補題 5.3 (直交射影) 直交系 $A = [\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n]$ とベクトル $\mathbf{b}$ に対し

$$s_j = \frac{(\mathbf{a}_j, \mathbf{b})}{(\mathbf{a}_j, \mathbf{a}_j)} = \frac{(\mathbf{a}_j, \mathbf{b})}{\|\mathbf{a}_j\|^2} \quad (j = 1, \dots, n), \quad \mathbf{b}' = \mathbf{a}_1 s_1 + \cdots + \mathbf{a}_n s_n = \sum_{j=1}^n \mathbf{a}_j \frac{(\mathbf{a}_j, \mathbf{b})}{(\mathbf{a}_j, \mathbf{a}_j)} \in \langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \rangle$$

(A が正規直交系の場合は $s_j = (\mathbf{a}_j, \mathbf{b})$) とするとき次が成り立つ:

(1) (直交性) $(\mathbf{a}_i, \mathbf{b} - \mathbf{b}') = 0 \quad (i = 1, \dots, n)$. $\langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \rangle \perp \mathbf{b} - \mathbf{b}'$

(2) (冪等性) $\mathbf{b} = \mathbf{a}_1 t_1 + \cdots + \mathbf{a}_n t_n \in \langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \rangle$ ならば

$$t_i = s_i, \quad \mathbf{b} = \mathbf{b}' = \mathbf{a}_1 s_1 + \cdots + \mathbf{a}_n s_n = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i \frac{(\mathbf{a}_i, \mathbf{b})}{(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i)} = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i \frac{(\mathbf{a}_i, \mathbf{b})}{\|\mathbf{a}_i\|^2}.$$

(3) (一意性) $\mathbf{b}'' \in \langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \rangle$, $(\mathbf{b} - \mathbf{b}'', \mathbf{a}_i) = 0 \quad (i = 1, \dots, n)$ ならば $\mathbf{b}'' = \mathbf{b}'$.

証明 (1): $(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j) = 0 \quad (j \neq i)$, $(\mathbf{a}_i, \mathbf{b}) = (\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i) s_i$ に注意すれば,

$$(\mathbf{a}_i, \mathbf{b} - \mathbf{b}') = (\mathbf{a}_i, \mathbf{b} - \sum_{j=1}^n \mathbf{a}_j s_j) = (\mathbf{a}_i, \mathbf{b}) - \sum_{j=1}^n (\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j) s_j = (\mathbf{a}_i, \mathbf{b}) - (\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i) s_i = 0$$

より $\mathbf{a}_i \perp \mathbf{b} - \mathbf{b}' \quad (i = 1, \dots, n)$. 定理 5.2 より $\langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \rangle \perp \mathbf{b} - \mathbf{b}'$.

(2): $0 \stackrel{(1)}{=} (\mathbf{a}_i, \mathbf{b} - \mathbf{b}') = \sum_{j=1}^n (\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j) (t_j - s_j) = (\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i) (t_i - s_i) = \|\mathbf{a}_i\|^2 (t_i - s_i) \quad (i = 1, \dots, n)$

$\|\mathbf{a}_i\|^2 \neq 0$ より $t_i = s_i \quad (i = 1, \dots, n)$ となり (2) を得る.

(3): $(\mathbf{a}_i, \mathbf{b} - \mathbf{b}'') = 0 \Leftrightarrow (\mathbf{a}_i, \mathbf{b}'') = (\mathbf{a}_i, \mathbf{b}) \quad (i = 1, \dots, n)$ と, $\mathbf{b}'' = \mathbf{a}_1 t_1 + \cdots + \mathbf{a}_n t_n$ として (2) を適用すれば,

$$\mathbf{b}'' = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i \frac{(\mathbf{a}_i, \mathbf{b}'')}{(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i)} = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i \frac{(\mathbf{a}_i, \mathbf{b})}{(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i)} = \mathbf{b}' \quad \square$$

$W = \langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \rangle \neq V$ のとき, この $\mathbf{b}'$ を, 部分空間 W への $\mathbf{b}$ の直交射影, または正射影といい, $p_W(\mathbf{b})$ と表す.

系 5.4 (直交基底と座標) V の (正規) 直交基底 $A = [\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n]$ に関する $\mathbf{b}$ の座標 $\mathbf{s} = {}^t[s_1 \cdots s_n]$, $(\mathbf{b} = A\mathbf{s})$ は

$$s_i = \frac{(\mathbf{a}_i, \mathbf{b})}{(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i)} = \frac{(\mathbf{a}_i, \mathbf{b})}{\|\mathbf{a}_i\|^2}, \quad \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i \frac{(\mathbf{a}_i, \mathbf{b})}{(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i)} = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i \frac{(\mathbf{a}_i, \mathbf{b})}{\|\mathbf{a}_i\|^2} \quad (\text{正規直交基底では } s_i = (\mathbf{a}_i, \mathbf{b}), \quad \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i (\mathbf{a}_i, \mathbf{b}))$$

定理 5.5 直交系 $[\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n]$ は一次独立である.

($\because$) $\mathbf{b} = \mathbf{a}_1 t_1 + \cdots + \mathbf{a}_n t_n = \mathbf{0}$ とすると, 各 i について $(\mathbf{a}_i, \mathbf{b}) = (\mathbf{a}_i, \mathbf{0}) = 0$. このとき上の補題 5.3 (2) より $t_i = 0$. よって $t_1 = \cdots = t_n = 0$ となり $[\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n]$ は一次独立である.

定理 5.6 ((グラム・) シュミット ((Gram-)Schmidt) の直交化法) 内積空間 $V \neq \{0\}$ には直交基底および正規直交基底が存在する. $[\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_r]$ が直交系ならば, これに付け加えて直交基底 $[\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n]$ が構成できる.

注 この証明は一次独立なベクトルの組から (正規) 直交系を求める計算法を与える. その際, 後の計算に使える様に直交系 $\mathbf{a}_i$ と正規直交系 $\mathbf{u}_i$ の両方の式を書いておく. なお, 直交系 $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ をまず構成し, その後正規化の方が容易な場合も多い.

証明 $[\mathbf{b}_1 \cdots \mathbf{b}_n]$ を V の基底とし, 直交系 $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k$ とその正規化である正規直交系 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k$ を, 補題 5.3 の n を $k-1$ に, $\mathbf{b}$ を $\mathbf{b}_k$ に置き替え, $\mathbf{a}_k$ を $\mathbf{b}_k - \mathbf{b}'_k$ とすることにより, 帰納的に次の様に $\mathbf{a}_n$ まで構成する:

(S₁) $k = 1$ のとき $\mathbf{a}_1 := \mathbf{b}_1, \quad \mathbf{u}_1 = \frac{1}{\|\mathbf{a}_1\|} \mathbf{a}_1.$

(S₂) $k = 2$ のとき $\mathbf{a}_2 := \mathbf{b}_2 - \mathbf{a}_1 \frac{(\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_2)}{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1)} (= \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}'_2) = \mathbf{b}_2 - \mathbf{u}_1 (\mathbf{u}_1, \mathbf{b}_2), \quad \mathbf{u}_2 = \frac{1}{\|\mathbf{a}_2\|} \mathbf{a}_2.$

以下同様に $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{k-1}, \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{k-1}$ が構成されたとき, $\mathbf{a}_k = \mathbf{b}_k - \mathbf{b}'_k$, 即ち,

(S_k) $\mathbf{a}_k := \mathbf{b}_k - \sum_{i=1}^{k-1} \mathbf{a}_i \frac{(\mathbf{a}_i, \mathbf{b}_k)}{(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_i)} = \mathbf{b}_k - \mathbf{a}_1 \frac{(\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_k)}{(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_1)} - \cdots - \mathbf{a}_{k-1} \frac{(\mathbf{a}_{k-1}, \mathbf{b}_k)}{(\mathbf{a}_{k-1}, \mathbf{a}_{k-1})} = \mathbf{b}_k - \sum_{i=1}^{k-1} \mathbf{u}_i (\mathbf{u}_i, \mathbf{b}_k), \quad \mathbf{u}_k = \frac{1}{\|\mathbf{a}_k\|} \mathbf{a}_k$

このとき $\mathbf{a}_1 = \mathbf{b}_1$ と (S_k) 式により帰納的に, $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{k-1}$ は $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_{k-1}$ の一次結合で表せ, $\mathbf{b}_k$ が $\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_{k-1}$ の一次結合で表せないから $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{k-1}$ の一次結合で表せず, (S_k) 式により $\mathbf{a}_k$ もそうなので $\mathbf{a}_k \neq \mathbf{0}$. 補題 5.3 より $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k$ は直交する. $[\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_r]$ が直交系ならばこれに $[\mathbf{b}_{r+1} \cdots \mathbf{b}_n]$ を付け加えて基底を構成し, 上記の様に (正規) 直交化すればよい. また, (S_k) 式を移項すれば $\langle \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_k \rangle = \langle \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_k \rangle$ も分る. この方法を (グラム-) シュミットの直交化法という.

[直交補空間] 内積空間 V の部分空間 W に対し, W の全てのベクトルと直交するベクトル全体を $W^\perp$ する. 即ち

$$W^\perp = \{\mathbf{a} \in V \mid \text{全ての } \mathbf{w} \in W \text{ に対し } (\mathbf{w}, \mathbf{a}) = 0\}$$

とすると, $W^\perp$ は部分空間になる. これを W の直交補空間という.

($\because$) [S3]: $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in W^\perp, s, t \in K, \mathbf{w} \in W \Rightarrow (\mathbf{w}, \mathbf{a}s + \mathbf{b}t) = (\mathbf{w}, \mathbf{a})s + (\mathbf{w}, \mathbf{b})t = 0s + 0t = 0$ をみただけで部分空間になる.

定理 5.7 (直交補空間) V の部分空間 $W (\neq \{0\}, V)$ に対し

$$V = W \oplus W^\perp \quad (\mathbf{v} \in V \text{ は } \mathbf{v} = \mathbf{w} + \mathbf{w}' \quad (\mathbf{w} \in W, \mathbf{w}' \in W^\perp) \text{ の形に一意的に表せる.})$$

証明 前定理 5.6 により W に正規直交基底 $[\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n]$ が存在する. このとき, 補題 5.3 より $\mathbf{v}$ の W への直交射影は

$\mathbf{w} = p_W(\mathbf{v}) := \sum_{i=1}^n \mathbf{u}_i (\mathbf{u}_i, \mathbf{v}) \in W, \quad \mathbf{w}' := \mathbf{v} - \mathbf{w} \in W^\perp, \quad \mathbf{v} = \mathbf{w} + \mathbf{w}'$ で, この表し方は一意だから直和になる.

• (1) $(W^\perp)^\perp = W$, (2) $(W_1 + W_2)^\perp = W_1^\perp \cap W_2^\perp$, (3) $(W_1 \cap W_2)^\perp = W_1^\perp + W_2^\perp$. (問 これらを示せ.)

例6 $m \times n$ K -行列 $A = [\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n]$ の生成する部分空間 $W = \langle A \rangle$ の直交補空間 $W^\perp$ は, $\mathbf{x} \in W^\perp \Leftrightarrow 0 = (\mathbf{a}_i, \mathbf{x}) = \mathbf{a}_i^* \mathbf{x}$ ($i = 1, \dots, n$) (定理 5.2) より, $W^\perp = \{\mathbf{x} \in \mathbb{C}^m \mid A^* \mathbf{x} = \mathbf{0}\} = W_{A^*}$ (解空間). 同様に, $\langle A^* \rangle^\perp = W_A$.

[ユニタリ行列, 直交行列] $\mathbb{C}^n$ の内積は標準内積 $(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \mathbf{b})_{\mathbb{C}^n} = \mathbf{a}^* \mathbf{b}$, $A^* := {}^t \bar{A}$ とする.

補題 5.8 $m \times n$ 行列 A , $n \times m$ 行列 $B = [b_{ij}]$, $\mathbf{a}, \mathbf{e}_i \in \mathbb{C}^n$, $\mathbf{b}, \mathbf{e}_j \in \mathbb{C}^m$ ($\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j$ は基本ベクトル) に対し

(1) $(A\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{a}, A^* \mathbf{b})$, $(\mathbf{a}, B\mathbf{b}) = (B^* \mathbf{a}, \mathbf{b})$. (2) $(\mathbf{e}_i, B\mathbf{e}_j) = b_{ij}$. (3) $(A\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{a}, B\mathbf{b})$ ($\mathbf{a} \in \mathbb{C}^n, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^m$) $\Rightarrow B = A^*$.

証明 (1) $(A\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (A\mathbf{a})^* \mathbf{b} = (\mathbf{a}^* A^*) \mathbf{b} = \mathbf{a}^* (A^* \mathbf{b}) = (\mathbf{a}, A^* \mathbf{b})$. 他は $A := B^*$ とおけば良い.)

(2) $(\mathbf{e}_i, B\mathbf{e}_j) = \mathbf{e}_i^* B\mathbf{e}_j = \mathbf{e}_i^* \mathbf{b}_j = b_{ij}$.

(3) $(A\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{a}, B\mathbf{b}) \Leftrightarrow (\mathbf{a}, (A^* - B)\mathbf{b}) = 0$ が全ての $\mathbf{a}, \mathbf{b}$, 特に $\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j$ について成立するので (2) より $A^* - B = O, \therefore B = A^*$. $\square$

n 次正方行列 U が $U^* U = E_n$ を満たすとき U を n 次 **ユニタリ行列** (unitary matrix) という. また, ユニタリ行列である実行列を **直交行列** (orthogonal matrix) という. 実行列 $\Leftrightarrow U^* = {}^t U$ より, 直交行列 $\Leftrightarrow {}^t U U = E$.

• ユニタリ行列 U の行列式の絶対値は 1. 直交行列 U' の行列式は ± 1 .

($\because$) $1 = \det E = \det(U^* U) = (\det U^*)(\det U) = \overline{(\det U)}(\det U) = |\det U|^2. \therefore |\det U| = 1$.

$\det U' \in \mathbb{R}$ かつ $|\det U'| = 1$ より $\det U' = \pm 1$.

n 次ユニタリ行列全体の集合を $U(n)$, n 次直交行列全体の集合を $O(n)$ と表す.

ユニタリ行列 $U, U_1, U_2 \in U(n)$ について

(i) $E_n \in U(n)$. (ii) $U^{-1} = U^* \in U(n)$. (iii) $U_1 U_2 \in U(n)$. (iv) ${}^t U = (\bar{U})^{-1}, \bar{U} = {}^t U^{-1} \in U(n)$.

($\because$) (i) $E_n^* E_n = E_n E_n = E_n$. (ii) $(U^*) U = E \Leftrightarrow U^* = U^{-1} \Leftrightarrow E = U U^* = (U^*)^* U^*$ より U は正則で, $U^{-1} = U^* \in U(n)$.

(iii) $(U_1 U_2)^* U_1 U_2 = U_2^* U_1^* U_1 U_2 = U_2^* E U_2 = E$. (iv) $E = \bar{E} = \overline{U^* U} = \overline{U^*} \bar{U} = {}^t U \bar{U}$.

注 U^* を ${}^t U$ に置き換えることにより $O(n)$ でも性質 (i),(ii),(iii) が成り立つ. (この (i),(ii),(iii) の性質を合わせて, $U(n), O(n)$ は群になるといい, $U(n)$ を n 次ユニタリ群, $O(n)$ を n 次直交群という.)

定理 5.9 (ユニタリ行列, 直交行列の性質) n 次正方行列 (実行列) $U = [\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n]$ について次は同値.

(1) U はユニタリ行列 (直交行列). 即ち, $U \in U(n)$ ($U \in O(n)$), $(U^* U)_{ij} = \delta_{ij}$.

(2) U は内積を保つ. 即ち, 全ての $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$ ($\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$) に対し $(U\mathbf{a}, U\mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$.

(3) $U = [\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n]$ は $\mathbb{C}^n$ ($\mathbb{R}^n$) の正規直交基底である. 即ち $(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) = \delta_{ij}$.

(4) U は長さを保つ. 即ち, 全ての $\mathbf{a} \in \mathbb{C}^n$ ($\mathbf{a} \in \mathbb{R}^n$) に対し $\|U\mathbf{a}\| = \|\mathbf{a}\|$.

証明 (1) $\Rightarrow$ (2): 補題 5.8(1) 式より, $(U\mathbf{a}, U\mathbf{b}) = (\mathbf{a}, U^* U\mathbf{b}) \stackrel{(1)}{=} (\mathbf{a}, E\mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$.

まず, $U\mathbf{e}_i = \mathbf{u}_i$ と補題 5.8(1,2) より $(U^* U)_{ij} \stackrel{5.8(2)}{=} (\mathbf{e}_i, U^* U\mathbf{e}_j) \stackrel{5.8(1)}{=} (U\mathbf{e}_i, U\mathbf{e}_j) = (\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)$.

(2) $\Rightarrow$ (1): $(U^* U)_{ij} = (U\mathbf{e}_i, U\mathbf{e}_j) \stackrel{(2)}{=} (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}. \therefore U^* U = E$.

(1) $\Leftrightarrow$ (3): $(U^* U)_{ij} = (\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)$ より, $(U^* U)_{ij} = \delta_{ij} \Leftrightarrow (\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) = \delta_{ij}$.

(2) $\Rightarrow$ (4): $\mathbf{b} = \mathbf{a}$ として $\|U\mathbf{a}\|^2 = (U\mathbf{a}, U\mathbf{a}) \stackrel{(2)}{=} (\mathbf{a}, \mathbf{a}) = \|\mathbf{a}\|^2$.

(4) $\Rightarrow$ (2): [I6] より長さから $(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ の実部, 虚部が求まり, U が長さを変えなければ内積を変えない.

定理 5.10 V の正規直交基底 U_1, U_2 の間の変換行列 U ($U_2 = U_1 U$) はユニタリ行列になる.

($\because$) $U = [\mathbf{u}_1 \mathbf{u}_2 \cdots \mathbf{u}_n]$ とすると $U_2 = U_1 U = [U_1 \mathbf{u}_1 \cdots U_1 \mathbf{u}_n]$ で, U_2, U_1 が正規直交基底なので $\delta_{ij} = (U_1 \mathbf{u}_i, U_1 \mathbf{u}_j) = (\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j)_{\mathbb{C}^n}$. よって U は $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底となり, ユニタリ行列になる (定理 5.9).

複素内積空間 V 上の一次変換 $f: V \rightarrow V$ が **ユニタリ変換** であるとは f が内積を保つ, 即ち $(f(\mathbf{a}), f(\mathbf{b})) = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$ を満たすときをいう. また, V が実内積空間のとき, 内積を保つ一次変換 f を **直交変換** という. 内積を保つ一次変換 (=ユニタリ変換, 直交変換) は $\|f(\mathbf{a})\|^2 = \|\mathbf{a}\|^2$ より長さも保つので **等長変換** ともいわれる.

定理 5.11 複素 (実) 内積空間 V 上の一次変換 $f: V \rightarrow V$ について次は同値.

(1) f はユニタリ変換 (直交変換).

(2) f の正規直交基底 $U = [\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n]$ に関する表現行列 F , $(f(U) = UF)$ はユニタリ行列 (直交行列).

($\because$) $F = [f_{ij}]$ とすると, $f(\mathbf{u}_j) = \sum_{i=1}^n \mathbf{u}_i f_{ij}$, $f(\mathbf{u}_q) = \sum_{p=1}^n \mathbf{u}_p f_{pq}$ と $(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_p) = \delta_{ip}$ より,

$$(f(\mathbf{u}_j), f(\mathbf{u}_q)) = \sum_{i,p=1}^n \overline{f_{ij}} f_{pq} (\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_p) = \sum_{i=1}^n \overline{f_{ij}} f_{iq} = \sum_{i=1}^n (F^*)_{ji} (F)_{iq} = (F^* F)_{jq}$$

よって, $(f(\mathbf{u}_j), f(\mathbf{u}_q)) = (\mathbf{u}_j, \mathbf{u}_q) = \delta_{jq} \Leftrightarrow F^* F = E$. (なお, $\mathbf{a} = U\mathbf{s}, \mathbf{b} = U\mathbf{t} \in V, \mathbf{s}, \mathbf{t} \in K^n \Rightarrow (f(\mathbf{a}), f(\mathbf{b})) = \mathbf{s}^* \mathbf{t} = (\mathbf{s}, \mathbf{t})$.)