}{\parallel \boldsymbol{v}_2' \parallel} \left[(\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{v}_2) - (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{v}_2)(\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_1) \right] = 0.$$

これを続けて $r < n$ まで $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_r$ が求まったとする．

$$\boldsymbol{v}_{r+1}' = \boldsymbol{v}_{r+1} - \sum_{i=1}^{r} (\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{u}_i)\boldsymbol{u}_i$$

とおき，$\boldsymbol{u}_{r+1} = \boldsymbol{v}_{r+1}' / \parallel \boldsymbol{v}_{r+1}' \parallel$ と正規化する．$\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_{r+1}$ が 1 次独立だから $\boldsymbol{v}_{r+1}' \neq \boldsymbol{0}$ がわかる．$1 \leq j \leq r$ のとき,

$$(\boldsymbol{v}_{r+1}', \boldsymbol{u}_j) = (\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{u}_j) - (\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{u}_j) = 0$$

より，$\boldsymbol{u}_{r+1}$ は $\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_r\}$ と直交している．また，作り方から明らかに $\boldsymbol{v}_{r+1}$ は $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_{r+1}$ の一次結合で書け，

$$\boldsymbol{u}_j \in \langle \boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_{r+1} \rangle$$

が $1 \leq j \leq r+1$ で正しい．よって

$$\langle \boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_r \rangle = \langle \boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_r \rangle.$$

□

例 13.1 (教科書 p.117, 例題 6.2.1)
シュミットの正規直交化を用いて $\mathbb{R}^3$ の次の基を正規直交化せよ．

$$\{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3\} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

解　$\| \boldsymbol{v}_1 \| = \sqrt{2}$ だから，

$$\boldsymbol{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

となり，$(\boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{u}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+3) = \frac{4}{\sqrt{2}}$ だから，

$$\boldsymbol{v}_2' = \boldsymbol{v}_2 - \frac{4}{\sqrt{2}} \boldsymbol{u}_1 = \begin{pmatrix} 1-2 \\ 3-2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

ゆえに $\| \boldsymbol{v}_2' \| = \sqrt{3}$ で

$$\boldsymbol{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

次に

$$(\boldsymbol{v}_3, \boldsymbol{u}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}}(2-1) = \frac{1}{\sqrt{2}},\ (\boldsymbol{v}_3, \boldsymbol{u}_2) = \frac{1}{\sqrt{3}}(-2-1+1) = \frac{-2}{\sqrt{3}}$$

なので,

$$\boldsymbol{v}_3' = \boldsymbol{v}_3 - \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_1 + \frac{2}{\sqrt{3}}\boldsymbol{u}_2 = \frac{5}{6}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

で，$\| \boldsymbol{v}_3' \| = \frac{5}{6}\sqrt{6} = \frac{5}{\sqrt{6}}$ となり,

$$\boldsymbol{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

この $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3$ が正規直交系になる.

13.2 直交行列

定義 13.2 n 次の実正方行列 P が**直交行列**であるとは,

$$^tPP = E_n$$

を満たすときに言う．このとき P は正則で $P^{-1} = {}^tP$ である.

定理 13.2 n 次の実正方行列を $A = [\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n]$ と列ベクトル表示すると,

$$A \text{ が直交行列 } \Leftrightarrow \{\boldsymbol{a}_1, \ldots \boldsymbol{a}_n\} \text{ が正規直交系}$$

証明 $\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n\}$ が正規直交系ならば

$$^tA = \begin{bmatrix} {}^t\boldsymbol{a}_1 \\ {}^t\boldsymbol{a}_2 \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{a}_n \end{bmatrix}$$

で、${}^tAA$ の成分は ${}^t\boldsymbol{a}_i\boldsymbol{a}_j = (\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{a}_j) = \delta_{ij}$ なので，A が直交行列であることがわかる．逆もこれを逆にたどれば良い. □

練習 13.1 (今日の練習問題ではありません）次の行列は直交行列であることを示せ

$$A = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \cos\theta\sin\phi & \cos\theta\cos\phi & -\sin\theta \\ \sin\theta\sin\phi & \sin\theta\cos\phi\cos\theta & \end{pmatrix}$$