9. 内積空間

2 次元ベクトル空間や 3 次元ベクトル空間の内積と同様に $\mathbf{R}^n$ の二つの元 $x = {}^t(x_1, \dots, x_n), y = {}^t(y_1, \dots, y_n)$ に対して内積が $(x, y) = x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots + x_ny_n$ によって定義できる。この章では内積を抽象的に定義しよう。ベクトルの内積（の一般化）が定義できれば、それをもとにベクトルの長さやその内積に関する二つのベクトルの間の距離が定義できる。ここでは、さらに正規直交基底なるものを定義する。

9.1. 内積空間、エルミート内積空間の定義.

まずベクトル空間上の内積の抽象的な定義をしよう。

定義 9.1. (1) V を $\mathbf{R}$ 上の有限次元ベクトル空間とする。$V \times V$ から $\mathbf{R}$ の写像

$$(,) : V \times V \to \mathbf{R};$$

が V の内積であるとは次の 4 つの条件を満たすことである。
- (a) $(rv, w) = (v, rw) = r(v, w)$
- (b) $(v_1 + v_2, w) = (v_1, w) + (v_2, w)$, $(v, w_1 + w_2) = (v, w_1) + (v, w_2)$
- (c) （対称性）$(v, w) = (w, v)$
- (d) （正値性）$(v, v) \geq 0$ で等号が成立するのは $v = 0$ のときのみである。

なる性質をもつことである *(a), (b)* の性質は双線形性と呼ばれる。

(2) V を $\mathbf{C}$ 上の有限次元ベクトル空間とする。写像

$$(,) : V \times V \to \mathbf{C};$$

が V のエルミート内積であるとはつぎの 4 つの性質を満たすことである。
- (a) $(rv, w) = \overline{r}(v, w)$, $(v, rw) = r(v, w)$.
- (b) $(v_1 + v_2, w) = (v_1, w) + (v_2, w)$, $(v, w_1 + w_2) = (v, w_1) + (v, w_2)$.
- (c) $(v, w) = \overline{(w, v)}$
- (d) $(v, v) \geq 0$ で等号が成立するのは $v = 0$ のときのみである。

なる性質をもつことである。

例 9.2 (標準内積)**.** (1) $u, v \in \mathbf{R}^n$ に対して $(u, v) = {}^t u \cdot v$ と定めると内積になる。これを標準内積という。

(2) $u, v \in \mathbf{C}^n$ に対して $(u, v) = {}^t\, \overline{u} \cdot v$ と定めるとエルミート内積になる。これを標準エルミート内積という。

定義 9.3 (ノルム)**.** 内積の場合も、エルミート内積の場合も $(v, v) \geq 0$ であるので

$$\| v \| = \sqrt{(v, v)}$$

を考えることができる。これを v のノルムという。このとき内積の場合も、エルミート内積の場合も $\| \alpha v \| = | \alpha | \cdot \| v \|$ がなり立つ。

9.1.1. シュワルツの不等式、三角不等式.

$\mathbf{R}$ 上のベクトル空間、あるいは複素ベクトル空間上 V に内積、あるいはエルミート内積があたえられているとする。これによって定まるノルムを $\| * \|$ と書く。

定理 9.4 (シュワルツの不等式)**.** $u, v \in V$ に対して、

$$|\,(u,v)\,| \leq \|\,u\,\| \cdot \|\,v\,\|$$

が成り立つ。

証明. 内積の時もエルミート内積の時も証明はほぼ同じなので、エルミート内積の場合に証明する。$(u,v)=0$ の時は明らかに成立するので、$(u,v)\neq 0$ とする。$\alpha \in \mathbf{C}, t \in \mathbf{R}$ としてとして

$$\begin{aligned} 0 \leq & \|\,tu+\alpha v\,\| \\ =&(tu+\alpha v, tu+\alpha v) \\ =&t^2 \|\,u\,\|^2 + 2\,\mathrm{Re}(\alpha(u,v))t + |\,\alpha\,|^2 \|\,v\,\| \end{aligned}$$

となる。これがすべての $t \in \mathbf{R}$ について成立するので、上の t に関する実係数２次式の判別式を考えて、

$$D/4 = \mathrm{Re}(\alpha(u,v))^2 - \|\,u\,\|^2 \|\,v\,\|^2 |\,\alpha\,|^2 \leq 0$$

が成り立つ。これに $\alpha = \overline{(u,v)}$ を代入して定理を得る。 □

系 9.5 (三角不等式)**.** x, y を V の元とすると、

$$\|\,x+y\,\| \leq \|\,x\,\| + \|\,y\,\|$$

が成り立つ。

証明.

$$\begin{aligned} \|\,x+y\,\|^2 =& (x+y, x+y) \\ =& \|\,x\,\|^2 + 2\,\mathrm{Re}(x,y) + \|\,y\,\|^2 \\ \leq& \|\,x\,\|^2 + 2\,|\,(x,y)\,| + \|\,y\,\|^2 \\ \leq& \|\,x\,\|^2 + 2\,\|\,x\,\| \cdot \|\,y\,\| + \|\,y\,\|^2 \\ =& (\|\,x\,\| + \|\,y\,\|)^2 \end{aligned}$$

ここで３行目と４行目の間の不等式はシュワルツの不等式を用いた。 □

定義 9.6. $u, v \in V$ で $u, v \neq 0$ とする。このときシュワルツの不等式から

$$-1 \leq \frac{(u,v)}{\|u\|\|v\|} \leq 1$$

となる。したがって $\cos(\theta) = \frac{(u,v)}{\|u\|\|v\|}$ をみたす θ が $[-\pi, \pi]$ の範囲でただ一つ定まる。この θ を u, v のなす角という。さらに $(u,v)=0$ となるとき、u と v は直交しているという。

9.2. **シュミットの直交化法.** V が実ベクトル空間、あるいは複素ベクトル空間として、内積あるいはエルミート内積 $(,)$ が定まっているとする。前の様に、ノルムを $\|*\|$ で表す。

定義 9.7. (1) （直交基底）V の基底 $v_1, \ldots, v_n$ が $1 \leq i \neq j \leq n$ ならば $(v_i, v_j) = 0$ を満たすとき、直交基底という。また、これが基底となることから $(v_i, v_i) > 0$ となる。
(2) （正規直交基底）V の基底 $v_1, \ldots, v_n$ が

$$(v_i, v_j) = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

となるとき、$v_1, \ldots, v_n$ は正規直交基底であるという。

注意 9.8. $v_1, \ldots, v_n$ が直交基底であるとき、$u_i = \dfrac{v_i}{\|v_i\|}$ とおくと、これは正規直交基底となる。実際、

$$\begin{aligned} (u_i, u_j) &= \frac{(v_i, v_j)}{\|v_i\| \cdot \|v_j\|} \\ &= \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \end{aligned}$$

となる。

V の基底から、つぎのアルゴリズムで V の直交基底が作ることができる。この方法をシュミットの直交化法という。

定理 9.9. V を実あるいは複素ベクトル空間とする。$v_1, \ldots, v_k$ を V で一次独立であるとする。（このとき $k \leq \dim(V)$ である。）このとき互いに直交する $\mathbf{0}$ でないベクトルの集合 $w_1, \ldots, w_k$ で次の性質を満たすものが存在する。

(1) $1 \leq i \leq k$ に対して、条件 (A_i) $\langle v_1, \ldots, v_i \rangle = \langle w_1, \ldots, w_i \rangle$. が成り立つ。
(2) $1 \leq i \leq k$ に対して、条件 (B_i) $w_i = v_i + r_i$, $r_i \in \langle w_1, \ldots, w_{i-1} \rangle$ が成り立つ。

とくに $v_1, \ldots, v_k$ が V の基底であれば上の $w_1, \ldots, w_k$ は直交基底となる。

証明. k に関する帰納法で証明する。$k = 1$ のときは $w_1 = v_1$ ととればよい。$k - 1$ のときの定理が成り立つと仮定する。帰納法の仮定を $v_1, \ldots, v_{k-1}$ に対して用いれば、$w_1, \ldots, w_{k-1}$ が条件 $(A_1), \ldots, (A_{k-1}), (B_1), \ldots, (B_{k-1})$ を満たすようにとれる。まず、条件 (A_k) を満たす w_k で

$$(w_1, w_k) = \cdots = (w_{k-1}, w_k) = 0 \tag{9.1}$$

となるものを構成する。

$$w_k = v_k + \sum_{i=1}^{k-1} a_{k,i} w_i$$

とおいて、式 (9.1) が成り立つように $a_{k,1} \ldots, a_{k,k-1}$ がとれることをいえばよい。実際 $w_1, \ldots, w_{k-1}$ が互いに直交することを用いれば、$j = 1, \ldots, k-1$ に

対して

$$(w_j, w_k) = (w_i, v_k + \sum_{i=1}^{k-1} a_{k,i} w_i) = (w_j, v_k) + a_{k,j}(w_j, w_j)$$

なので $w_1, \ldots, w_{k-1}$ は $\mathbf{0}$ ではないので、$a_{j,k} = -\dfrac{(w_j, v_k)}{(w_j, w_j)}$ ととればよい。このようにおけば、w_k に対して (B_k) がなりたつ。この式と (A_{k-1}) を用いれば、$w_1, \ldots, w_k, v_1, \ldots, v_k$ に対して (A_k) が成立する。したがって w_k は $\mathbf{0}$ ではなく、また $w_1, \ldots, w_{k-1}$ とも直交する。とくに、$v_1, \ldots, v_k$ が V の基底であれば、$w_1, \ldots, w_k$ は直交基底となる。 □

定義 9.10. 定理のように $\mathbf{0}$ でない V の元の集合 $w_1, \ldots, w_k$ で $i \neq j$ のときに $(w_i, w_j) = 0$ となるものを直交系という。さらに $1 \leq i \leq k$ に対して $(w_i, w_i) = 1$ が成り立つとき正規直交系という。

直交基底の長さで割ることにより、次の系が得られる。

系 9.11. V をベクトル空間、$v_1, \ldots, v_n$ をその基底とするとき、$\langle w_1, \ldots, w_k \rangle = \langle v_1, \ldots, v_k \rangle$ が $k = 1, \ldots, n$ に対して成り立つような正規直交基底 $w_1, \ldots, w_n$ が存在する。

正規直交基底とノルムの関係について次の命題が成り立つ。

命題 9.12. $v_1, \ldots, v_n$ を V の正規直交基底とする。

(1) $v = a_1 v_1 + \cdots + a_n v_n$ とすると、

$$\|v\|^2 = \mid a_1 \mid^2 + \cdots + \mid a_n \mid^2$$

(2) $v \in \mathbf{C}$ に対して $a_i = (v_i, v)$ とおくと、$v = a_1 v_1 + \cdots + a_n v_n$ となる。

証明. (1)

$$\begin{aligned}(v, v) =& (a_1 v_1 + \cdots + a_n v_n, a_n v_1 + \cdots + a_n v_n) \\ =& \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \overline{a_i} a_j (v_i, v_j) = \sum_{i=1}^{n} \overline{a_i} a_i = \sum_{i=1}^{n} \mid a_i \mid^2\end{aligned}$$

(2) 基底 $v_1, \ldots, v_n$ を用いて $v = a_1 v_1 + \cdots + a_n v_n$ と書くと、$(v_i, v) = \sum_{j=1}^{n} (v_i, a_j v_j) = \sum_{j=1}^{n} a_j (v_i, v_j) = a_i$ となり係数 a_i はこの式で定まる。 □

9.3. **随伴行列、直交行列、ユニタリ行列.** この節ではベクトル空間 $\mathbf{C}^n$ あるいは $\mathbf{R}^n$ とその標準内積について考え、内積と行列との関係を考える。

9.3.1. 転置行列、随伴行列.

定義 9.13. A を $(m \times n)$ 複素行列とする。A の随伴行列 A^* とは

$$A^* = \overline{({}^t A)} = {}^t (\overline{A})$$

によって定まる $(n \times m)$ 行列のことである。ここで行列 A の共役 $\overline{A}$ とは A のすべての要素の共役をとった行列である。とくに v が列ベクトルのときには v^* は行ベクトルとなる。次の性質は容易に確かめられる。

補題 9.14. A, B を $(m \times n)$ 複素行列、C を $(n \times l)$ 複素行列とする。a を複素数とする。このとき

$$(A+B)^* = A^* + B^*, (aA)^* = \overline{a}A^*, (AC)^* = C^*A^*, (A^*)^* = A$$

が成り立つ。

命題 9.15 (随伴性)**.** (1) A を $(m \times n)$ 実行列として、$u \in \mathbf{R}^m, v \in \mathbf{R}^n$ とする。このとき $(u, Av) = ({}^tAu, v)$ が成り立つ。
(2) A を $(m \times n)$ 複素行列として、$u \in \mathbf{C}^m, v \in \mathbf{C}^n$ とする。このとき $(u, Av) = (A^*u, v)$ が成り立つ。

証明. ここでは (2) を示す。(1) はほとんど同様にできる。まず $(u, v) = u^*v$ と書けることに注意しよう。従って

$$(u, Av) = u^*Av = u^*(A^*)^*v = (A^*u)^*v = (A^*u, v)$$

となる。 □

9.3.2. 直交行列、ユニタリ行列の定義と性質.

命題 9.16. U を $(n \times n)$ 複素行列とする。このとき次の 3 つは同値である。
(1) 任意の $u \in \mathbf{C}^n$ に対して $\|u\| = \|Uu\|$ である。
(2) 任意の $u, v \in \mathbf{C}^n$ に対して $(u, v) = (Uu, Uv)$ となる。
(3) $U^*U = UU^* = I_n$ である。

証明. (1) $\Rightarrow$ (2) $u, v \in \mathbf{C}$ とすると

$$\begin{aligned}\|u+v\|^2 - \|u\|^2 - \|v\|^2 =& (u+v, u+v) - (u,u) - (v,v) \\ =& (u,v) + (v,u) = 2\,\mathrm{Re}(u,v)\end{aligned}$$

条件 (1) が成り立てば、$\|u+v\| = \|U(u+v)\|$, $\|u\| = \|Uu\|$, $\|v\| = \|Uv\|$ なので $2\,\mathrm{Re}(u,v) = 2\,\mathrm{Re}(Uu, Uv)$ となる。また上の式の v を $\mathbf{i}v$ で置き換えれば、$-2\,\mathrm{Im}(u,v) = 2\,\mathrm{Re}(u, \mathbf{i}v) = 2\,\mathrm{Re}(Uu, \mathbf{i}Uv) = -2\,\mathrm{Im}(Uu, Uv)$ となるので $(u,v) = (Uu, Uv)$ となり (2) を得る。

(2) $\Rightarrow$ (3) 任意の $u, v \in \mathbf{C}^n$ に対して $(u,v) = (Uu, Uv) = u^*U^*Uv$ なので、$u = \mathbf{e}_i, u = \mathbf{e}_j$ に対して適用すると、U^*U の (i,j) 成分はクロネッカーのデルタ記号を用いて

$$\mathbf{e}_i U^*U\mathbf{e}_j = (e_i, e_j) = \delta_{ij}$$

となる。従って $U^*U = I_n$ となる。U^* と U がお互いに逆行列なので $UU^* = I_n$ もわかる。

(2) $\Rightarrow$ (3) (2) を仮定すると、$\|u\|^2 = (u,u) = (U^*Uu, u) = (Uu, Uu) = \|Uu\|^2$ となるので (3) がいえる。 □

定義 9.17. 上の同値な 3 条件が成り立つ U をユニタリ行列という。また A が実行列であり、かつユニタリ行列であるときに直交行列であるという。実行列が直交行列である条件 (3) は

$${}^tAA = A\,{}^tA = I_n$$

となる。

命題 9.18. (1) ユニタリ行列は正則行列である。I_n はユニタリ行列である。

(2) U, V がユニタリ行列の時、U^{-1}, U^*, UV はユニタリ行列である。
(3) A, B が直交行列の時、$A^{-1},\ {}^tA, AB$ は直交行列である。

証明. (1) は明らかである。(2) U, V をユニタリ行列とすると、

$$(U^{-1})^*U^{-1} = (U^{-1})^*U^{-1}(UU^*) = (U^{-1})^*U^* = (UU^{-1})^* = I_n$$
$$U^*(U^*)^* = U^*U = I_n$$
$$(UV)^*(UV) = V^*U^*UV = V^*V = I_n$$

となり U^{-1}, U^*, UV はユニタリ行列である。実行列である場合を考えれば (3) がわかる。 □

ユニタリ行列は正規直交基底とも関係が深い。

命題 9.19. U を $(n \times n)$ 複素行列とする。このとき次の 3 条件は同値である。
(1) U がユニタリ行列
(2) $U = (v_1, \ldots, v_n)$ と列ベクトルに分割したとき、$v_1, \ldots, v_n$ は正規直交基底である。
(3) ある正規直交基底 $v_1, \ldots, v_n$ が存在して $Uv_1, \ldots, Uv_n$ が正規直交基底である。

証明. 列によるブロック分けを用いて

$$U^*U = \begin{pmatrix} v_1^* \\ \vdots \\ v_n^* \end{pmatrix} (v_1, \ldots, v_n) = \begin{pmatrix} (v_1, v_1) & (v_1, v_2) & \ldots & (v_1, v_n) \\ \vdots & & & \vdots \\ (v_n, v_1) & (v_n, v_2) & \ldots & (v_n, v_n) \end{pmatrix}$$

となるので条件 (2) はこの行列が単位行列となることと同値であり、これは U がユニタリ行列であることと同値である。

(1) $\Rightarrow$ (3) は正規直交基底の定義とユニタリ行列の定義 (2) より明らかである。

(3) $\Rightarrow$ (1) $v_1, \ldots, v_n$ を $\mathbf{C}^n$ の正規直交基底とする。$v \in \mathbf{C}$ の元をとり、$v_1, \ldots, v_n$ の一次結合で $v = a_1v_1 + \cdots + a_nv_n$ と表すと、$Uv = a_1Uv_1 + \cdots a_nUv_n$ と書ける。条件 (3) より、$Uv_1, \ldots, Uv_n$ も正規直交行列なので、

$$\|v\| = | a_1 |^2 + \cdots + | a_n |^2$$
$$\|Uv\| = | a_1 |^2 + \cdots + | a_n |^2$$

なので $\|v\| = \|Uv\|$ となる。これはユニタリ行列の定義の (1) になる。 □