線形代数・同演習 B 講義ノート（2011 年，理学部物理学科 1 年用，担当：原隆）

1 連立方程式と掃きだし法（春学期の続き）

（春学期の続きとして，連立方程式を，復習を兼ねて考えます.）

この節では連立方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1.0.1}$$

を考える．ここで A は $m \times n$ 行列，$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{b}$ は

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_m \end{bmatrix} \tag{1.0.2}$$

というベクトルで，$x_1 \sim x_n$ が未知数である.

教科書と僕のノートでは m, n の役割が逆である．春学期も逆のままだったので，このままにしておく.

1.1 掃きだし法（復習）

この節では

- 「掃きだし法」を使って連立一次方程式が解けるようになること.
- 一次方程式系の解の様子には 3 つの可能性があること：
  - 解が全く存在しない（不能）
  - 解が存在し，一意に定まる
  - 解が無数にたくさん存在する（不定）

を理解することが目的である.

「掃き出し法」とは原理的には（中学以来の）変数を消去して連立方程式を解く方法だが，ある程度間単，かつシステマティックにできるように整理したもので，以下の 3 つの操作の繰り返しからなる：

(0) 2 つの方程式の順序を入れ替える.

(a) 1 つの方程式に，別の方程式の定数倍を加える.

(b) 1 つの方程式にゼロでない数をかける.

この 3 つの操作のそれぞれについて，操作の前と後では，方程式の解の集合は変わらない（不変である）．つまり，これらは方程式系に対する**同値変形**になっているわけで，この 3 つの同値変形をくり返して，方程式をわかりやすい形に変形するのが目的である.

(行列との関係)

掃き出し法での変形をよく見ると，未知数をいちいち x, y, z と書かなくても，その係数のつくる「拡大係数行列」$(A, \boldsymbol{b})$ だけ取り出して，同様の計算をやれば良い．この行列に対する操作は，以下の 3 つである.

(0) 2 つの行を入れ替える.

(a) 1 つの行に，別の行の定数倍を加える.

(b) 1 つの行にゼロでない数をかける.

上の３つの操作を**行列に対する行の基本変形**という．

> 掃き出し法の目的は,『連立方程式を (1.1.4) のような階段状にすること』である．その理由は『階段状にすると，下の行の表す方程式から上の行の方程式へ順に解くことにより，解が順繰りに決まるから』である．
> 春学期の期末を見ると，この点が明らかでない人が一定数いた —— 連立された方程式をいろいろと足し引きするのだが，条件を使い切れずに自滅していた．ここのところは重要だから，しっかり理解すること．

では，これから一次方程式系には３つの場合があることを例を使って学習しよう．典型的な例では解が存在して一意に定まる．

しかし，そうでない例もある．以下が一例である：

$$(1)\quad \begin{cases} x - y + z = 4 \\ 2x - 2y + z = 6 \\ -x + y + 2z = 2 \end{cases} \qquad (2)\quad \begin{cases} x - y + z = 2 \\ 2x - 2y + z = 0 \\ -x + y + 2z = 4 \end{cases} \tag{1.1.1}$$

この場合（解き方は各自やってみること），掃きだし法で解いた結果は

$$(1)\quad \begin{cases} x - y = 2 \\ z = 2 \\ 0 = 0 \end{cases} \qquad (2)\quad \begin{cases} x - y = -2 \\ z = 4 \\ 0 = -6 \end{cases} \tag{1.1.2}$$

となる．(1) の方は，$z = 2$ かつ，$x = y + 2$ なら何でも良い．つまり，t を任意の実数として，$x = t + 2, y = t, z = 2$ が解なのである．この場合，解は無数にあるわけだ．

一方，(2) の場合は一番下の式が矛盾している．x, y, z をどのようにとっても，この３つを満たすことはできない．つまり，もともとの (2) の解は存在しないのだ．

以上を多少強引にまとめると，連立一次方程式系の解については，以下の３つの可能性があることがわかる：

(a) 解が存在し，一意的に定まる（上の例 0 のように）

(b) 解が無数に存在する（上の例 (1) のように）— 連立方程式系は「不定」であるという．

(c) 解が全く存在しない（上の例 (2) のように）— 連立方程式系は「不能」であるという．

与えられた方程式系がこの３つのどれであるかは，一般には解いてみないとわからないが[1]，次節でもう少し考える．未知数の数を n，方程式の数を m とすると，$m = n$ なら (a)，$m > n$ なら (c)，$m < n$ なら (b) と言いたくなるが，これは一般には正しくないから注意のこと．(各自，反例を考えてみよう．)

行列の階数の話に入る前に，今までの宿題の一つを片づけておこう．

($\mathbb{R}^m$ において，$m+1$ 本以上のベクトルが一次従属であることの初等的証明)

ベクトルが n 本あるとする（$n > m$）．これらが一次独立か従属かを判定するには，方程式

$$x_1\,\boldsymbol{a}_1 + x_2\,\boldsymbol{a}_2 + x_3\,\boldsymbol{a}_3 + \ldots + x_n\,\boldsymbol{a}_n = \mathbf{0} \tag{1.1.3}$$

を $x_1, x_2, \ldots, x_n$ について解き，解が「すべてゼロ」に限るかどうかを見れば良かった（春学期の最初の方でやったよね）．我々は一次従属だと言いたいのだから，これがゼロでない解を持つ，と言いたい．

そこで，この方程式を掃きだし法で解く．この節の基本操作を繰り返し，できるだけ簡単な形になるように頑張るのである．ここで「簡単な形」というのは，下のような階段状のものを指す．(黒板で説明するように，いつでもこの階段状の形には持っていける．)

$$\begin{cases} x_1 + a'_{12}x_2 + a'_{13}x_3 + a'_{14}x_4 + \cdots + a'_{1n}x_n = 0 \\ x_2 + a'_{23}x_3 + a'_{24}x_4 + \cdots + a'_{2n}x_n = 0 \\ x_4 + \cdots + a'_{2n}x_n = 0 \\ \cdots = \cdots \\ x_\ell + \cdots = 0 \end{cases} \tag{1.1.4}$$

[1]ただし，斉次の方程式の場合はいつでも「すべてゼロ」の解があるから，(c) の可能性はない

(上では 3 行目が x_4 から始まっているが，そうとは限らない．だけど，このように階段状になるのは間違いない.)

さて，階段状になれば，どのような解があるかは明らかになる．つまり，下の方から順次解いていけばよい．このとき，一番下の式が 2 つ以上の x_i を含んでいればこれで証明終わりである．と言うのも，そのような式は必ず,「すべてがゼロ」とは限らない解を持ち，これを上のそれぞれの方程式に代入して解けば，ゼロでない解が得られるからである．

不幸にして一番下の式が

$$x_n = 0 \tag{1.1.5}$$

となっていれば，ここでは話がすまない．これを上のところにすべて代入し，x_n をなくした式を改めて解く．下から 2 番目の式が $x_{n-1} = 0$ でなければオシマイ．もし x_{n-1} ならもう一つ上を見る．こうやって上っていくが，方程式の数が未知数の数より多いから，絶対にどこかでゼロ以外の解が入ってくるはずである.(このところはすぐ後で，行列の「階数」と関連させてもう一度扱う.) □

> 高校の時から言われているとは思うが，方程式を解いた場合，得られた解が元の方程式を満たすか否かは簡単に検算できる.(もとの方程式に代入すれば良い.) もちろん，得られたもの以外にも解があるかどうかまでは確かめにくいが，目の前にあるものが解かどうかは簡単にわかる．ここ数年，試験時に検算をしていない人が目立つようになった．是非，**検算を怠らないで**もらいたい．

1.2 逆行列の求め方

(この節の内容は教科書の 5.4 節である.)

教科書と順序が入れ替わるけども，計算だけで行ける部分として,「逆行列」の簡単な計算法を眺めておこう．定義を思い出すと，$n \times n$ 行列 A に対して (I_n は $n \times n$ の単位行列)

$$AB = BA = I_n \tag{1.2.1}$$

となる $n \times n$ 行列 B を A の逆行列と言ったのだった．

まず，以下の 2 つの定理を証明する．以下では (春学期と同じく) $n \times n$ 行列 A の表す線型写像を L_A とかく．

> **定理 1.2.1** A を $n \times n$ 行列とする．A の階数が n であることと，A が正則であることは同値である．

(正則なら階数が n，の証明) こっちは簡単．正則なら逆行列 A^{-1} があって $A\,A^{-1} = I_n$ である．両辺の階数を取ると $\mathrm{rank}\,(A\,A^{-1}) = n$ となるが，教科書の定理 4.5.1 から，$\mathrm{rank}\,(A) \geq \mathrm{rank}\,(A\,A^{-1})$ である．A の階数は n 以下だから，以上より，$n \geq \mathrm{rank}\,(A) \geq n$. □

(階数が n なら正則，の証明) A の定める線型写像 L_A を考える．L_A の階数が n ということは，L_A の像空間が $\mathbb{R}^n$ 全体ということである．すなわち，任意の $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して，$L_A(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{y}$ となる $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ を探してくることができる．

さらに，このような $\boldsymbol{x}$ は ($\boldsymbol{y}$ を決めれば) 一意に決まる．なぜなら，もし $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'$ の 2 つが $L_A(\boldsymbol{x}) = L_A(\boldsymbol{x}') = \boldsymbol{y}$ を満たしていれば，$L_A(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') = \boldsymbol{0}$ となるが，次元定理から，$\dim(\ker L_A) = n - \mathrm{rank}\ A = 0$ であるから，$\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}' = \boldsymbol{0}$ となるからである．

従って，$\boldsymbol{y}$ に $\boldsymbol{x}$ を対応させる写像 $M : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ を定義することができるが，この M は L_A の逆写像になっている．実際，$M(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{x}$ の定義から

$$M(L_A(\boldsymbol{x})) = M(\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{x} \tag{1.2.2}$$

および

$$L_A(M(\boldsymbol{y})) = L_A(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{y} \tag{1.2.3}$$

が成り立つからである.(ここでもちろん，上の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ は $\mathbb{R}^n$ の任意の元になりうることを使っている.)

さらに，この M は線型写像である．なぜなら，$\boldsymbol{y}_1 = L_A(\boldsymbol{x}_1), \boldsymbol{y}_2 = L_A(\boldsymbol{x}_2)$ とすると L_A の線型性から（任意のスカラー α, β に対し）$L_A(\alpha\boldsymbol{x}_1 + \beta\boldsymbol{x}_2) = \alpha\boldsymbol{y}_1 + \beta\boldsymbol{y}_2$ となる．したがって，M の定義から $M(\alpha\boldsymbol{y}_1 + \beta\boldsymbol{y}_2) = \alpha\boldsymbol{x}_1 + \beta\boldsymbol{x}_2$（線型性）がいえるからである．

以上から L_A の逆線型写像 M の存在が証明できた．そこでこの線型写像 M の表現写像を B と書くことにすると,（合成写像 $L_A M$ の表現行列は AB であることから）

$$AB = BA = I_n \tag{1.2.4}$$

がなりたつ．これは B が A の逆行列であることを主張している． □

定理 1.2.2 A, B を $n \times n$ 行列とすると，以下の 3 つは同値である．
(1) $AB = BA = I_n$
(2) $AB = I_n$
(3) $BA = I_n$

(1) は「A の逆行列が B」である定義そのものだから，上の定理はこの条件が (2) または (3) のどちらか一方で十分，ということを保証するものである．

（証明） (1) は (2) や (3) を含むから，(2) から (1) が出ることを示そう（(3) から (1) も同様）．つまり，$AB = I_n$ ならば A は正則で $B = A^{-1}$ であることを示せば良い．さて，$AB = I_n$ なら，教科書の定理 4.5.1 から,

$$\min(\mathrm{rank}\ A, \mathrm{rank}\ B) \geq \mathrm{rank}\ AB \geq \mathrm{rank}\ I_n = n \tag{1.2.5}$$

が成り立つ．つまり，A, B ともにその階数は n なのだ．そこで上の定理 1.2.1 から直ちに，A, B ともに正則行列であることがいえる．そこで A の逆行列を A^{-1} と書き，これを $AB = I_n$ の左からかけると

$$A^{-1} = A^{-1}AB = I_n B = B \tag{1.2.6}$$

が得られる．よって $BA = I_n$ である． □

逆行列の具体的計算法

定理 1.2.2 は要するに，A の逆行列 X を求めたければ $AX = I_n$ となる行列を求めれば良い，と主張している．となれば，逆行列を求めるのは簡単だ．X の列ベクトルを $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \ldots, \boldsymbol{x}_n$ と書いてみると，$AX = I_n$ は

$$A\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{e}_1, \quad A\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{e}_2, \quad \ldots, \quad A\boldsymbol{x}_n = \boldsymbol{e}_n \tag{1.2.7}$$

ということだ．このそれぞれは n 個の変数に対する連立方程式であるが，この解き方は既に「掃き出し法」としてやっているから，それを n 回くりかえせば $\boldsymbol{x}_1$ から $\boldsymbol{x}_n$ が求まる．

実はもう少し，工夫できる．掃き出し法では拡大係数行列 $(A, \boldsymbol{e}_j)$ を基本変形するが（$j = 1, 2, \ldots, n$），係数行列 A はすべての j に共通である．そこで，$\boldsymbol{e}_j$ のところもまとめて並べてしまって,

$$(A, \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3, \ldots, \boldsymbol{e}_n) = (A, I_n) \tag{1.2.8}$$

という（超）拡大係数行列を考えてみよう．これに行の基本変形をやって，左の A の部分が I_n になるまで変形すると，残った右側がちょうど求める X になる．つまり

$$(A, I_n) \quad \xrightarrow{\text{行の基本変形}} \quad (I_n, X) \tag{1.2.9}$$

これが A の逆行列 $X = A^{-1}$ の求め方である．

連立方程式の場合と同じく，逆行列を求めたら，検算すること！

1.3 行列の基本変形と行列の階数

この節の内容は教科書の 5.2 節である．

話を連立方程式に戻して，1.1 節に挙げた３つの可能性がどのようにして出てくるのか，連立方程式の一般論と併せて考えよう．また，上ででてきた「行列の基本変形」についてももう少し考える．

まず，行列の「階数」の概念を思い出そう．春学期の命題 5.5.3 は以下のようになっていた：

春学期の**命題 5.5.3** $m \times n$ 行列 A の階数 rank A は，A の n 個の列ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ の中の一次独立なベクトルの最大数に等しい．

実は行列の階数は「行の基本変形」を用いて計算できるのである．行の基本変形とは

(0) ２つの行を入れ替える．

(a) １つの行に，別の行の定数倍を加える．

(b) １つの行にゼロでない数をかける．

であった．この３つの操作を繰り返して，変形後の行列を階段状にした場合，ゼロでない数の入った行の数がその行列の階数になる．つまり，この操作をやることで，行列に入っている独立な行の数が，基本変形をやることでわかるのである．

なぜこのような操作で階数がわかるのか，は以下の定理 1.3.3 からわかる．その前に，基本変形の性質を列挙する．

定理 1.3.1 行列 A に対する行の基本変形は，ある正則行列を A の左からかけることで表現できる．

（証明）教科書 p.104 にある通り．具体的に，かけるべき行列を書き下してやればよい． □

定理 1.3.2 行の基本変形は，可逆である．つまり，行列 A に行の基本変形をほどこして行列 B になったとすると，B に（別の）基本変形を施して A に戻ることができる．

（証明）教科書 p.106 にある．しかしこんなことをやらなくても，具体的にどのようにすれば戻れるか，考えてみればすぐにわかる． □

以上の準備の元に,「行列の階数の求め方」を基礎づけられる．

定理 1.3.3 行の基本変形により，行列の階数は不変である．

（証明）教科書 p.106 参照． □

基本変形によって階数が変わらないのだから，行列の階数は（基本変形を繰り返した後で）計算しやすい形の行列にしてから計算すれば良い．ところが，階段状になった行列の階数が，その対角線上のゼロでない成分の数に等しいことはすぐにわかる．従って，この節の最初に述べた階数の計算法が正当化される．

1.4 連立方程式の解の構造

この節の内容は教科書の 5.1 節（$+\alpha$）である．

まず，連立方程式についての非常に重要な性質をまとめる（春学期にあまりちゃんと言わなかったように思うので）．A を $m \times n$ 行列，$\boldsymbol{b}$ を m 次元数ベクトル，$\boldsymbol{x}$ を n 次元数ベクトルとして，連立方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を考える．

用語：連立方程式（未知数は $\boldsymbol{x}$） $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ は,

- $\boldsymbol{b} \neq \boldsymbol{0}$ のとき，**非斉次の**連立方程式という．
- $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$ のとき，**斉次の**連立方程式という．

斉次の方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ の解と，非斉次の方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解の間には以下のような特別な関係がある：たまたま，$A\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$ となるような $\boldsymbol{y}$ が見つかったとすると，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の任意の解 $\boldsymbol{x}$ を，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}$ と書くことができる．ここで $\boldsymbol{z}$ は $A\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}$ の適当な解.（教科書では定理 5.1.2 の (ii)）.

これは $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く仕事が，部分的に $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ を解く仕事にすり替えられる，ことを主張している．つまり，何らかの偶然で（もしくは勘で）$A\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$ となるような $\boldsymbol{y}$ を一つだけ見つけてやれば，それ以外の解は $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ の解を足しあわせることで得られる，と言うわけだ．この性質は連立方程式系ではそれほどうれしいものではないが，将来，皆さんが微分方程式などを扱うようになると，かなり嬉しいものであることがわかるだろう．

（証明）$A\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$ となるような $\boldsymbol{y}$ があったとして，$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ なる任意の $\boldsymbol{x}$ を持ってきたときに，$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}$ が斉次の方程式を満たすことを言えばよい．でもこれは行列とベクトルのかけ算が分配法則を満たすことから，

$$A\boldsymbol{z} = A\,(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) = A\,\boldsymbol{x} - A\,\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{b} = \boldsymbol{0} \tag{1.4.1}$$

となって，実際に $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}$ が斉次方程式の解であることがわかった． □

註： 上の性質はあくまで，**非斉次方程式系の解が一つ見つかったとき**，にのみ有効である．**非斉次方程式には解がない**ことも多々ある，のは皆さんが問題を解いてよく知ってる通り．

最後に，上に述べた行列の階数と連立方程式の階の構造の関係についてまとめておく.（以下の内容を必要以上に恐れる必要はない．要点は既に，掃き出し法による具体的な解法で尽きている.）

定理 1.4.1 連立方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ が解を持つ必要十分条件は $\mathrm{rank}\ A = \mathrm{rank}\ (A, \boldsymbol{b})$ が成り立つことである．

（証明）教科書の p.99 にあるが，以下のように考えても良い．

（解があればランクが等しいことの証明）もともと，連立方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ とは，A の列ベクトルを $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ と書いたとき，

$$\boldsymbol{x}_1\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{x}_2\boldsymbol{a}_2 + \ldots + \boldsymbol{x}_n\boldsymbol{a}_n = \boldsymbol{b} \tag{1.4.2}$$

という関係だった．これは $\boldsymbol{a}_1 \sim \boldsymbol{a}_n$ の線型結合によって $\boldsymbol{b}$ が表せる，特に $\boldsymbol{b}$ は $\boldsymbol{a}_1 \sim \boldsymbol{a}_n$ とは独立でない，ということだ．つまり，$\boldsymbol{a}_1 \sim \boldsymbol{a}_n$ と $\boldsymbol{b}$ を併せたものの中の一次独立なベクトルの最大数は，$\boldsymbol{b}$ があってもなくても変わらない．よって，前学期の命題 4.5.3 を思い出すと，A と $(A, \boldsymbol{b})$ のランクは等しい．

（ランクが等しいならば解が存在することの証明）前学期の命題 5.5.3 を思い出すと，ランクが等しいならば「$\boldsymbol{a}_1 \sim \boldsymbol{a}_n$ と $\boldsymbol{b}$ を併せたものの中の一次独立なベクトルの最大数」は「$\boldsymbol{a}_1 \sim \boldsymbol{a}_n$ の中の一次独立なベクトルの最大数」に等しい．ということは,（$\boldsymbol{b}$ があってなくても最大数が変わらないのだから）$\boldsymbol{b}$ は $\boldsymbol{a}_1 \sim \boldsymbol{a}_n$ の線型結合で書けているということだ（もし書けていないとどうなるかを考えよ）．これは (1.4.2) に他ならない． □

定理 1.4.2 A を $m \times n$ 行列とし，n 個の未知変数に対する斉次連立方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ を考える．この方程式の解の自由度（解に現れる任意パラメーターの数）は $n - \mathrm{rank}\ A$ に等しい．

（証明）A の表す線型変換を L_A と書くと，次元定理から，

$$\dim(\mathrm{Im}\ L_A) + \dim(\ker L_A) = n \tag{1.4.3}$$

である．ここで $\dim(\ker L_A)$ は $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ の解の自由度に他ならない．また，$\dim(\mathrm{Im}\ L_A)$ は行列 A の階数そのものである． □

2 行列式

この節では「行列式」について学ぶ．この節の内容は概念的には難しいものではない（ハズだ）し，教科書にも詳しく載っているので，レジュメは簡単なものになる予定である．ただし，ある程度の計算練習をしておかないと試験の時に（また将来，物理学科で）困るだろうから，練習しておいてくださいね．

（本論にはいる前に：何のために行列式をやるのか？）

- 行列式にはいろいろな意味づけができるが，この講義にとって一番大事なのは，「正則行列＝行列式がゼロでない行列」と言うことだ．つまり，行列式を計算すれば，その行列が正則か正則でないかがわかる．
- 「行列が正則か正則でないか」の判定は後で「行列の固有値と固有ベクトル」を求める上で不可欠になる．
- と言うわけで，行列式は後々に重要になってくるので，その計算方法を知ることが重要なのである．

（少し進んだ注）

行列式の定義には大体，以下の 3 とおりがある．（以下では細かい用語などはわからなくても，大体の感じが伝わればよい．）これらは互いに同値で，どれかを定義にとって，残りの２つを証明することができる．

(a) 行列式の定義式を「置換」「互換」から陽に与える．
  - 長所：陽に定義式を与えているので安心できる．大方の教科書はこの方法であろう．
  - 短所：定義そのものが（置換・互換の定義から始めると）かなり長い．更に，「行列式の基本的性質」を導出した後では，このように苦労した定義はほとんど使わない．

(b) 「行列式の基本的性質」（定理 2.2.1) を満たすような多重線型汎関数として定義する．
  - 長所：一番大事な性質そのものを定義とするので，無駄がない．
  - 短所：そのような性質を満たすものが実際に存在するのか，存在するとして一意に定まるか（要するに定義がきちんとできているのか）の検証が案外と厄介で，結局，(a) の定義を導出することになる．

(c) $n \times n$ 行列の行列式を $(n-1) \times (n-1)$ 行列の行列式を用いて，帰納的に定義する．
  - 長所：2×2 行列の行列式は知っているから，定義そのものは明確．
  - 短所：帰納的に定義しているから，「行列式の基本的性質」などを導くのが厄介．

いろいろと考えたのだが，この講義では教科書通りに (a) の方針に従うことにする（この講義ノートの 2.1 節）．その後で，上の (b) の部分（講義ノートの 2.2 節），および (c) の部分（講義ノートの 2.3 節），の順番で進む．もちろん，(a) の定義を採用した以上，(b),(c) の部分は定義から導かれる「定理」ということになる．

2.1 行列式の定義

この節では行列式を定義する．2×2 または 3×3 行列の行列式は高校でもやったと思うが（自信がない ―― やったことは前提にしない），この節では 4×4 以上でも成り立つ定義を与える．

2.1.1 置換と互換

しばらく定義が続くが，我慢して欲しい．教科書の該当部分は 6.1 節と 6.2 節で，かなり細かく書いてある．しかし，ここまで細かくやると本筋を外れすぎる恐れもあるので，要点だけを簡単に述べる．

n 個の数字 $1, 2, 3, \dots, n$ を重複なしで並べたものを 1〜n の**順列**と言うのは高校でやったはずだ．ここではこれを発展させる．

順列を表すために，上の行に 1〜n，下の行にその順列の並び方（数字）を並べて行列のように書いてみよう．例えば（$n=5$），

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 2 & 1 & 4 & 5 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.1.1}$$

（の下の行）はどれも 1〜5 の順列である．このように書くと，順列は上の行の 1〜n の数字のそれぞれに下の行の数字を対応させる変換（写像）と考えられる．そこで，この対応関係を**置換**と呼ぶ．置換には σ, τ のような記号

を用いることが多い．また，置換 σ による数字 j の行き先（変換先）を $\sigma(j)$ と書く．(2.1.1) の真ん中の例なら $\sigma(1)=3, \sigma(2)=2, \sigma(3)=1$ などとなる．

（いくつかの注意）

1．「置換」と言うときは上の**対応関係**（つまり，1 に対応するのはどの数字か，2 に対応するのはどの数字か,...）のみに注目する．つまり，一行目を並べ替えても，それに応じて２行目も並べ替えておけば，両者は同じ置換とみなす．例：

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 2 & 1 & 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 5 & 4 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \tag{2.1.2}$$

2．(2.1.1) の最初の置換は，どの数字も変わっていない．これを**恒等置換**または**単位置換**と呼ぶ．教科書では単位置換を ϵ の記号で表している．

3．置換 σ の置き換えられた数字を元に戻す置換を σ の**逆置換**と呼び，σ^{-1} と書く．

4．２つの置換 σ, τ が与えられたとき，その**積**を，この２つの置換を続けて行ったものとして定義する．つまり，数字 i を数字 $\tau(\sigma(i))$ に変える変換を $\tau\sigma$ と書き（順序に注意），σ と τ の積と定義するのである．

5．上の積の定義によると，逆置換は

$$\sigma^{-1}\,\sigma = \sigma\,\sigma^{-1} = \epsilon\ (\text{単位置換}) \tag{2.1.3}$$

を満たすものである，と言える.（逆行列などの定義との類似に注意しよう.）

２つの数字だけ入れ替え，残りの数字は変えないような置換を**互換**と呼ぶ．互換は勿論，置換の一種であるし，互換を重ねて行ったものは置換になっている．大事なのはその逆も成り立つことである：

- 任意の置換は，適当な互換の積として表せる（教科所の定理 6.2.1）.
- 一つの置換を互換の積として表す表し方は一通りではない．しかし，互換が**偶数個**必要か**奇数個**必要かは置換によって一意に決まる（教科所の定理 6.2.2）.

以上の証明に立ち入るのは我々の本筋からは少し逸脱するので，以上は証明抜きで認める．その上で：

定義 2.1.1 置換の符号を，その置換を互換の積で表したときに

- 偶数個の互換が必要ならば $+1$（このような置換を**偶置換**と言う）,
- 奇数個の互換が必要ならば -1（このような置換を**奇置換**と言う）,

と定義する．置換 σ の符号を $\mathrm{sgn}(\sigma)$ と書く．

以上でややこしい置換と互換の話はおしまい．行列式に戻ろう．以下で必要なのは置換，および置換の符号の定義のみと行って良い．

2.1.2 行列式の定義

これでいよいよ行列式を定義することができる（教科書 6.3 節）.

定義 2.1.2 $n\times n$ 行列 A の**行列式** $\det A$ を，

$$\det A := \sum_{\sigma} \mathrm{sgn}(\sigma)\, a_{\sigma(1)1}\, a_{\sigma(2)2}\, \ldots\, a_{\sigma(n)n} = \sum_{\sigma} \mathrm{sgn}(\sigma)\, a_{1\sigma(1)}\, a_{2\sigma(2)}\, \ldots\, a_{n\sigma(n)} \tag{2.1.4}$$

によって定義する．上の和は 1〜n の置換全体についてとる．

注意：上の定義には式が二つ書いてあるから，この二つが同じものであることはもちろん，確かめないといけない．これは改めて定理 2.2.2 として述べる．

（記号のお約束）行列 A の行列式は上の定義にあるように $\det A$ と書く．ただし，行列 A を $n\times n$ の形に書いてる場合，行列の両側の括弧を縦棒にして，その行列式を表すこともある．つまり

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{bmatrix} \quad \text{に対して} \quad \det A \quad \text{を単に} \quad \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{vmatrix} \tag{2.1.5}$$

と書くこともある．

（定義からすぐにわかる例；各自，確かめること！）

- 2×2 行列の行列式は高校でやったよね．上の定義が高校でやったものに合致することを確かめよう．
- 対角行列の行列式は簡単だ．A が $n\times n$ の対角行列の場合，$\det A = a_{11}a_{22}\ldots a_{nn}$ （対角成分の積）になる．
- 同じく，A が $n\times n$ の上半三角行列の場合，その行列式も $\det A = a_{11}a_{22}\ldots a_{nn}$ （対角成分の積）になる．

高校で 3×3 の行列式（たすきがけ，またはサラスの方法）をやった人も多いだろう．しかし，このような簡単な方法は 4×4 以上ではなりたたないので注意 — 例年，この点を強調するが，それでもテストでたすきがけをする人がいる．なお，この講義ではサラスの方法は学習しない（ので，知らなくても良い）．

やる気のある人への問題：
適当な 4×4 行列の行列式を，上の定義に基づいて（24 個の項の和を計算することで）求めてみよ．一度でもこれをやっておくと，以下で習う方法のありがたみがよくわかる．

2.2 行列式の性質と計算法 I（基本変形による）

前節では行列式を定義したが，この定義では行列の次数が高くなると非常に大変でやってられない．（$n\times n$ 行列なら $n!$ 個の置換があるわけで，そいつらについての和を計算するのは大変！）この節では行列式の満たす性質を調べることで，もっと簡単に行列式を計算することを考える．実際，計算機が行列式を計算する時も，以下で学ぶやり方（またはその発展形）を用いている．

2.2.1 行列式の性質

基本になるのは以下の定理である（教科書 6.4 節）．

定理 2.2.1 (教科書の定理 6.4.1, 6.4.2, 6.4.3) 以下の式では，左右両辺の対応する $\cdots$ のところは同じものと解釈する．（詳しくは講義で！）

- 行列の i 列と j 列を入れ替えると（$i\neq j$），行列式の符号は変わる：
$$\det[\cdots, \boldsymbol{a}_i, \cdots, \boldsymbol{a}_j, \cdots] = -\det[\cdots, \boldsymbol{a}_j, \cdots, \boldsymbol{a}_i, \cdots] \tag{2.2.1}$$
- 行列の一つの列を c 倍（c はスカラー）すると，行列式の値は c 倍になる：
$$\det[\cdots, c\boldsymbol{a}_i, \cdots] = c\,\det[\cdots, \boldsymbol{a}_i, \cdots] \tag{2.2.2}$$
- 一つの列をたすと，行列式も和になる：
$$\det[\cdots, \boldsymbol{a}_i+\boldsymbol{b}_i, \cdots] = \det[\cdots, \boldsymbol{a}_i, \cdots] + \det[\cdots, \boldsymbol{b}_i, \cdots] \tag{2.2.3}$$

（注意）

- (2.2.2) について：たった一つの列を c 倍するだけで行列式全体が c 倍になる．行列全体を c 倍すると，$n\times n$ 行列の行列式は c^n 倍になる．**ここは間違いやすいから注意！**
- (2.2.3) について：たった一つの列が足し算になってるだけで，右辺は 2 つの行列式の和になる．全ての列が足し算になってたら，2^n 個の和が出てくるはずだ．**ここも間違いやすいから注意！**
- **上の定理は「列」について述べたが,「列」をすべて「行」に読み替えても定理は成立する.** すなわち

$$\begin{vmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{j1} & a_{j2} & \cdots & a_{jn} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{j1} & a_{j2} & \cdots & a_{jn} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{vmatrix} \tag{2.2.4}$$

$$\begin{vmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ ca_{i1} & ca_{i2} & \cdots & ca_{in} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{vmatrix} = c \begin{vmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{vmatrix} \tag{2.2.5}$$

$$\begin{vmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i1}+b_{i1} & a_{i2}+b_{i2} & \cdots & a_{in}+b_{in} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ b_{i1} & b_{i2} & \cdots & b_{in} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{vmatrix} \tag{2.2.6}$$

$n\times n$ 行列 A の行と列を入れ替えたもの，つまり (i,j) 成分が a_{ji} で与えられる行列を A の**転置行列**と言い，${}^tA$ と書く．(2.1.4) は以下を意味する．

定理 2.2.2 (教科書の定理 6.4.5) 転置行列の行列式は元の行列の行列式に等しい：

$$\det(A) = \det({}^tA) \tag{2.2.7}$$

（証明）要するに，(2.1.4) の右側の等号を証明すればよい．真ん中の $\sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma)\, a_{\sigma(1)1}\, a_{\sigma(2)2}\, \ldots\, a_{\sigma(n)n}$ から出発し，$\sigma^{-1}=\tau$ （逆置換）として和を書き直す．σ についての和と τ についての和は同じ事だから，

$$\sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma)\, a_{\sigma(1)1}\, a_{\sigma(2)2}\, \ldots\, a_{\sigma(n)n} = \sum_\tau \mathrm{sgn}(\tau^{-1})\, a_{1\tau(1)}\, a_{2\tau(2)}\, \ldots\, a_{n\tau(n)} \tag{2.2.8}$$

となる（ここで右辺では a_{ij} の積を並べ替えている）．$\mathrm{sgn}(\tau^{-1}) = \mathrm{sgn}(\tau)$ に注意すると，(2.1.4) の右辺が得られる． □

これらの性質を使うと，行列式を効率よく計算することができる．その際に以下の性質も使うので掲げておく（なぜ，以下の二つの性質が成り立つのかは，上の定理 2.2.1 から出る．各自で考えておくこと）．

- ２つの列が等しい行列の行列式はゼロである．
- 一つの列のスカラー倍を他の列に加えても，行列式の値は変わらない．

（上の２つは「列」を「行」と読み替えても成立する.）

行列の積の行列式についても簡単に触れておく．この定理は教科書では 6.7 節にあるが，この位置に持ってきた方がつながりが良い．

定理 2.2.3 (教科書の定理 6.7.1) $n\times n$ 行列 A,B の積について，以下の等式が成り立つ．

$$\det(AB) = \det(A)\ \det(B) \tag{2.2.9}$$

要するに，積の行列式は行列式の積なのだ．

系 2.2.4 行列 A が正則の時,

$$\det\bigl(A^{-1}\bigr) = \frac{1}{\det(A)} \tag{2.2.10}$$

つまり，逆行列の行列式はもとの行列の行列式の逆数である.

2.2.2 行列式の計算法 I

さて，行列式をどうやって計算するか，考えてみよう．大ざっぱな指針は，行（と列）の基本変形をくり返してできるだけ簡単な形（上半三角，または対角行列）に持っていくことである．ただし，連立方程式を解くのとは違って,「ある行をスカラー倍」したり「行を入れ替え」たりしたら，行列式の値が変わってくるから注意すること.（例を使って見せた方が速いので，講義で説明する.）

行列式の計算方法について．簡単にまとめると以下の通りである.

- 行の基本変形，または列の基本変形を用いて，行列式が簡単に計算できる形に変形する．その際，**行列式の値が変わってくる**かもしれないから注意する.
- 変形先としては，すぐ下に掲げてあるどれかの形を目指す.

今までのところで既に証明でき，かつよく使う行列式の性質を列挙しておこう.（いくつかは既に述べた.）簡単のため，教科書にもならって，行列式を $\det(A)$ の代わりに $|A|$ と書く.

（1．上半三角，または下半三角）

$$\det\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \det\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = a_{11}\, a_{22} \cdots a_{nn} \tag{2.2.11}$$

（2．ある行が一つの成分以外，全部ゼロ）

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{nn} \end{vmatrix} = a_{nn} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,n-1} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} \end{vmatrix} \tag{2.2.12}$$

（3．ある行が一つの成分以外，全部ゼロ）

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,n-1} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,n-1} & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} & 0 \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{vmatrix} = a_{nn} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,n-1} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} \end{vmatrix} \tag{2.2.13}$$

以上はすべて，行列式の定義から導かれるものである．基本変形を行って行列式を計算する際，上のどれかの性質が使える形に変形することを目指す.

書くのが面倒だから，行列式の計算の具体例は黒板で説明する．各自，練習しておくように.（レポートとしても出題予定.）

2.3 行列式の計算法 II（展開による）

（この小節の内容は教科書では 6.5 節）

さて，今までのところで一応，行列式は計算できるようになった．列と行，両方の基本変形を使えるので，連立方程式を解くより簡単である場合が多い．実際の計算法としてはこれで十分とも言える．しかし，理論的興味もあり，ここでは次数の高い行列の行列式を，より低い次数の行列の行列式に関連づける方法を学習する．

この節の主要な結論を書くために，まず,「余因子」を定義する．

> $n \times n$ 行列 A を考える．A の第 i 行と第 j 列を抜き取った行列を考える（これは $(n-1)\times(n-1)$ 行列）．この $(n-1)\times(n-1)$ 行列の行列式に $\underline{(-1)^{i+j}\text{ をかけた}}$ ものを**行列** A **の** (i,j) **余因子**と呼び，α_{ij} で表す．

（注意）教科書では α_{ij} から $(-1)^{i+j}$ を取り去ったもの（つまり，行列式そのもの）を $|A_{ij}|$ と書いており，余因子は 6.7 節まででてこない．これは多分，$(-1)^{i+j}$ の因子を忘れる学生が多いことに手を焼いた著者達の工夫であろう．しかし，この書き方は標準的ではないので将来，皆さんが混乱する可能性が高い上に，$(-1)^{i+j}$ のあるのとないのと両方が出てくるのはイヤだ．そこで敢えて従来通りの記号法を初めから採用した．(ただし，教科書との対応をつけるため，$|A_{ij}|$ の表式も書いておく.）なお，余因子に α を使うと a との区別が付きにくいのではないかと思うが，教科書がこうなっているので従うことにした．

> **定理 2.3.1 (教科書の定理 6.5.1)** $n \times n$ 行列 A について，以下の等式が成り立つ．
>
> $$\text{任意の } 1 \le j \le n \text{ を固定した場合} \qquad \det A = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}\,\alpha_{ij} = \sum_{i=1}^{n} (-1)^{i+j}\,a_{ij}\,|A_{ij}| \tag{2.3.1}$$
>
> $$\text{任意の } 1 \le i \le n \text{ を固定した場合} \qquad \det A = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}\,\alpha_{ij} = \sum_{j=1}^{n} (-1)^{i+j}\,a_{ij}\,|A_{ij}| \tag{2.3.2}$$
>
> 一つ目を第 j 列に関する余因子展開，２つ目を第 i 列に関する余因子展開，と呼ぶ．

しつこいが，α_{ij} は $(n-1)\times(n-1)$ 行列の行列式である．この定理は $n \times n$ 行列の行列式を $(n-1)\times(n-1)$ 行列の行列式から帰納的に定義する式だとも思える．この意味で，この展開式はこの節の最初に述べた (c) による行列式の定義を与えているとも言える．

（注意）上の定理は行列式の計算にも使える，重要なものである．先には行列を行や列の変形を用いて簡単な形にすることを学んだ．しかし，実際に計算してみると，ある行を「たった一つの成分以外はゼロ」にすることは計算が面倒だが,「その行にはゼロでない成分が二つしかない」ところまでは簡単に持って行けたりすることもある．その場合は上の定理を使ってその行に関する展開を行っても，そんなに損ではないかもしれない．

行列式の展開に関連しては，以下の定理が応用上も大事である：

> **定理 2.3.2 (教科書の定理 6.5.2)** $n \times n$ 行列 A について，以下の等式が成り立つ．
>
> $$\text{任意の } 1 \le j,k \le n \text{ を固定した場合} \qquad \sum_{i=1}^{n} a_{ik}\,\alpha_{ij} = \delta_{kj}\,\det(A) \tag{2.3.3}$$
>
> $$\text{任意の } 1 \le i,k \le n \text{ を固定した場合} \qquad \sum_{j=1}^{n} a_{kj}\,\alpha_{ij} = \delta_{ki}\,\det(A) \tag{2.3.4}$$
>
> ここで δ_{ij} はクロネッカーのデルタで，
>
> $$\delta_{ij} \equiv \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i \ne j) \end{cases} \tag{2.3.5}$$
>
> という記号である．

註： 上の定理は，$k=j$ または $k=i$ の時には定理 2.3.1 で既に証明されている．この定理の新しさは，$k \ne j$ や

$k \neq i$ の場合にある．

さて，上の定理を読み替えると以下の定理になる．既に予告したように，この定理の結果は「固有値と固有ベクトル」で必須になるだろう．

定理 2.3.3 (教科書の定理 6.7.2) $n \times n$ 行列 A について，以下が成り立つ．

$$A \text{ が正則である} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \det A \neq 0 \tag{2.3.6}$$

更に，A の逆行列の ij 成分 $[A^{-1}]_{ij}$ は（添え字の順序に注意）：

$$\left[A^{-1}\right]_{ij} = \frac{1}{\det(A)}\,\alpha_{ji} \tag{2.3.7}$$

で与えられる．つまり，A^{-1} は A の余因子行列を $\det(A)$ で割ったものになる —— しつこいけど，添字の順序に注意．

（略証）まず，定理 2.2.3 を

$$A\,A^{-1} = I_n \tag{2.3.8}$$

の両辺に用いると，

$$\det(A)\ \det(A^{-1}) = 1 \tag{2.3.9}$$

が得られる．逆行列 $A^[-1]$ が存在する限り，$\det(A^{-1})$ は無限大ではないから，上の式から $\det(A) \neq 0$ が結論できる．つまり，A が正則の場合は $\det(A) \neq 0$ なのである．

逆に，$\det(A) \neq 0$ であれば，(2.3.7) の右辺の行列は定義できる．更に，定理 2.3.2 を読み替えれば，この行列が確かに A の逆行列であること（つまり $AA^{-1} = I_n$ であること）がわかる．よって定理は証明された． □

2.4 クラメールの公式

前節までで行列式に関してやりたいことは大体，終わった．この節では「クラメールの公式」というものを紹介して，この章を締めくくろう．

連立一次方程式

$$A\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{2.4.1}$$

を考える．ここで $A = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n]$ は $n \times n$ 行列，$\boldsymbol{b}$ は与えられた n 項列ベクトル，$\boldsymbol{x}$ は未知数の作る n 項列ベクトルである．以下では特に，A が正則行列の場合を考える．この場合，以前にも注意したように

$$\boldsymbol{x} = A^{-1}\,\boldsymbol{b} \tag{2.4.2}$$

と解くことができる（ここまでは復習）．

この節ではこれを行列式を使って書く，「クラメールの公式」を考える．

定理 2.4.1 (クラメールの公式，教科書の定理 6.6.1)
A が正則の時，連立方程式 (2.4.1) の解 (2.4.2) は，以下の形に書ける：

$$x_j = \frac{1}{|A|}\ \det[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{j-1}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{a}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_n] = \frac{\det[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{j-1}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{a}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_n]}{\det[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{j-1}, \boldsymbol{a}_j, \boldsymbol{a}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_n]} \tag{2.4.3}$$

要するに，x_j の表式は２つの行列式の比で与えられる．一つの行列式（分母）は，$\det(A)$ そのものである．一方，分子は分母にでてくる行列 A において，第 j 列を $\boldsymbol{b}$ で置き換えたものの行列式になっている．

(証明)

(2.4.2) は

$$\boldsymbol{b} = x_1\boldsymbol{a}_1 + x_2\boldsymbol{a}_2 + \ldots + x_n\boldsymbol{a}_n \tag{2.4.4}$$

と書けることに注意すると分子の行列式は

$$\det[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{j-1}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{a}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_n] = \det[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{j-1}, x_1\boldsymbol{a}_1 + x_2\boldsymbol{a}_2 + \ldots + x_n\boldsymbol{a}_n, \boldsymbol{a}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_n]$$

となる．この右辺において行列式の性質をつかってやると

$$\begin{aligned} &= x_1 \det[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{j-1}, \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_n] + x_2 \det[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{j-1}, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_n] \\ &\quad + \ldots + x_n \det[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{j-1}, \boldsymbol{a}_n, \boldsymbol{a}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_n] \end{aligned}$$

と変形できる．ところが，$\boldsymbol{a}_j$ が入っている項以外は（２つの列が比例するので）ゼロになり，結局，

$$= x_j \det[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{j-1}, \boldsymbol{a}_j, \boldsymbol{a}_{j+1}, \ldots, \boldsymbol{a}_n] = x_j \det A \tag{2.4.5}$$

となる．両辺を $\det A$ で割るとできあがり． □

実際に連立方程式を解く場合，クラメールの公式を使うことはあまり無い（計算量が膨大になってしまいがちだから —— 掃き出し法のほうが余程簡単である）．しかし，ある種の理論的な解析を行う場合，クラメールの公式が役立つことがある．

3　固有値と固有ベクトル

（物理からの動機付け）

これから，全く新しい概念「固有値と固有ベクトル」について学ぶ．この題材にはもちろん，以下に述べるような線型代数として重要な役割はある．しかし，物理学科の学生としての皆さんには，それよりもまずは量子力学における固有値と固有ベクトルの役割の方が大切だろう．かいつまんでいうと，量子力学においては[2]

- すべての物理的状態はある**線型空間のベクトル**で表せる．
- すべての物理量（観測するということ）はその線型空間での適当な**線型写像**で表される．
- 物事を観測した結果（測定値）は，その観測量を表す**線型写像の固有値**になる（例：物理で多分一番重要な観測値 —— エネルギー —— はハミルトニアンと呼ばれる線型写像の固有値である）

という事情があるのだ．(これだけでは何のことかさっぱりわからんだろう．近日中に希望者向けの補講を入れるかもしれない．) ともかく大事なのは，物理屋にとって一番重要であるはずの観測量が（よく訳のわからない）線型写像の「固有値」というものになってしまうことだ．固有値（と固有ベクトル）の概念がよくわかっていないと，ただでさえわかりにくい量子力学を理解することはまず不可能だ．という訳で，物理の学生さんである皆さんには,「固有値と固有ベクトル」を理解すべき重要な動機付けがあるのだ．

（線型代数独自の動機付け）

量子力学に頼らない動機付けもしておく．春学期に，線型写像について見た．特に「線型性」について学び，また，線型写像は（基底を定めることで）行列でかけることも見た．更に，線型写像を何回もやることは行列を何回もかけること，線型写像の逆写像は逆行列で表されること，も見た．

ところが，ある線型写像を何回もやった結果を求めるのは，一般に大変だ．表現行列をそれだけの回数，かける必要があるが，一般に行列の n 乗の計算は非常に大変だからである．例えば,

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

を考える．$A^n\boldsymbol{b}$ を（例えば $n = 1000$）計算したいと思った場合，闇雲にかけるのはなかなか大変だ．ところが,

$$\boldsymbol{b}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{b}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

に対しては，$A^n\boldsymbol{b}_i$ は（$i = 1, 2$）簡単に計算できる．というのも,

$$A\boldsymbol{b}_1 = 3\boldsymbol{b}_1, \qquad A\boldsymbol{b}_2 = -\boldsymbol{b}_2$$

であって，A をかけた結果が自分自身（の定数倍）なのだ．だから

$$A^n\boldsymbol{b}_1 = 3^n\boldsymbol{b}_1, \qquad A^n\boldsymbol{b}_2 = (-1)^n\boldsymbol{b}_2$$

と簡単に計算できる．更に，この事実と，もともとの $\boldsymbol{b}$ を

$$\boldsymbol{b} = \frac{3}{2}\boldsymbol{b}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{b}_2$$

と表せることから，$A^n\boldsymbol{b}$ も

$$A^n\boldsymbol{b} = \frac{3}{2}\,A^n\boldsymbol{b}_1 + \frac{1}{2}\,A^n\boldsymbol{b}_2 = \frac{3^{n+1}}{2}\boldsymbol{b}_1 + \frac{(-1)^n}{2}\boldsymbol{b}_2 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 3^{n+1} + (-1)^n \\ 3^{n+1} - (-1)^n \end{bmatrix}$$

と簡単に求められる．当初，ほとんど不可能と思われた $A^n\boldsymbol{b}$ が計算できてしまった．

以上を振り返ると，重要なのは **A をかけられても自分自身の定数倍になる**ような，そんな特別なベクトル（上の例では $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2$）だとわかる．このようなベクトルが見つかれば[3] これらをもとに上のように議論して，$A^n\boldsymbol{b}$ が計算できるわけだ．

[2]以下はかなりいい加減な書き方です．ホンのサワリだと思って読んでください

[3]実際にはこのようなベクトルが十分にたくさん（線型空間の基底をなすくらい）見つかれば

更に，ベクトル $\boldsymbol{x}$ を $A\boldsymbol{x}$ に変換する線型写像を一回だけ行う場合でも，その結果はベクトル $\boldsymbol{x}$ ごとに違ったものになる（教科書 p.152 の図 18, 図 19 参照）が，固有ベクトルはこれらの図でベクトルの向きが変わらない直線として現れる．このような事情から，**線型写像や行列によるかけ算をより良く理解するため**には，その固有値と固有ベクトルの情報が非常に有効である．これが線型代数において，固有値と固有ベクトルを学修する理由である．

（さらに物理からの動機付け）

行列の n 乗なんか物理ではいらない，と思った人は考えを改めよう．量子力学では，時間発展が「行列の指数関数」で与えられる．つまり，時刻 $t=0$ での状態を表すベクトルを $\boldsymbol{x}(0)$ とし，ハミルトニアン（エネルギーを表す行列みたいなものと思えば良い）を H とすると，時刻 t での状態は以下のベクトル $\boldsymbol{x}(0)$ で与えられるのだ：

$$\boldsymbol{x}(t)=e^{-itH}\boldsymbol{x}(0) \qquad \text{where} \qquad e^{-itH}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-it)^n\,H^n}{n!}. \tag{3.0.6}$$

つまり，上のベクトルと行列の積を計算するには，行列 H の n 乗を，任意の（いくらでも大きな）n について計算しなければばならない．何らかの良い方法がなければ、こんな計算は不可能だが，対角化は正にその方法を与えてくれる訳だ．このように，固有値や対角化というのは，量子力学には必須の概念なのである．

お断り：いままで，皆さんが複素数に慣れていないだろう事を考えて，スカラーは主に実数としてきた．また，ベクトルもその成分は実数としてきた．しかし，固有値や固有ベクトルを考える場合には，これらを複素数まで拡げておく方が見通しが良い．従って，以下で特に断らない限りは,「**スカラーは複素数**」「**数ベクトルや行列の成分も複素数**」を許すものとする．

3.1 固有値と固有ベクトル

定義 3.1.1 (行列の固有値と固有ベクトル) $n\times n$ 正方行列 A に対して，

$$A\boldsymbol{v}=\alpha\,\boldsymbol{v} \tag{3.1.1}$$

となるような複素数 α と ゼロベクトルでない n 項列ベクトル $\boldsymbol{v}$ とがある場合（$A\boldsymbol{v}$ は行列とベクトルのかけ算を表す），α を A の**固有値**，$\boldsymbol{v}$ を A の（α に対する）**固有ベクトル**と言う．

上の例では，A の固有値は 3 と 1，対応する固有ベクトルはそれぞれ $\boldsymbol{b}_1$ と $\boldsymbol{b}_2$ であった．

(注意)

- $\boldsymbol{v}$ が ゼロベクトルでない のは非常に重要である．と言うのは，任意のスカラー α に対して，$A\mathbf{0}=\alpha\mathbf{0}$ となってしまうが，これは全然面白くないので，$\mathbf{0}$ は固有ベクトルとはいわないから．$\boldsymbol{v}\neq\mathbf{0}$ となるためにこそ，α は特別の値を取る必要があるのだ．
- $\boldsymbol{v}$ が固有ベクトルなら，$k\boldsymbol{v}$ も固有ベクトルだ（ただし $k\neq 0$）．この意味で，固有ベクトルは最低限，定数倍だけの無限個の自由度がある．ただし，この自由度はショウモナイものだから，普通は気にしない（「固有ベクトルを求めよ」と言われても，k の自由度まで答える必要はない）．それより大きな固有ベクトルの自由度については，後の「固有空間」のところで述べる．

上の定義を線型写像に拡張しておく．

定義 3.1.2 (線型写像の固有値と固有ベクトル) 線型空間 X と線型写像 $f:X\to X$ が与えられているとき，

$$f(\boldsymbol{v})=\alpha\,\boldsymbol{v} \tag{3.1.2}$$

となるような複素数 α と ゼロベクトルでない ベクトル $\boldsymbol{v}\in X$ とがある場合，α を f の**固有値**，$\boldsymbol{v}$ を A の（α に対する）**固有ベクトル**と言う．

固有ベクトルの効用は後で集中的にやる．(この節に入る前の例でも少し見た.) まずは，どのように固有値や固有ベクトルを求めたらよいかを考えよう．

（まず注意）春学期に,「線型写像はその表現行列を用いて書ける」ことを見た．このことを用いれば，線型写像の固有ベクトルを求めるには，その表現行列の固有ベクトルを求め，それを焼き直せば良いことがわかる．従って，以下では行列の固有ベクトルだけを扱うが，上の手順により線型写像の固有ベクトルも扱えることに注意してほしい．

そこで，定義 3.1.1 に戻る．固有ベクトルの定義の式は

$$(A - \alpha\, I_n)\, \boldsymbol{v} = \mathbf{0} \tag{3.1.3}$$

と書ける（I_n は $n \times n$ 単位行列）．これは n 連立方程式だが，今はこの方程式の ゼロでない 解 $\boldsymbol{v}$ を求めたい（$\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$ が存在するような α を見つけたい）わけだ．ゼロでない解が存在するための条件はこれまでにやった．すなわち，

- 行列 $A - \alpha\, I_n$ が正則行列なら，$\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$ の解しかない．
- 行列 $A - \alpha\, I_n$ が 正則でない なら，$\boldsymbol{v} \neq \mathbf{0}$ な解が存在する

訳だ．つまり，固有値 α の満たすべき必要十分条件は,「行列 $A - \alpha\, I_n$ が 正則でない こと」なのである．

さらに,「行列 A が正則でないことと，$\det A = 0$ は同値である」ことも最近，学修した．そこで，上の固有値の必要十分条件は以下のように書き換えられる：

定理 3.1.3 (固有値の必要十分条件) 複素数 α が，$n \times n$ 行列 A の固有値になっているための必要十分条件は

$$\det(A - \alpha\, I_n) = 0 \tag{3.1.4}$$

である．

これで固有値 α をすべて見つけることができる．α さえ求めれば，あとは連立方程式 (3.1.3) を解くことで，$\boldsymbol{v}$ も見つけられる —— 固有値と固有ベクトルを求めるプログラムが完成した．しつこくまとめると：

1. (3.1.4) を解いて，固有値 α を求める（一つとは限らない）
2. それぞれの α に対して (3.1.3) を解いて，$\boldsymbol{v}$ を求める（これも一つとは限らない）

と言うわけだ．計算手順としては簡単でしょ？

（注意）固有値を一つ見つけたとき，それに対する固有ベクトルは何通りもあり得る（ここでは定数倍の自由度以外の「何通りも」を言っている）．例えば，$A = I_n$ （単位行列）の場合，固有値は 1 しかないが，独立な固有ベクトルは $\boldsymbol{e}_i$ （$i = 1, 2, \ldots, n$，標準基底）の n 個ある．この自由度についてはすぐ後で「固有空間」としてもっと学習する．

（用語の定義）変数 t の多項式としてみた $\Delta_A(t) = \det(tI_n - A)$ を行列 A の**固有多項式**という．(A が $n \times n$ 行列のとき，$\Delta_A(t)$ は t の n 次多項式で，かつ，t^n の係数は 1 である —— なぜかは各自で納得すること.) また，固有値を求めるときに解くべき方程式 $\Delta_A(t) = 0$ を行列 A の**固有方程式**という．

さて，t の n 次の多項式は一般に複素数の根 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ を用いて因数分解できる．$\Delta_A(t)$ の t^n の係数が 1 であることも考えると，

$$\Delta_A(t) = (t - \lambda_1)(t - \lambda_2) \cdots (t - \lambda_n) \tag{3.1.5}$$

と書けるはずだ．ただし，ここで λ_i のいくつかは互いに等しいかも知れない（重解，重根）．λ_1 に等しい λ_i が k 個あるとき，λ_1 は k-重根（λ_1 の重複度は k）という[4]．各根の重複度をすべて加えると当然，n になっている．

（例１）$A = I_n$（$n \times n$ の単位行列）の場合．

$$\Delta_{I_n}(t) = \det(t\, I_n - I_n) = \det\bigl((t-1)I_n\bigr) = (t-1)^n\ \det(I_n) = (t-1)^n \tag{3.1.6}$$

[4] このような用語は高校で習ったかもしれない

なので，固有値は $t=1$ のみ（n 重根）．対応する $\boldsymbol{v}$ の方程式はなんと

$$O\boldsymbol{v}=\boldsymbol{0} \qquad \text{つまり} \qquad \boldsymbol{0}=\boldsymbol{0} \tag{3.1.7}$$

となってしまい（O はすべての成分がゼロの行列），全く $\boldsymbol{v}$ に関しての制限がつかない．(まあ，これは任意のベクトル $\boldsymbol{v}$ に対して $I_n\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}$ であることを思えばアタリマエだ)．という訳で，単位行列の固有ベクトルは「ゼロでない任意のベクトル」なのである．

（例２）A が $n\times n$ の対角行列で，対角成分が $\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_n$ の時（簡単のため，$i\neq j$ なら $\alpha_i\neq\alpha_j$ とする）．

$$\det(A-tI_n)=(\alpha_1-t)(\alpha_2-t)\cdots(\alpha_n-t) \tag{3.1.8}$$

となるので，α_j（$j=1,2,\ldots,n$）が固有値（すべて単根）．α_j に対応する固有ベクトルは $\boldsymbol{e}_j$ の（ゼロでない）定数倍．

（例３）始めに例に挙げた 2×2 行列 A では，固有方程式は

$$0=t^2-4t+3 \tag{3.1.9}$$

となって，固有値は $1,3$．それぞれの固有ベクトルを求めると，$\boldsymbol{b}_2,\boldsymbol{b}_1$ が得られる．

（これより複雑な例は，黒板で説明しよう.）

固有空間

α が $n\times n$ 行列 A の固有値であるとき，α に対する A の固有ベクトルに２本以上，独立なものが存在する場合もある．このような場合をうまく扱うため，

α に対する A の固有ベクトルの全体とゼロベクトル，つまり $A\boldsymbol{v}=\alpha\boldsymbol{v}$ なるベクトル $\boldsymbol{v}$ の全体

を W_α と書くことにする．零ベクトルは固有ベクトルではない，と散々強調したばかりだが，W_α の中にはゼロベクトルも入れた．零ベクトルを W_α の元に含めたのは，以下に述べる「W_α は，$\mathbb{R}^n$ の部分空間」を正しくするため．

定理 3.1.4 (固有空間) うえで定義した W_α は，$\mathbb{R}^n$ の部分空間である．さらに，W_α の元に行列 A をかけた結果も W_α の元になっている．

上の定理の前半の性質から，W_α を「A の，固有値 α に対する**固有空間**」と言う．また，定理の後半の性質（A をかけても部分空間に入ったまま）を「W_α は A の**不変部分空間**である」と言う．

（注）行列 A の固有値を α とすると，行列 A によって W_α の次元が１より大きいことも往々にして起こる．一番簡単な例は $A=I_n$（単位行列）の場合だ．この場合，固有値は１だけだが，固有ベクトルとしては ゼロでない任意のベクトルがとれた．このような事情から，問題としても「行列 A の固有値 α に対応する固有ベクトルは何？」という訊き方は，答え方が無限とおりありうるので，あまり格好よくない．そこでより簡単に「A の，固有値 α に対する**固有空間**は何？」と訊くことが多い．このように訊かれたら，上の W_α を答えれば良い．(また，W_α の基底を一組，答えても良い.) A が単位行列の場合，その固有空間は $\mathbb{R}^n$ 全体だ．

固有空間が不変部分空間になっていること，が以下で見る「行列の対角化」に本質的な役割を果たす．

――――――――――――――――（少し概念，書き方などについての補足）――――――――――――――――

過去の経験から,「固有ベクトル」「固有空間」「固有空間の基底」の３つをかなり混同するようなので，注意しておきます．

１．まず，固有ベクトルとは，定義通り，$A\boldsymbol{x}=\alpha\boldsymbol{x}$ となる，**ゼロでない**ベクトルです．だから，正しい用語法は，

$$A\text{ の固有値 }1\text{ に対応する固有ベクトルは} \qquad k\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix} \qquad \text{ただし }k\neq 0 \tag{3.1.10}$$

とか,

$$B \text{ の固有値 } 2 \text{ に対応する固有ベクトルは} \qquad k\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix}+\ell\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix} \qquad \text{ただし } (k,\ell)\neq(0,0) \tag{3.1.11}$$

などとなります.

２．次に,（固有値 α に対する）固有空間とは，α に対する固有ベクトルの全体に，ゼロベクトルを追加したもの，です．だから，上の例なら

$$A \text{ の固有値 } 1 \text{ に対する固有空間は} \qquad W_1=\left\{k\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix}\,\middle|\,k\in\mathbb{C}\right\} \tag{3.1.12}$$

とか

$$B \text{ の固有値 } 2 \text{ に対する固有空間は} \qquad W_2=\left\{k\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix}+\ell\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}\,\middle|\,k,\ell\in\mathbb{C}\right\} \tag{3.1.13}$$

となります.「k,ℓ がゼロでない」条件はないことに再度，注意.

３．最後に，固有空間の基底とは，上の固有空間を張る，一次独立なベクトルのことですから，

$$A \text{ の固有値 } 1 \text{ に対する固有空間 } W_1 \text{ の基底は} \qquad \left\langle\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix}\right\rangle \tag{3.1.14}$$

とか

$$B \text{ の固有値 } 2 \text{ に対する固有空間 } W_2 \text{ の基底は} \qquad \left\langle\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix},\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}\right\rangle \tag{3.1.15}$$

となります.

—————— では，本題に戻る ——————

固有値と固有ベクトルの求め方についてはこれまでに話は終わっているが，もう少し，$\det(\alpha I_n - A)=0$ の解の重複度と固有値の関係を見ておきたい.

$\det(\alpha I_n - A)=0$ は α の n 次式であるので，複素数の範囲では重複度も含めて n 個の解を持つ．これは

$$\det(\alpha I_n - A)=(\alpha-\alpha_1)^{n_1}(\alpha-\alpha_2)^{n_2}\ldots(\alpha-\alpha_k)^{n_k} \tag{3.1.16}$$

と因数分解されることを意味している（k は 1 以上 n 以下の整数，$n_1+n_2+\ldots+n_k=n$）．このとき，以下が成り立つ.

定理 3.1.5 (固有ベクトルについての補足) $n\times n$ 行列 A の固有値と固有ベクトルについては，以下の性質がなりたつ.

1. $\det(\alpha I_n - A)=0$ の解のそれぞれに対して，少なくとも一つの固有ベクトルが存在する．すなわち，$\det(\alpha I_n - A)=0$ の解は定義通りの意味で固有値である.
2. 異なる固有値に属する固有ベクトルは一次独立である.
3. ある固有値 α_i の重複度を n_i とするとき，α_i の固有空間の次元は n_i 以下である.

証明：

1. $\det(\alpha I_n - A)=0$ の解の一つを α_1 とすると，行列 $\alpha_1 I_n - A$ は正則ではない．よって，$(\alpha_1 I_n - A)\boldsymbol{x}=\mathbf{0}$ のゼロベクトルでない解 $\boldsymbol{x}$ が存在する．この $\boldsymbol{x}$ が正に固有ベクトルの一つである.（これは前回もやった.）

2. $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_\ell$ を異なる固有値，対応する固有ベクトルを $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_\ell$ としよう．

$$k_1\boldsymbol{x}_1 + k_2\boldsymbol{x}_2 + \ldots + k_\ell\boldsymbol{x}_\ell = \mathbf{0} \tag{3.1.17}$$

を解いたら $k_i \equiv 0$ $(i = 1, 2, \ldots, \ell)$ となることを言えばよい．そのためには (3.1.17) の両辺に A を何回もかけるのだ．$A\boldsymbol{x}_i = \alpha\boldsymbol{x}_i$ を使うと，A を一回かけて

$$k_1\alpha_1\boldsymbol{x}_1 + k_2\alpha_2\boldsymbol{x}_2 + \ldots + k_\ell\alpha_\ell\boldsymbol{x}_\ell = \mathbf{0} \tag{3.1.18}$$

となる．２回，３回，とかけていくと，結局

$$k_1\alpha_1^m\boldsymbol{x}_1 + k_2\alpha_2^m\boldsymbol{x}_2 + \ldots + k_\ell\alpha_\ell^m\boldsymbol{x}_\ell = \mathbf{0} \tag{3.1.19}$$

が任意の非負の整数 m について成り立つことになる．これらの連立方程式の解は $k_1 = k_2 = \ldots = 0$ しかないことは，やってみればわかる.（正直,「やってみる」のはちと大変で，ℓ についての数学的帰納法を使うのが一番簡単だろう．うまく行の基本変形をやってみればよい.）

3. この証明は「行列の三角化」を使うと簡単なので，後回しにする.（ここで何とか証明してみようと少し考えたのだが，結局は「行列の三角化」の証明を部分的に行うようなものしか思いつかなかった.） □

3.2 行列の対角化（まずは計算操作として）

前節までで，行列の固有値と固有ベクトルに関する基本的な事柄を学び，それらを計算できるようになった（はずである）．ここではその続きとして,「行列の対角化」を取り扱う．大して難しい概念ではないが，取っつきやすさを考えて２段階で行う．まずは，以下の単純な計算問題を考えよう．

質問 1： $n \times n$ 行列 A が与えられたとき，正則な $n \times n$ 行列 P を探してきて，

$$B = P^{-1}AP \quad \text{が対角行列に} \tag{3.2.1}$$

なるようにせよ.（A に対してこのような P, B を求めることを「A **を対角化する**」と言う.）

すぐ後で見るように，このような行列 P が存在しない場合もあるので，上の問いはあくまで「可能ならばそのような P を求めよ」と解釈すべきものだ．この問いの背後には「線型写像の表現行列が，基底の変換に際してどう振る舞うか」が隠れているが，それは後で考える事にし，まずは計算問題として上の問いを扱おう．

上の問いの動機付け：

計算問題としてこのような問いが出るのは，A^{100} などを計算したい場合である．もし，A が 10×10 の行列で，成分にゼロのものがないとすると，A^2 を計算するだけで大変だ．ましてや，A^{100} などはほとんど不可能．

ところが，上のような P, B があれば，A^{100} も簡単に計算できる．つまり，$A = PBP^{-1}$ であるから，

$$A^2 = (PBP^{-1})(PBP^{-1}) = PB^2P^{-1}, \quad A^3 = (PB^2P^{-1})(PBP^{-1}) = PB^3P^{-1}, \quad A^\ell = PB^\ell P^{-1} \tag{3.2.2}$$

が成り立つ（ℓ は正の整数）．ここで B が対角行列なら，B^ℓ も対角行列で，すぐに計算できる．つまり

$$(B)_{ij} = b_i\,\delta_{ij} \quad \text{なら，} \quad (B^\ell)_{ij} = (b_i)^\ell\,\delta_{ij} \tag{3.2.3}$$

なのだ（対角成分がそれぞれ ℓ 乗されるだけ）．だから，(3.2.2) の計算も，対角行列である B^ℓ の両側から P と P^{-1} をかければよいので，何乗であっても計算できる．

実はこれは「行列の指数関数」にも使える．実際，上のことから

$$e^A = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{A^\ell}{\ell!} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{PB^\ell P^{-1}}{\ell!} = P\Big(\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{B^\ell}{\ell!}\Big)P^{-1} = P\, e^B\, P^{-1} \tag{3.2.4}$$

となるが，対角行列の ℓ 乗は各対角成分を ℓ 乗するだけだから，

$$B = \begin{bmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha_2 & 0 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \alpha_n \end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \quad B^\ell = \begin{bmatrix} \alpha_1^\ell & 0 & 0\dots & 0 & \\ 0 & \alpha_2^\ell & 0\dots & 0 & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \alpha_n^\ell \end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \quad e^B = \begin{bmatrix} e^{\alpha_1} & 0 & 0\dots & 0 & \\ 0 & e^{\alpha_2} & 0\dots & 0 & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & 0 & e^{\alpha_n} \end{bmatrix} \tag{3.2.5}$$

のように e^B は計算できる．となれば，(3.2.4) を用いれば，e^A も計算できる．これで量子力学の時間発展の問題が解けることになる[5]．

と言うわけで，A^{100} や e^A を計算したいような場合，問い 1 の P, B が見つかるか否かでは大変な違いになる．この意味で，行列の対角化は実用上も非常に大事なのである．

P, B の見つけ方

さて，与えられた A に対して，どのようにして P, B を見つけたらよいか，考えよう．天下りだが答えを言ってしまうと，以下のようになる．

> **定理 3.2.1 (対角化その 1)** 与えられた $n\times n$ 行列 A が対角化できる必要十分条件は，A が丁度 n 本の一次独立な固有ベクトルを持つことである．このとき，A の独立な固有ベクトルを $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_n$ とすると（対応する固有値は $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$），(3.2.1) の行列 P, B は以下のようになる：
>
> $$P = (\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_n), \qquad B \text{ は対角成分が } \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n \text{ である対角行列} \tag{3.2.6}$$

（注意）上の $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ の中には互いに等しいものがあっても良い．同じ固有値に 2 つ以上の独立な固有ベクトルが存在することがあるので，これは十分に可能である．

証明：

十分条件（n 本の独立な固有ベクトルを持つならば対角化可能）は単なる計算だから，ここから始める．

$$A\,\boldsymbol{v}_j = \alpha_j\,\boldsymbol{v}_j \qquad (j = 1, 2, \dots, n) \tag{3.2.7}$$

である．定理通りに P を作って，(1) P は正則であること，(2) $PB = AP$ が成り立つこと，を示せばよい．($PB = AP$ の左から P^{-1} をかければ対角化の式になるから証明終わり.) さて，(1)，(2) の証明は...

(1) P の各列は n 個の独立な縦ベクトルからできている．このような行列が正則であるのは，春学期に既に見た（n 本独立 $\Longleftrightarrow$ 階数が n $\Longleftrightarrow$ 正則）．

(2) $PB = AP$ について：単なる計算だ．P, B の定義 (3.2.6) から，

$$AP = (A\boldsymbol{v}_1, A\boldsymbol{v}_2, \dots, A\boldsymbol{v}_n) = (\alpha_1\boldsymbol{v}_1, \alpha_2\boldsymbol{v}_2, \dots, \alpha_n\boldsymbol{v}_n) = PB \tag{3.2.8}$$

が成り立って，両者は等しい．よって十分条件であることは証明された．

では必要条件（対角化可能なら n 本の独立な固有ベクトル）の証明．

正則行列 P と対角行列 B があって，$PB = AP$ だったとしよう．この両辺の j 列目は，行列のかけ算の定義（および，B が対角行列であること）を用いて

$$A\,\boldsymbol{v}_j = \alpha_j\,\boldsymbol{v}_j \tag{3.2.9}$$

[5]実のところ，実際に量子力学で解析を行う場合，このように時間発展の演算子 e^{-itH} を具体的に計算することはそれほどは多くない（というより，これを計算したいのだが，H の対角化が具体的に実行できず，対角化も出来ないことが多い．この意味で，ここで述べたことはあくまで理想的な場合の解析なのではあるが，「原理的にはこういうことをやりたい」ことをしっかり押さえておくことは非常に大事である

になっている．これは $\boldsymbol{v}_j \neq \mathbf{0}$ ならば，$\boldsymbol{v}_j$ が A の固有ベクトルであることを主張している．ところで，P は正則行列だから，各列 $\boldsymbol{v}_j$ は独立であり，特に，ゼロベクトルではあり得ない．従って，$j = 1, 2, \ldots, n$ に関して，$\boldsymbol{v}_j$ は A の固有ベクトルであり，かつこれらは独立だ．つまり，A は独立な固有ベクトルを n 本もつ．これで必要条件も証明された． □

系 3.2.2
(i) 行列 A が対角化できる必要十分条件は，A の固有値を α_i，その重複度を n_i，対応する固有空間を W_i と書くときに（$i = 1, 2, \ldots, k$），

$$\dim(W_i) = n_i \qquad (i = 1, 2, \ldots, k) \tag{3.2.10}$$

が成り立つことである．
(ii) $n \times n$ 行列 A が n 個の異なる固有値を持てば，A は対角化可能である（対角化可能の十分条件；決して必要条件ではないことに十分に注意のこと）．

証明：
(i) $n \times n$ 行列 A の対角化可能の必要十分条件は A が n 本の一次独立な固有ベクトルを持つことであった（定理 3.2.1）．しかし，定理 3.1.5 の 3 から，各固有値 α_i は高々n_i 個の独立な固有ベクトルしか持てない．$\sum_i n_i = n$ であるから，独立な固有ベクトルが n 本あるためには，α_i が n_i 本の独立な固有ベクトルを持つことが必要である．

逆に，α_i が n_i 本の独立な固有ベクトルを持てば，これらを集めてくればちょうど $\sum_i n_i = n$ 本の独立な固有ベクトルがあることになって，十分でもある（ここで定理 3.1.5 の 2 で示した，異なる固有値に属する固有ベクトルは独立であることを用いた）．

(ii) 定理 3.1.5 の 1 から，A は n 本の固有ベクトルを持つ．しかし，定理 3.1.5 の 2 によって，この n 本は独立である．従って，定理 3.2.1 の条件を満たすので，A は対角化可能． □

上の定理や系は，ははなはだ不完全である．定理の証明を見ればわかるように，定理の主張自身がほとんど「アタリマエ」な感じである．その上，どんな行列に対して「n 本の独立な固有ベクトルを持つ」のか，その判定条件が与えられていない．従って現時点では各行列について固有ベクトルをすべて求める以外，判定手段がない．これについてはもっと良い判定条件（ただし，十分条件）を，今学期の最後の方で与えるであろう．

3.3 行列の三角化

今まで行列が対角化できる必要十分条件を見てきたが，世の中には対角化できない行列も多数，存在する．例えば $\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$．このような行列が対角化できないことは今までの必要十分条件に照らせばわかる（十分な数の独立な固有ベクトルがない！）．では，対角化できない行列は <u>どのくらいまで対角に近く</u> できるのだろうか？より正確には

対角化できない $n \times n$ 行列 A に対して正則行列 P を探し，$P^{-1}AP$ をできるだけ対角形に近くせよ

という問題を考えたい．勿論「できるだけ近く」と言うのは主観的な言葉であるが，解答を見れば納得してもらえると思う．この問いに対する完全な解答（Jordan 標準型）は次小節で与えるが，それはなかなか大変で，すべてを説明することはできないだろう．この小節ではそれより簡単，しかし不完全な解答を与える．

定理 3.3.1 (行列の三角化；教科書の定理 7.3.1) 任意の $n \times n$ 行列 A は，「三角化」できる．つまり適当に正則行列 P を選んで $P^{-1}AP$ を上半三角行列にできる．

言うまでもないが，対角行列は上半三角行列の一種であるから，上の定理は対角化可能な場合を（ショウモナイ形で）カバーしている．

この定理の証明は n についての帰納法で行うのが普通だが，なかなかややこしいので，講義では省略する（教科書を参照）．ここではむしろ，この定理を認めて何が言えるか，その副産物に注目したい．

まず，$P^{-1}AP = B$ が上半三角の場合，その対角線上には A の固有値がその重複度の回数だけ出ていることに注意しよう．なぜなら：$\det(\alpha I_n - A) = \det(\alpha I_n - B)$ なので，$\det(\alpha I_n - A) = 0$ と $\det(\alpha I_n - B) = 0$ は同値であるから．（上半三角行列の行列式はその対角成分の積だったことを思い出そう）．

これを使って，定理 3.1.5 の 3 の証明ができる．α_i を重複度 n_i の固有値だとし，固有空間を求めるために

$$\bigl(\alpha_i\, I_n - A\bigr)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \tag{3.3.1}$$

を解いてみる．このまま解くのは難しいから，A を上半三角にする行列 P を使って，$\boldsymbol{y} = P^{-1}\boldsymbol{x}$ と変数変換してやると，上のは

$$\bigl(\alpha_i\, I_n - B\bigr)\, \boldsymbol{y} = \boldsymbol{0} \tag{3.3.2}$$

と同値になる．このような $\boldsymbol{y}$ の作る空間の次元を知りたいわけだ．

前期にやったことから，この次元は $n - \mathrm{rank}(\alpha_i\, I_n - B)$ であるとわかるので，行列 $\alpha_i\, I_n - B$ の階数を求めたい．さて，$\alpha_i\, I_n - B$ の対角線上には丁度 n_i 個だけのゼロが並んでおり，かつこの行列が上半三角であるから，この行列の階数は少なくとも $(n - n_i)$ だけはある．（基本変形してゼロにしていこうと思っても対角線上にある $(n - n_i)$ 個のゼロでない数を消すことはできないから．）従って，

$$\dim(W_i) = n - \mathrm{rank}(\alpha_i\, I_n - B) \le n_i \tag{3.3.3}$$

となる． □

さて，x の多項式 $f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_m x^m$ と $n \times n$ 正方行列 A が与えられたとき，x のところに A を代入して

$$f(A) = a_0 I_n + a_1 A + a_2 A^2 + \ldots + a_m A^m$$

を定義することができる（I_n は $n \times n$ の単位行列）．上の三角化の定理を使って，以下のような性質を証明できる．これらは主に「理論的」な興味のものだが，将来役に立つかもしれない．

定理 3.3.2 (フロベニウスの定理) $n \times n$ 行列 A の固有値の一つが λ，対応する固有ベクトルが $\boldsymbol{p}$ のとき，$f(A)$ の固有値の一つは $f(\lambda)$，対応する固有ベクトルは $\boldsymbol{p}$ となる．

定理 3.3.3 (Cayley-Hamilton の定理；教科書の定理 7.3.2) $n \times n$ 行列 A の固有多項式を $\phi_A(\lambda) = \det(A - \lambda I_n)$ と書くと，$\phi_A(A) = 0$ である（右辺は $n \times n$ ゼロ行列）．

3.4 Jordan の標準型

$P^{-1}AP$ についての最後の小節である．前節での問いに対する完全な答えを与えるが，まず言葉の準備をする．

定義 3.4.1 (Jordan 細胞と Jordan 行列) 以下の形の $n \times n$ 行列を $J_n(\lambda)$ と書いて，(固有値 λ を持つ）n-次 Jordan 細胞とよぶ．見てのとおり，対角線上には λ，その一つ上には 1，残りはすべてゼロ，という形である．

$$J_n(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & 0 & \lambda & 1 & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \lambda & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \lambda \end{pmatrix} \tag{3.4.1}$$

対角線上にいろいろな次元と固有値をもつ Jordan 細胞が並んだ形の行列，つまり，

$$\begin{pmatrix} J_{n_1}(\lambda_1) & & & & & \\ & J_{n_2}(\lambda_2) & & & & \\ & & J_{n_3}(\lambda_3) & & & \\ & & & \cdot & & \\ & & & & \cdot & \\ & & & & & J_{n_k}(\lambda_k) \end{pmatrix} \tag{3.4.2}$$

の形の行列を Jordan 行列という（行列中，何も書いていないところは全部ゼロ）．

この定義の下で以下が成り立つ：

定理 3.4.2 (Jordan 標準形への変換；教科書の定理 7.4.3) 任意の $n \times n$ 行列 A は適当に正則行列 P を選ぶことにより，$P^{-1}AP$ を Jordan 行列の形にできる．結果として出てくる Jordan 行列は Jordan 細胞の並べ方を除いて一意に決まる．

つまり，すべての行列は Jordan 行列の形にまでは持っていけるわけだ．この定理の証明はなかなか大変だし，時間もないので，省略する．将来，ジョルダンの標準形という言葉が出てきたときに戸惑わないように，定理だけ紹介した．

4 内積空間（計量線型空間）

教科書の対応部分は8章である．教科書では実線型空間と複素線型空間を別々にあつかっているが，特に分けてやる必要もないだろうからまとめてやる．

内積を考える，数学的な動機付け

これまで線型代数についていろいろと学んで来た．特に一次独立，一次従属，基底などの考えを通して，ベクトルのいろいろな表し方を学んだ．ところが，これまで習ったことでは，ベクトルの間の「角度」が全く扱われていないことに気づく．

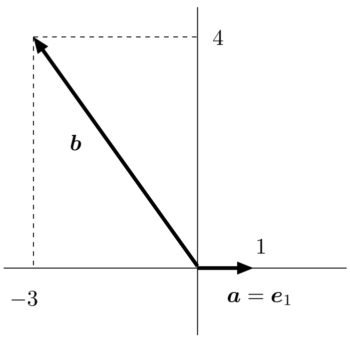
（例）2項縦ベクトル

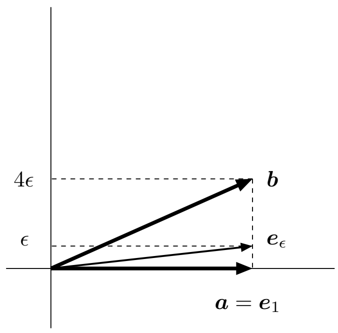
$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} -3 \\ 4 \end{bmatrix} \tag{4.0.1}$$

を考える．通常，これらのベクトルは下図の左のようになっていると考えるのが普通であろうが，これは上の成分表示が $\mathbb{R}^2$ の標準基底に関する展開だと仮定しての話である．つまり，上の成分表示は

$$\boldsymbol{a} = 1\boldsymbol{e}_1 + 0\boldsymbol{e}_2, \qquad \boldsymbol{b} = -3\boldsymbol{e}_1 + 4\boldsymbol{e}_2 \tag{4.0.2}$$

の略記だと思ったら下図の左の状況になる．この場合，$\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の向きはかなり違うから，この2つのベクトルが「互いに近い」とは思いがたい（長さはもちろん異なるが，向きも全然違う！）．





ところが，上の成分表示が $\langle \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2 \rangle$ ではなく，$\langle \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_\epsilon \rangle$ に関するものだとしたらどうだろう？ここで

$$\boldsymbol{e}_\epsilon = \boldsymbol{e}_1 + \epsilon \boldsymbol{e}_2 \tag{4.0.3}$$

である．もしこうなら，

$$\boldsymbol{a} = 1\boldsymbol{e}_1 + 0\boldsymbol{e}_\epsilon = \boldsymbol{e}_1 \tag{4.0.4}$$

は以前と変わらないが，

$$\boldsymbol{b} = -3\boldsymbol{e}_1 + 4\boldsymbol{e}_\epsilon = \boldsymbol{e}_1 + 4\epsilon \boldsymbol{e}_2 \tag{4.0.5}$$

であって，これは上図右側の状況になる．この場合，$\epsilon \ll 1$ ならば，$\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の向きはほとんど同じである！

これまでにやって来た材料では，どちらの状況を考えているのかが不明である．更に考えると，「どちらの基底で考えているのか」を決めたにしても，そもそも $\boldsymbol{e}_1$ と $\boldsymbol{e}_2$ を直交するように書いていること自体，自明ではないことに気づく[6]．（もしかしたら，$\boldsymbol{e}_1$ と $\boldsymbol{e}_\epsilon$ を直交するように書くべきだったのではないか？）

これらの問題は，要するに，今までの材料ではベクトル間の「角度」が何にも定義できていなかった（そのため，互いにスカラー倍になっているベクトル同士は比べられても，少しでも向きの異なるベクトルの「近さ」「遠さ」を比べることができなかった）ことに起因する．これは非常に不便ではあるし，我々の住んでいる3次元空間での直感にも反する．（我々の日常生活では，「この方向とあの方向はほとんど同じ」などの判断を自然に下している．）

というわけで，**「角度」の概念が自然に入った空間を考える**のが，実用上も非常に有用であろう．これを実現してくれるのが「内積」で，この章のテーマになるものである．

[6] 実は $\mathbb{R}^n$ と書いたとき，標準内積まで込めていうことが多いようだ．そのような暗黙の了解に従えば，$\boldsymbol{e}_1$ と $\boldsymbol{e}_2$ が直交しているようにとったのは結果的に正しいことになる

4.1 内積の定義と性質

天下りであるが，定義を与える．

定義 4.1.1 (内積 I —「普通の」内積) $\mathbb{C}^n$ のベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ の**内積** $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ を

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{j=1}^{n} x_j \overline{y_j} \tag{4.1.1}$$

で定義する．ここで $\boldsymbol{x}$ の第 j 成分を x_j と書いた．また $\overline{y_j}$ は y_j の複素共役を表す．

上の定義での複素共役は，y_j が実数のときにはもちろん，必要ない．

（参考）上では具体的な内積の定義を与えたが，実は内積はもっと一般に与えることもできる．すなわち，与えられたベクトル空間に対して，異なる内積をいろいろ定義できるのである．（これらは目的に応じて使い分ければよいが，大抵は考えている問題によって，自然な内積の定義が決まってくる．）ともかく，その「一般の内積」の定義を書いておくと：

定義 4.1.2 (内積 II — 抽象的な内積の定義) 複素ベクトル空間 X が与えられたとき，その**内積**とは，以下を満たすような関数（２つのベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ に対して複素数 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ が決まるもの）である（$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}$ は X の任意のベクトル）．

1. $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \overline{(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x})}$　ここで $\overline{}$ は複素共役
2. $(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}) + (\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z})$
3. $(k\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$　ここで k は任意のスカラー（複素数）
4. 常に $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) \geq 0$ であり，等号は $\boldsymbol{x} = 0$ の時に限る

定義 4.1.1 の内積が定義 4.1.2 の性質をすべて満たしていることはすぐに確かめられるだろう．定義 4.1.1 とは異なる内積（定義 4.1.2 の意味で）の簡単な例として，

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = x_1\overline{y_1} + 2\sum_{j=2}^{n} x_j \overline{y_j} \tag{4.1.2}$$

を挙げておく（第一成分とそれ以外で重みが異なる）．**なお，このように内積の定義はいろいろありうるが，この講義では主に，定義 4.1.1 の内積を考える．ただし，以下に展開する議論のほとんどは一般の内積（定義 4.1.2）に対しても成り立つ．興味のある人は各自，確かめてみてほしい．また，与えられた内積から出発して，定義 4.1.1 が満たされるような基底（正規直交基底）が見つけられる事も，もうすぐ学習する．そんな訳で，定義 4.1.1 が満たされる例だけを考えるのは，特に「ズルい」訳ではないのだ．**
（参考終わり）

特に物理系の人への注意：大変不幸なことに，物理と数学では内積の**複素共軛の入り方が逆**になっている．上の定義 4.1.1 は数学の流儀に従ったもので，$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ の後にある y に複素共軛をつけた．この意味で，前の方が後ろの方よりもちょっと「偉い」（なぜなら，偉いからこそ，複素共軛を付けて変えられることがないのである）．ところが物理（特に量子力学）では，

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \sum_{j=1}^{n} \overline{x_j} y_j \tag{4.1.3}$$

とする方が自然であり，後ろの方が「偉い」．この違いは案外大きな混乱の元になるから，十分に注意してもらいたい．

もう少し定義を続ける：

定義 4.1.3 (ノルム，直交) 複素ベクトル空間 X とその上の内積が与えられたとき，

$$\|\boldsymbol{x}\| \equiv \sqrt{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})} \tag{4.1.4}$$

をベクトル $\boldsymbol{x}$ の長さ（**ノルム**）という．また，2つのベクトルの内積がゼロ，つまり

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = 0 \tag{4.1.5}$$

の時，**$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ は直交する**という．

ベクトルの内積やノルムは以下の性質を満たす．

定理 4.1.4 (内積，ノルムの性質) 複素ベクトル空間 X における，ベクトルの内積とノルムは以下を満たす（$k \in \mathbb{C}$，$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y} \in X$）：

- $\|k\,\boldsymbol{x}\| = |k|\,\|\boldsymbol{x}\|$
- $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 + \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2 = 2\bigl(\|\boldsymbol{x}\|^2 + \|\boldsymbol{y}\|^2\bigr)$
- $\bigl|(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\bigr| \le \|\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{y}\|$ （Cauchy-Schwarz の不等式）
- $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\| \le \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\|$ （三角不等式）

（この定理は定義 4.1.1 または定義 4.1.2 からすぐに導かれる.）

（角度としての内積）Schwartz の不等式から，$-1 \le \dfrac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}{\|\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{y}\|} \le 1$ が得られるので，

$$\cos\theta = \frac{(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}{\|\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{y}\|} \tag{4.1.6}$$

なる θ を一つ決めることができる（$0 \le \theta \le \pi$）．この θ を ベクトル $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ のなす角度 と解釈すると，内積はベクトルの間の角度を与えるものと言える．ここで唐突に角度が出てきたと思う人は，定義 4.1.1 の内積の定義を 2 次元のベクトルに対して書いてみて，それが丁度 $\|\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{y}\|\cos\theta$ と同じであることを確かめてみると，違和感が少なくなるであろう．$\mathbb{R}^3$ のベクトルに対しては，このような事情は高校でもやったはず.

（参考）上では内積に基づいた「ノルム」を定義し，その性質の一例として定理 4.1.4 を示した．しかし，内積の定義されていない空間でもノルムを定義することがあり，この場合は上の定理 4.1.4 の性質（の一部）を満たすものをノルムとする．ノルムの一般の定義は以下のようなものである．

定義 4.1.5 (ノルムの一般の定義（参考までに）) 複素ベクトル空間 X が与えられたとき，その**ノルム**とは，以下を満たすような関数（1つのベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して非負の実数値 $\|\boldsymbol{x}\|$ が決まるもの）である（$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ は X の任意のベクトル）．

1. $\|k\boldsymbol{x}\| = k\|\boldsymbol{x}\|$ 　ここで k は任意の複素数
2. $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\| \le \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\|$ （三角不等式）
3. 常に $\|\boldsymbol{x}\| \ge 0$ であり，等号は $\boldsymbol{x} = 0$ のときのみ成立.

(参考終わり)

4.2 正規直交基底（内積の効用 I）

正規直交基底とその効用について，簡単に触れる．ここでは複素ベクトル空間とその上の内積が与えられたものとしてすすむ.（内積の効用 II は，次の章で習う.）

定義 4.2.1 (正規直交系，正規直交基底)
(i) n 次元複素ベクトル空間 X の基底 $\langle \boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n \rangle$ が,「互いに直交して，かつ長さが 1」つまり

$$(\boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{u}_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \tag{4.2.1}$$

を満たすとき，**正規直交基底**であるという.
(ii) より一般に，n 次元複素ベクトル空間 X のベクトルの組 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s\}$（$s \leq n$）が

$$(\boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{u}_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \tag{4.2.2}$$

を満たすとき，**正規直交系**であるという.

（例）$\mathbb{C}^n$ における基本ベクトル $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n$ は正規直交基底をなしている.

正規直交基底の良いところは，勝手なベクトル $\boldsymbol{x}$ をこの正規直交基底で**展開した係数が簡単に計算できる**ことである（以下を参照）．少し思い出してみると，基底 $\langle \boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n \rangle$ で $\boldsymbol{x}$ を展開するとは

$$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{u}_1 + x_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + x_n\boldsymbol{u}_n \tag{4.2.3}$$

と書けるように係数 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ を決めることだった．そして，今までこの問題に答えるには，上の方程式を連立方程式の形に書いて，一生懸命解くしかなかったのだ.（これは一般に非常に大変．試験の時など，4 次元，かつ僕が係数を計算し易いようにしたものでも間違ったでしょう？）

ところが，$\underline{\langle \boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n \rangle \text{ が正規直交基底の場合に限り}}$ 大変簡単な計算法があるのだ：

定理 4.2.2 (正規直交基底での展開) 正規直交基底による展開 (4.2.3) の係数は以下で与えられる：

$$x_j = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_j) \qquad (j = 1, 2, \ldots, n) \tag{4.2.4}$$

（証明）$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{u}_1 + x_2\boldsymbol{u}_2 + \ldots + x_n\boldsymbol{u}_n$ と書いておいて，x_j を求めてやろう（$j = 1, 2, \ldots, n$）．そのために，この表式と $\boldsymbol{u}_j$ の内積をとってやると,

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_j) = \bigl(x_1\boldsymbol{u}_1 + x_2\boldsymbol{u}_2 + \ldots + x_n\boldsymbol{u}_n, \boldsymbol{u}_j\bigr) = x_1(\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_j) + x_2(\boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_j) + \ldots + x_n(\boldsymbol{u}_n, \boldsymbol{u}_j) = x_j \tag{4.2.5}$$

となる —— $(\boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{u}_j) = \delta_{ij}$ を思い出せ. □

これがどれほど簡単かは実際に 10 次元くらいの空間でやってみればわかる．従来の方法なら 10 連立方程式を解くしかない．しかし，正規直交基底ならちょこちょこと内積を計算するだけである．内積を導入する，一つの大きな理由はここにある.

ただし，このようにして簡単に係数を計算する方法は正規直交基底の場合にのみ使える，ことはしつこく注意しておく.

4.3 Gram-Schmidt の直交化法

このように便利な正規直交基底であるが，現実に得られる基底は正規直交基底になっていないことも多い．そのような場合，今持っている基底から正規直交基底を作る方法が存在し，Gram-Schmidt の直交化法とよばれている（教科書の p.178, p.183）．

要点だけ述べると，以下のようになる．

定理 4.3.1 (Gram-Schmidt の直交化法) $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_s\}$ を，$\mathbb{C}^n$ の，一次独立な s 本のベクトルとする．このとき，

(i) 以下の手順によって，正規直交系 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s$ を作ることができる．

1. $\boldsymbol{u}_1 := \dfrac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|}$ と定める．
2. $\boldsymbol{w}_2 := \boldsymbol{a}_2 - (\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{u}_1)\boldsymbol{u}_1$ を作り，$\boldsymbol{u}_2 := \dfrac{\boldsymbol{w}_2}{\|\boldsymbol{w}_2\|}$ と定める．
3. $\boldsymbol{w}_3 := \boldsymbol{a}_3 - (\boldsymbol{a}_3, \boldsymbol{u}_1)\boldsymbol{u}_1 - (\boldsymbol{a}_3, \boldsymbol{u}_2)\boldsymbol{u}_2$ を作り，$\boldsymbol{u}_3 := \dfrac{\boldsymbol{w}_3}{\|\boldsymbol{w}_3\|}$ と定める．
4. 以下，同様に進める．具体的には，$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_{k-1}$ までを決めた時（$k \geq 4$），$\boldsymbol{w}_k := \boldsymbol{a}_k - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-1} (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{u}_j)\boldsymbol{u}_j$ を作り，$\boldsymbol{u}_k := \dfrac{\boldsymbol{w}_k}{\|\boldsymbol{w}_k\|}$ と定める．
5. 以上を $k \leq s$ のすべてに対して繰り返して作った $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s\}$ が求める正規直交系である．

(ii) 更に，$\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_s\}$ の張る線型空間と，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s\}$ の張る線型空間は同じである．

（注）上の定理で $s = n$ の場合，この手法により $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底が作れる．

（略証）定理の (i) の部分については，このような $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s\}$ を本当に作れること（つまり，上のプログラムを実行できること），および，出来た $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s\}$ が正規直交系になっていること，を示す必要がある．

さて，このプログラムが実行できたとすれば，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s\}$ が正規直交系になっていることはほとんど自明だ．というのも，$\boldsymbol{u}_k := \dfrac{\boldsymbol{w}_k}{\|\boldsymbol{w}_k\|}$ という定義から，$\|\boldsymbol{u}_k\| = 1$ が成り立ち，$\boldsymbol{u}_k$ の長さは 1（正規性 O.K.）．

また，$\boldsymbol{w}_k := \boldsymbol{a}_k - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-1} (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{u}_j)\boldsymbol{u}_j$ という定義から，$(\boldsymbol{w}_k, \boldsymbol{u}_j) = 0$ がすべての $j < k$ に対して成り立つ．実際，$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_{k-1}$ が正規直交系なので，

$$(\boldsymbol{w}_k, \boldsymbol{u}_i) = (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{u}_i) - \sum_{j=1}^{k-1} (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{u}_j) \times (\boldsymbol{u}_j, \boldsymbol{u}_i) = (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{u}_i) - (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{u}_i) = 0 \tag{4.3.1}$$

となるからである．$\boldsymbol{w}_k$ と $\boldsymbol{u}_k$ は比例しているので，上の式から $(\boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{u}_j) = 0$ がすべての $j < k$ に対して結論できる．これがさらにすべての $k \leq s$ で成り立つので，結局，直交性も O.K.

問題は上のプログラムが本当に実行できるか，である．プログラムが実行できないとすれば，それは分母の $\|\boldsymbol{w}_k\|$ がどこかの k でゼロになってしまう場合である．しかし，これは起こりえない．なぜなら，もし，どこかの k で $\|\boldsymbol{w}_k\| = 0$ ということは，$\boldsymbol{w}_k = \boldsymbol{0}$，つまり

$$\boldsymbol{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1} (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{u}_j)\boldsymbol{u}_j = \boldsymbol{0} \qquad \text{すなわち} \quad \boldsymbol{a}_k = \sum_{j=1}^{k-1} (\boldsymbol{a}_k, \boldsymbol{u}_j)\boldsymbol{u}_j \tag{4.3.2}$$

を意味する．ところが，上の作り方から，$\boldsymbol{u}_j$ は $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_j$ の線型結合である．よって，(4.3.2) は，$\boldsymbol{a}_k$ が $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_{k-1}$ の線型結合であることを意味する．でもこれは $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_s\}$ が一次独立であったことに反する．というわけで，分母がゼロになってしまうことはないので，上のプログラムはいつでも最後まで遂行できるのである．

定理の (ii) の部分もほとんど自明だ．上で既に注意したように，$\boldsymbol{u}_j$ は $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_j$ の線型結合である．よって，$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s$ の線型結合は，$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_j$ の線型結合でもある．よって，$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s$ で張られる線型空間は，$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_j$ で張られる部分空間の部分集合（部分空間）のはずである．

ところが，上の作り方を逆にたどれば，$\boldsymbol{a}_j$ が $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_j$ の線型結合であることもわかる．つまり，上の議論での $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{u}$ の役割を入れ替えた議論が成立し，$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_j$ で張られる線型空間は，$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s$ で張られる部分空間の部分集合（部分空間）のはずである．

お互いがお互いの部分空間になっていることが言えたので，両者は等しい． □

4.4 直交補空間

少し抽象的ではあるが，行列の対角化に関して，また将来進んだ話をするときにも重要なので，簡単に触れる．

定義 4.4.1 (直交補空間) W を $\mathbb{C}^n$ の部分空間とする．このとき，W のどの元とも直交するベクトルの全体

$$W^\perp := \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n \,\big|\, \text{すべての}\, \boldsymbol{y} \in W \,\text{に対して}\, (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = 0\} \tag{4.4.1}$$

を W **の直交補空間**という．

（注）$W^\perp$ は実際に，$\mathbb{C}^n$ の部分空間になっている（各自で納得すること）．

定理 4.4.2 (直交補空間の性質) W を $\mathbb{C}^n$ の部分空間とすると，以下がなりたつ．
(i) $\dim W + \dim W^\perp = n$
(ii) $\left(W^\perp\right)^\perp = W$ つまり，$W^\perp$ の直交補空間は W である．

（証明）$W^\perp$ の基底を具体的に作ってしまうのが一番，簡単だ．

まず，W の基底を $\langle \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_s \rangle$ とする．これに $(n-s)$ 本のベクトル $\boldsymbol{a}_{s+1}, \boldsymbol{a}_{s+2}, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ を付け加えて $\mathbb{C}^n$ の基底を作ることができる．

さて，$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ に Gram-Schmidt の直交化を適用して，$\mathbb{C}^n$ の基底 $\langle \boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n \rangle$ を作ることができる．すると，前節でやったことから，$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s$ の張る部分空間は $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_s$ の張る部分空間と同じである．つまり，$\langle \boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s \rangle$ は W の基底になっている．

このことを利用して，$W^\perp$ の元がどのように書けるかを考えてみる．$W^\perp$ の任意の元 $\boldsymbol{x}$ は $\mathbb{C}^n$ の元でもあるから，

$$\boldsymbol{x} = c_1 \boldsymbol{u}_1 + c_2 \boldsymbol{u}_2 + \cdots + c_n \boldsymbol{u}_n \tag{4.4.2}$$

と線型結合で書けるはずだ．ところが，$\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{u}_j$（$1 \le j \le s$）と直交しなければならない（なぜなら，$\boldsymbol{u}_j$ は W の元であって，$\boldsymbol{x}$ は W のすべての元，特に $\boldsymbol{u}_j$，と直交するから）．この条件は

$$0 = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}_j) = c_j \qquad (1 \le j \le s) \tag{4.4.3}$$

である．つまり，(4.4.2) は実は

$$\boldsymbol{x} = c_{s+1} \boldsymbol{u}_{s+1} + c_{s+2} \boldsymbol{u}_{s+2} + \cdots + c_n \boldsymbol{u}_n \tag{4.4.4}$$

と，$\boldsymbol{u}_{s+1}$ 以降の線型結合として書けるのだ．よって，$W^\perp$ の任意の元は $\boldsymbol{u}_{s+1}$ 以降の $(n-s)$ 個のベクトルの線形結合で書けることがわかった．

逆に，(4.4.4) の元は W の任意の元と直交する（各自でチェック）．つまり，(4.4.4) の形のベクトルはすべて $W^\perp$ の元になっている．

以上から，$W^\perp$ の基底の一つとして $\langle \boldsymbol{u}_{s+1}, \boldsymbol{u}_{s+2}, \ldots, \boldsymbol{u}_n \rangle$ がとれることがわかった．これは $(n-s)$ 個の独立なベクトルからなるので，$W^\perp$ の次元は $(n-s)$ とわかる —— (i) が証明できた．

また，$W^\perp$ の基底の一つとして $\langle \boldsymbol{u}_{s+1}, \boldsymbol{u}_{s+2}, \ldots, \boldsymbol{u}_n \rangle$ がとれる，というところから出発して $(W^\perp)^\perp$ の基底を構成すると，それが $\langle \boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_s \rangle$ になることは，上の議論を繰り返せばできる．でもこの基底は W の基底に他ならないから，$W = (W^\perp)^\perp$ が言える —— (ii) が証明された． □

4.5 直交行列とユニタリー行列

内積に関する章の締めくくりとして，２つの特殊な行列を定義し，それと内積の関係を考えておく．これは次の章で行列の対角化を求める際に，また登場するだろう．

定義 4.5.1 (転置行列とエルミート共役行列) A を $n \times n$ 行列とする（成分は実数または複素数）
(i) 行列 A から新しい行列 ${}^tA$ を，その ij 成分が

$$\left({}^tA\right)_{ij} = A_{ji} \tag{4.5.1}$$

を満たすように作る．この行列 ${}^tA$ を A の**転置行列**という．
(ii) 行列 A から新しい行列 $A^\dagger$ を，その ij 成分が

$$\left(A^\dagger\right)_{ij} = \overline{A_{ji}} \tag{4.5.2}$$

を満たすように作る（ここで $\overline{}$ は複素共役）．この行列 $A^\dagger$ を A の**エルミート共役行列**という．

このような定義をする意味は以下の性質にある：

定理 4.5.2 (転置行列，エルミート共役行列と内積)
(i) n-次元実ベクトル空間 $\mathbb{R}^n$ において，定義 4.1.1 の内積を考える（今はベクトルの各成分が実数だから，定義における複素共軛はないのと同じだ）．このとき，任意の $n \times n$ 実行列 A（A の成分は実数）と $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して

$$(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}, {}^tA\boldsymbol{y}) \tag{4.5.3}$$

が成り立つ．
(ii) n-次元複素ベクトル空間 $\mathbb{C}^n$ において，定義 4.1.1 の内積を考える．このとき，任意の $n \times n$ 複素行列 A と $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^n$ に対して

$$(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}, A^\dagger\boldsymbol{y}) \tag{4.5.4}$$

が成り立つ．

つまり，${}^tA$ や $A^\dagger$ は内積 $(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ の A を**左から右に移す際に自然に現れる**ものなのだ．

さて，ここで以下の問いを考えてみよう．

（問）$\mathbb{R}^n$ において，ベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ に実行列 A をかけたもの $A\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{y}$ を考える．すべての $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して，$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = (A\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{y})$ となるような A —— つまり，A **で変換してもベクトルの内積が変わらない**ような A は何か？また，同様の問いを複素ベクトル空間 $\mathbb{C}^n$ と複素行列に対して考えた答えは何か？

（言葉）上で考えているような「ベクトルの長さを変えない変換」を**等長変換**という．

（ついでにいうと）量子力学においては,「ベクトルの長さ」や「内積」は（ある種の事象が起こる）確率と密接に関係している．特に,「ベクトルの長さが変わらない」ことは「全確率の保存」と関係がある．そのため，量子力学においては，等長変換は非常に大事なのだ．

（答え）実ベクトル空間 $\mathbb{R}^n$ の場合から考える．ノルムの定義と上の定理から，

$$(A\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}, {}^tA\,A\,\boldsymbol{y}) \tag{4.5.5}$$

であるが，これがすべての $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ に対して $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ に等しくなければならない．つまりすべての $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して $(\boldsymbol{x}, B\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ となるような行列 B は何か？ということだ．この答えは $B = I_n$ しかないことは容易にわかる（$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{y} = \boldsymbol{e}_2, \ldots$）などといろいろ代入してみるとよい）．つまり，<u>${}^tA\,A = I_n$ となる行列 A が $\mathbb{R}^n$ の場合の答え</u>になっているのだ．複素 $\mathbb{C}^n$ の場合は同様に，<u>$AA^\dagger = I_n$ となる A が答え</u> だとわかる．

以上に基づいて，以下の定義を行おう．

定義 4.5.3 (直交行列とユニタリー行列) A を $n \times n$ 行列とする（成分は実数または複素数）
(i) 行列 A が

$$ {}^tA\,A = A\,{}^tA = I_n \tag{4.5.6} $$

を満たす時，つまり $A^{-1} = {}^tA$ であるとき，A は**直交行列**という．
(ii) 行列 A が

$$ A^\dagger A = A\,A^\dagger = I_n \tag{4.5.7} $$

を満たす時，つまり $A^{-1} = A^\dagger$ であるとき，A は**ユニタリー行列**という．

これらの用語は物理の学生なら日常茶飯に聞くようになるだろうから，今から慣れておきましょう．しつこいけども，これらの行列を定義する理由は，これらの行列が**等長変換の表現行列になっている**からである．

上で見たことも踏まえて，これらの行列と内積の関係をまとめると，以下のようになる．ベクトル空間が実ベクトル空間か，複素ベクトル空間かに応じて，実直交行列，ユニタリー行列が特別な意味を持っていることがわかる．

定理 4.5.4 (直交行列の性質) A は $n \times n$ 実行列とする．以下の４条件は同値である，
(i) A は実直交行列である．
(ii) 任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$ に対して $(A\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$.
(iii) 任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して $\|A\boldsymbol{x}\| = \|\boldsymbol{x}\|$.
(iv) A の列ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ は $\mathbb{R}^n$ の正規直交基底をなす．

定理 4.5.5 (ユニタリー行列の性質) A は $n \times n$ 複素行列とする．以下の４条件は同値である，
(i) A はユニタリー行列である．
(ii) 任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^n$ に対して $(A\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$.
(iii) 任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ に対して $\|A\boldsymbol{x}\| = \|\boldsymbol{x}\|$.
(iv) A の列ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ は $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底をなす．

5 正規行列の対角化

5.1 エルミート行列の対角化（内積の効用 II）

この節は物理（特に量子力学）との関係でも重要なので，物理の学生さんは心して学修するように．

転置行列，エルミート共役行列の定義は既にやった．これを用いて以下の定義を行う：

定義 5.1.1 (対称行列とエルミート行列) 正方行列 A が，

- ${}^tA = A$ を満たす時，A は**対称行列**（symmetric matrix）という．
- $A^\dagger = A$ を満たす時，A は**エルミート行列**（hermitian matrix）という．

A **の成分が実数の場合**，A が対称行列ならば A はエルミート行列でもある．以下では主にエルミート行列（と複素線型空間）の性質を証明するが，同様の証明はすべて，実対称行列（と実線型空間）についても成り立つことを注意しておく．

さて，定理 4.5.2 を思い出すと，A と $A^\dagger$ については（A がどんな行列でも）

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{y}) = (A^\dagger\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \qquad (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^n) \tag{5.1.1}$$

が成り立つのだった．従って，エルミート行列とは（$A = A^\dagger$ だから），

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{y}) = (A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \qquad (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^n) \tag{5.1.2}$$

が成り立つ行列ということになる．この性質から，以下の驚くべき性質が導かれる：

定理 5.1.2 (エルミート行列の固有値) A をエルミート行列または実対称行列とする．このとき，
(i) A の**固有値はすべて実数**である．
(ii) A の異なる固有値に対する固有ベクトル同士は**直交**する．

（証明）内積を使うと簡単だ．固有値 α に対する A の固有ベクトル（の一つ）を $\boldsymbol{a}$ としよう：$A\boldsymbol{a} = \alpha\boldsymbol{a}$．この両辺を，それぞれ $\boldsymbol{a}$ と内積をとると，

$$(A\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}) = (\alpha\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}) = \alpha(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}) = \alpha\,\|\boldsymbol{a}\|^2 \tag{5.1.3}$$

となる．ところが左辺は，A がエルミート行列なので，(5.1.2) から

$$(A\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}) = (\boldsymbol{a}, A\boldsymbol{a}) = (\boldsymbol{a}, \alpha\boldsymbol{a}) = \overline{\alpha}(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}) = \overline{\alpha}\,\|\boldsymbol{a}\|^2 \tag{5.1.4}$$

に等しい．両辺を引き算して

$$(\alpha - \overline{\alpha})\,\|\boldsymbol{a}\|^2 = 0 \tag{5.1.5}$$

を得るが，$\boldsymbol{a}$ が固有ベクトルなので，$\|\boldsymbol{a}\| > 0$ である．よって，$\alpha - \overline{\alpha} = 0$ であり，α は実数と結論できる．

次に，$\alpha \neq \beta$ なる A の２つの固有値を持ってきて，対応する固有ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ とする：

$$A\boldsymbol{a} = \alpha\boldsymbol{a}, \qquad A\boldsymbol{b} = \beta\boldsymbol{b} \tag{5.1.6}$$

一つ目の式と $\boldsymbol{b}$ の内積をとると

$$(A\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = (\alpha\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = \alpha(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) \tag{5.1.7}$$

であるが，やはり (5.1.2) から，

$$(A\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a}, A\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a}, \beta\boldsymbol{b}) = \bar{\beta}(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = \beta(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) \tag{5.1.8}$$

が成り立つ（最後のところでは固有値 β が実数であることを用いた）．２つの式を引き算して，

$$(\alpha - \beta)\,(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = 0 \tag{5.1.9}$$

が得られる．これは $\alpha \neq \beta$ なら $(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = 0$，つまり $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ は直交することを意味する． □

さてさて，エルミート行列や実対称行列には，更に次のような非常に良い性質がある．その前に

- $U^{-1} = U^\dagger$ である行列をユニタリー行列という
- $P^{-1} = {}^tP$ である行列 P を直交行列という

ことを思い出しておこう．

定理 5.1.3 (エルミート行列，実対称行列は対角化可能)

- エルミート行列は対角化できる．しかも，対角化に使う行列 P を「ユニタリー行列」にとることができる．
- 実対称行列は対角化できる．しかも，対角化に使う行列 P を「直交行列」にとることができる．

（証明）この定理の証明は少し面倒である上に，理解してもそれほど視野が広がるとは思われない．よって，後の定理 5.2.2 の証明と併せて（時間があれば）黒板で紹介するにとどめる．一応の証明は教科書の p.191 にある． □

行列がエルミート行列かどうかは**その形だけを見れば判定できる**．だからこの定理は，(エルミート行列であれば) その形だけで，その行列が対角化できることを保証してくれる，非常に有り難いものなのだ．(一般の行列の場合は全ての固有値を求め（重根の場合は更に）全ての固有ベクトルも求めないと，対角化可能かどうか判定できなかったことを思い出そう.）この意味で，うえの定理は実用上，非常に大事である（ただし，あくまで**対角化可能の十分条件**であることには注意）．

ユニタリー行列による相似変換（これを簡単に**ユニタリー変換**という） $U^{-1}AU$ は量子力学においても重要な意味を持つ．むしろ，量子力学における行列の対角化では，対角にする行列としてユニタリー行列を選ぶことが物理的に非常に重要になってくる[7]．このため，ユニタリー行列で対角化するのは（一般の行列で対角化するよりも）物理の学生には大事なのだ．

重要：期末試験では「与えられたエルミート行列を対角化するユニタリー行列を求めよ」というような問題を必ず出題するから，確実にできるようになっておくこと．この問題が解けることは，物理の学生さんには必須の技能であるから，今，できるようになろう．

与えられた行列 A を対角化する行列 P を求める方法は，既に習った（A の独立な固有ベクトルを並べれば良かった）．ここで新しいのは，その行列をユニタリー行列に取る必要があることだ．この部分は「Gram-Schmidt の直交化」で行うことができる（詳しくは黒板で）．

5.2 正規行列の対角化

さて，前節ではエルミート行列というものを特に取り上げ，その性質を調べた．特に，エルミート行列は絶対に対角化できる（しかもユニタリー行列で対角化できる）ことを注意した．しかし，エルミート行列でなくても，ユニタリー行列で対角化できる行列はいろいろある．その点をこの節では見て行く．

まず定義：

定義 5.2.1 (正規行列) $n \times n$ の行列 A が $A\,A^\dagger = A^\dagger\,A$ を満たす時，A は**正規行列**（normal matrix）という．

（例）エルミート行列，ユニタリー行列は共に正規行列である（各自，定義をチェックすること）．

すると，以下の定理がなりたつ：

定理 5.2.2 (ユニタリー行列で対角化できるための必要十分条件) 正方行列 A について，以下の a, b は同値である．

a. A は正規行列である．

b. A はユニタリー行列 U を使って対角化できる．つまり，$U^{-1}AU$ が対角行列になるようなユニタリー行列 U が存在する．

[7]ユニタリー変換と確率の保存が密接に関係しているため

（証明）この定理の証明は大変である上に，理解してもそれほど視野が広がるとは思われない．よって（時間があれば）黒板で紹介するにとどめる．一応の証明は教科書の p.194 にある．ただし，必要条件（ユニタリー行列で対角化できるなら正規行列である）の証明は非常に簡単で良い練習問題であるから，各自で見ておくこと． □

この定理もまた，行列が対角化できる十分条件を比較的簡単に与えてくれるので，重宝する．特に，**エルミート行列やユニタリー行列は対角化できることが保証された**．また，量子力学の観点からは「ユニタリー行列を用いて対角化できる」ことに意味があるので，これは物理では大事な定理である．

ただし，世の中には，「ユニタリー行列では対角化できないが，もっと一般の行列 P を用いれば対角化できる」行列も存在することは再度強調しておこう．

「ユニタリー行列では対角化できないが，もっと一般の行列 P を用いれば対角化できる」行列の例：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.2.1}$$

この行列は正規行列ではない（${}^t\!A\,A \neq A\,{}^t\!A$）ので，ユニタリー行列では対角化できないが，

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \qquad \text{によって} \qquad P^{-1}AP = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.2.2}$$

と対角化される．

正規行列に関する一番重要な性質は上の定理 5.2.2 でつきているが，少し補足的な性質を述べておこう．これらの定理の証明はそんなに難しくないし，この程度の証明に類することは理論物理に進む人には必要と思われるので，自分でやってみるか，理解しようとつとめることを強く奨める．

定理 5.2.3 (正規行列と内積) $n \times n$ 正方行列 A について，以下の a, b は同値である．

a. A は正規行列である．

b. 任意の n 成分複素縦ベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して，$\|A\boldsymbol{x}\| = \|A^\dagger \boldsymbol{x}\|$ が成り立つ．

定理 5.2.4 (正規行列と固有値) 正規行列 A の固有値 α に対する固有ベクトルを $\boldsymbol{a}$ とする（$A\boldsymbol{a} = \alpha\boldsymbol{a}$）と，$A^\dagger \boldsymbol{x} = \bar{\alpha}\boldsymbol{x}$ がなりたつ．つまり，α が A の固有値なら，$\bar{\alpha}$ は $A^\dagger$ の固有値になる．

定理 5.2.5 (正規行列と固有値) 正規行列 A の相異なる固有値に対する固有ベクトルは，互いに直交する．

5.3 二次形式

（この節の内容は，時間が足りなくなったら触れないかもしれない．）

このコースの最後の材料として，「二次形式」を取り上げておく．まずは「実二次形式」から始めよう．

定義 5.3.1 (実二次形式) $n \times n$ の実対称行列 A と，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して，

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = (A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \sum_{ij} a_{ij}\, x_i\, x_j \tag{5.3.1}$$

を定義して，これを A によって定まる**実二次形式**（real quadratic form）という．

（注意）

- A は実対称行列であるから，$a_{ij} = a_{ji}$ である．よって，上の式は

$$(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \sum_i a_{ii}\,(x_i)^2 + 2\sum_{i<j} a_{ij}\,x_i\,x_j \tag{5.3.2}$$

  とも書ける．
- A が対称でない時が気になった人がいるかもしれないが，対称でない場合は考える必要がなく，上ので十分に一般的なのだ．理由は以下の通り．x_i の二次関数の最も一般の形は（c_i, d_{ij}, p_i, q を定数として）

$$\sum_i c_i(x_i)^2 + \sum_{i<j} d_{ij}x_ix_j + \sum_i p_ix_i + q \tag{5.3.3}$$

  である．ここで， $a_{ii} = c_i, a_{ji} = a_{ij} = d_{ij}/2$ と選んでやれば，これを

$$\sum_{ij} a_{ij}x_ix_j + \sum_i p_ix_i + q \tag{5.3.4}$$

  の形に表すことができる．という訳で，対称行列を使った二次形式だけを考えれば十分なのである．(一次の項はまた，別に考える．後の例を参照)

我々が二次形式を考える場合，大抵はその最大最小に興味がある．つまり，$\boldsymbol{x}$ をいろいろ動かして，問題の二次形式がどのような値をとるのかを知りたい．

ところが，定義 5.3.1 の二次形式には x_i と x_j が複雑に絡み合って出現しているので，その最大最小はなかなかわからない．これを何とか簡単にはできないのだろうか？この答えは「対称行列の対角化」を用いれば，以下のように与えられる．

定理 5.3.2 (実二次形式の標準形) 定義 5.3.1 の実二次形式に対して，A を対角化する直交行列 P を持って来て，$\boldsymbol{x} = P\boldsymbol{y}$（つまり，$\boldsymbol{y} = P^{-1}\boldsymbol{x}$）と変数変換してやろう．すると，結果は

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i(y_i)^2 \tag{5.3.5}$$

となる．ここで α_i は A の固有値で，その並び方は P の固有ベクトルの並び方と対応したものである．

上の (5.3.13) 右辺の形を，二次形式の**標準形**という．

（証明）簡単だ．$\boldsymbol{x} = P\boldsymbol{y}$ の定義を二次形式の定義に代入して計算すると

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = (P\boldsymbol{y}, AP\boldsymbol{y}) = (\boldsymbol{y}, {}^tPAP\boldsymbol{y}) \tag{5.3.6}$$

となるが，P が直交行列なので，${}^tPAP = P^{-1}AP$ は対角行列であり，かつその対角成分は（P の列の並び方に応じた順で）A の固有値が並んでいる． □

このように変形すると，二次形式の最大最小はすぐにわかる．$\boldsymbol{x}$ がすべての $\mathbb{R}^n$ の値をとるとき，$\boldsymbol{y}$ も全ての値をとる．つまり，二次形式 $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x})$ の取りうる値の範囲を調べたければ，y_i が任意の実数値をとる場合の (5.3.13) の値の範囲を調べればよい．でもこれは簡単で

- α_i が全て正なら (5.3.13) はいつも正（$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$ の自明な場合を除く）．
- α_i が全て負なら (5.3.13) はいつも負（$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$ の自明な場合を除く）．
- α_i が全て非負なら (5.3.13) は非負．
- α_i が全て非正なら (5.3.13) は非正．
- α_i の中に異符号のものが混じっているなら，(5.3.13) の符号は正にも負にもなる．

このようにして，$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x})$ の符号（と最大最小）が，A の固有値を用いて完全に分類できた．

以上の分類には名前がついていて：

定義 5.3.3 (正定値) 二次形式 $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x})$ について：

- 任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) \geq 0$ のとき，この二次形式と行列 A は**半正定値**(positive semi-definite) であるという．
- 任意の $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ に対して $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) > 0$ のとき，この二次形式と行列 A は**正定値**(positive definite) であるという．
- 不等号の向きを逆にしたものは**半負定値**や**負定値**(negative (semi-)definite) という（が，あまり使われない）．

直前の考察によれば，

- A が半正定値 $\iff$ 全ての固有値は非負
- A が正定値 $\iff$ 全ての固有値は正

などの対応がある．このため,「全ての固有値が正の対称行列を正定値行列」などと定義することもある．

二次形式の応用例：この二次形式はいろんなところに顔を出す．例えば：

- 微分積分学でやったかもしれないが，n 変数函数の極大・極小を求める際，ヘシアンを考えるところが正に二次形式だ．つまり，n 変数 $\boldsymbol{x}$ の関数 $f(\boldsymbol{x})$ が $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ で停留値を取る場合,
$$\frac{\partial f}{\partial x_j}(\boldsymbol{b}) = 0 \tag{5.3.7}$$
であって，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ でのテイラー展開は
$$f(\boldsymbol{x}) \approx f(\boldsymbol{b}) + \frac{1}{2}\sum_{ij} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\boldsymbol{b}) \times (x_i - b_i)(x_j - b_j) + \dots \tag{5.3.8}$$
となるが，右辺の第 2 項がまさに二次形式の形になっている（ただし，定義 5.3.1 の行列 A の ij 成分としては $\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\boldsymbol{b})$ を，またベクトル $\boldsymbol{x}$ としては $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}$ をとる）．
この二次形式が正定値なら $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ で極小，負定値なら極大になることは正定値，負定値の定義そのものである．が，上の考察により,「正定値なら全ての固有値が正」「負定値なら全ての固有値が負」であるから，結局，関数の極大極小はこの二次形式を定義する行列 $\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\boldsymbol{b})$（＝ヘッセ行列の 1/2）の固有値の正負で決まる．
- 2 次元平面における円錐曲線（楕円，放物線，双曲線）はすべて，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)$ の二次式がゼロ，という形で表現される．これは
$$ax_1^2 + 2bx_1x_2 + cx_2^2 + dx_1 + ex_2 = f \tag{5.3.9}$$
の形になるが，最初の 3 項は正に $\boldsymbol{x}$ の二次形式である．したがって，適当な直交変換 $\boldsymbol{x} = P\boldsymbol{y}$ によって上のは
$$\alpha_1 y_1^2 + \alpha_2 y_2^2 + d' y_1 + e' y_2 = f \tag{5.3.10}$$
となる．この形になれば，これがどのような曲線を表すかは簡単にわかる．もし，$\alpha_1\alpha_2 \neq 0$ なら，y_1, y_2 でそれぞれ平方完成してやれば，これは
$$\alpha_1(y_1 - X)^2 + \alpha_2(y_2 - Y)^2 = f' \tag{5.3.11}$$
の形になるから，α_1, α_2 の正負によって，楕円になったり，双曲線になったりする（f' の符号によっては，そもそもどんな y_1, y_2 も満たさない，こともあるが）．一方，α_1 か α_2 の片方がゼロなら，これは放物線だ．
このように，二次形式の標準形に直すことで，与えられた二次曲線が何かがわかるのである．

以上は実ベクトル空間と実対称行列を考えたが，同様のことは複素ベクトル空間とエルミート行列に対しても考えることができる．話の進み方は実の場合とほとんど同じなので，定義と定理を並べるにとどめる．

定義 5.3.4 (エルミート形式) $n \times n$ のエルミート行列 A と，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ に対して，

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = (A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \sum_{ij} a_{ij}\, \overline{x_i}\, x_j \tag{5.3.12}$$

を定義して，これを A によって定まる**エルミート形式**（real quadratic form）という．

（注意）上で $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = (A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})$ であるのは，A がエルミート行列であるための特殊事情である．また，エルミート形式は（$\boldsymbol{x}$ の成分が実数でない複素数であっても）実数である．

エルミート形式に対しても，実二次形式と同様の定理がなりたつ：

定理 5.3.5 (エルミート形式の標準形) 定義 5.3.4 のエルミート形式に対して，A を対角化するユニタリー行列 U を持って来て，$\boldsymbol{x} = U\boldsymbol{y}$（つまり，$\boldsymbol{y} = U^{-1}\boldsymbol{x}$）と変数変換する．すると，結果は

$$(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i |y_i|^2 \tag{5.3.13}$$

となる．ここで α_i は A の固有値で，その並び方は U の固有ベクトルの並び方と対応したものである．

さらに，以下のように呼ぶ：

定義 5.3.6 (正定値) エルミート行列 A とエルミート形式 $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x})$ について：

- 任意の $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ に対して $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) \geq 0$ のとき，このエルミート形式と行列 A は**半正定値**(positive semi-definite) であるという．
- 任意の $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ に対して $(\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x}) > 0$ のとき，このエルミート形式と行列 A は**正定値**(positive definite) であるという．
- 不等号の向きを逆にしたものは**半負定値**や**負定値**(negative (semi-)definite) という（が，あまり使われない）．