## 1　1次変換と2次形式

$n$ 個の実数の組 $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ を $n$ 次元**ベクトル**といい，$\boldsymbol{x}$ で表わされる．数 $x_j\ (j = 1, 2, \ldots, n)$ をベクトル $\boldsymbol{x}$ の**成分**という．成分がすべて 0 のベクトルを**零ベクトル**という．2 つのベクトル $\boldsymbol{x}$と $\boldsymbol{y}$ の内積は

$$(\boldsymbol{x}\,, \boldsymbol{y}) = x_1y_1 + x_2y_2 + \ldots + x_ny_n = (\boldsymbol{y}\,, \boldsymbol{x}) \tag{1}$$

によって定義される[1]．内積 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ が 0 のとき $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ は**直交する**という．$\boldsymbol{x}$ とそれ自身の**内積**$N\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}\,, \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^2$ を $\boldsymbol{x}$ の**ノルム**という．$\boldsymbol{x}^2$ の正の平方根をベクトル $\boldsymbol{x}$ の**長さ**といい，$|\boldsymbol{x}| = \sqrt{\boldsymbol{x}^2}$ で表わす．長さ 1 のベクトルを**単位ベクトル**という．　$\boldsymbol{x}$ を $\boldsymbol{y}$ に移す次の **1 次変換**

$$y_j = \sum_{k=1}^{n} a_{jk}x_k \quad (j = 1, 2, \ldots, n). \tag{2}$$

において，行列 $A = (a_{jk})$ を

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{pmatrix}, \tag{3}$$

と定義すると，(2) は $\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$ と表わすことができる．行列 $A = (a_{jk})$ と行列 $B = (b_{jk})$ の**積**$AB = C = (c_{jk})$ を次式で定義する．

$$c_{jk} = \sum_{\ell=1}^{n} a_{j\ell}b_{\ell k} \quad (j, k = 1, \ldots, n). \tag{4}$$

また，**単位行列**$E$ を次式で定義する．

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

次式で与えられるクロネッカーのデルタを導入すると，

$$\delta_{jk} = \begin{cases} 1 & (j = k) \\ 0 & (i \neq k) \end{cases} \tag{6}$$

$E = (\delta_{jk})$ である．なお，$AE = EA = A$ が成り立つ．

行列の成分に複素数を許すものであるとすると，$\bar{A} = (\bar{a}_{jk})$ を $A$ に**共役な行列**という．ただし，$\bar{a}$ は $a$ の複素共役である．さらに，$A$ の行と列を入れかえた行列 $A' = (a_{kj})$ を $A$ の**転置行列**という．$A^\dagger = \bar{A}'$ を $A$ の**エルミート共役行列**という．

$$(AB)' = B'A' \tag{7}$$

が成立する．$A = A'$ なる行列を**対称行列**という．1 次変換 (2) の逆変換は

$$x_j = \sum_{k=1}^{n} \breve{a}_{jk}y_k \quad (j = 1, 2, \ldots, n). \tag{8}$$

[1]「数理物理学の方法」R. クーラン＆ D. ヒルベルト，第 1 章

である．$\breve{a}_{jk}$ を成分とする行列を $A$ の**逆行列**といい，$A^{-1}$ とかく．次式が成り立つ．

$$AA^{-1} = A^{-1}A = E.$$

$a_{ik}$ $(1 \leq j, k\ \leq n)$ の多項式

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = \sum_{(j_1, j_2, \dots, j_n)} \varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ j_1 & j_2 & \dots & j_n \end{pmatrix} a_{1j_1} a_{2j_2} \dots a_{nj_n} = \mathbf{A} \tag{9}$$

を $n$ 次の**行列式**といい $\mathbf{A}$ 或いは $|A|$ で表わす．ここに，和は $(1, 2, \dots, n)$ のすべての**順列**$n!$ 個について行われる．$\varepsilon(\dots)$ は各順列が偶置換の場合 1 を奇置換の場合には $-1$ である．例えば，$n = 3$ の場合，すべての順列は $(1, 2, 3), (1, 3, 2), (2, 1, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2), (3, 2, 1)$ であり，置換の回数は夫々0,1,1,2,2,1 であるから

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{13}a_{22}a_{31}$$

(9) において，$j$ 行 $k$ 列の要素をすべて取り去った行列式に $(-1)^{j+k}$ を乗じたものを行列式 $\mathbf{A}$ の余因子といい，$\mathbf{A}_{jk}$ と表わす．すなわち

$$\mathbf{A}_{jk} = (-1)^{j+k} \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1,k-1} & a_{1,k+1} & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{j-1,1} & \dots & a_{j-1,k-1} & a_{j-1,k+1} & \dots & a_{j-1,n} \\ a_{j+1,1} & \dots & a_{j+1,k-1} & a_{j+1,k+1} & \dots & a_{j+1,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & \dots & a_{n,k-1} & a_{n,k+1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} \tag{10}$$

上式を使うと行列式 $\mathbf{A}$ は次のように 1 つランクを下げた行列式に展開することができる．

$$\mathbf{A} = a_{1k}\mathbf{A}_{1k} + a_{2k}\mathbf{A}_{2k} + \dots + a_{nk}\mathbf{A}_{nk} \quad \text{（列での展開）} \tag{11}$$

$$\mathbf{A} = a_{j1}\mathbf{A}_{j1} + a_{j2}\mathbf{A}_{j2} + \dots + a_{jn}\mathbf{A}_{jn} \quad \text{（行での展開）} \tag{12}$$

一般に，次式の表現を得る．

$$\sum_{\ell=1}^{n} a_{j\ell}\mathbf{A}_{k\ell} = \sum_{\ell=1}^{n} a_{\ell j}\mathbf{A}_{\ell k} = \delta_{jk}\mathbf{A}. \tag{13}$$

(13) において，$\mathbf{A}_{k\ell}/\mathbf{A}$ を要素とする行列は逆行列 $A^{-1}$ であることがわかる．行列 $A$ と $B$ の積の行列式は $AB$ の行列式に等しい．即ち

$$|AB| = |A|\,|B| = \mathbf{A}\,\mathbf{B}. \tag{14}$$

**双 1 次形式**を次式で定義する．

$$A(u, x) = \sum_{j=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} a_{jk} u_j x_k. \tag{15}$$

$A^{-1}$ の双 1 次形式は次式で与えられる．

$$A^{-1}(u,x) = -\frac{\mathbf{A}(u,x)}{\mathbf{A}}. \tag{16}$$

ただし，

$$\mathbf{A}(u,x) = \begin{vmatrix} 0 & u_1 & \dots & u_n \\ x_1 & a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_n & a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = -\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\mathbf{A}_{jk}x_j u_k. \tag{17}$$

(15) において，$u = x$ とした場合を **2 次形式**という．特に $A = A'$ の場合を扱えばよい．なぜなら，$a_{jk} \neq a_{kj}$ の場合，$\frac{1}{2}(a_{jk} + a_{kj})$ を $a_{jk}$ とおけばよい．この場合には，

$$AA'(x,x) = \sum_{k=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{2}a_{jk}x_j\right)^2 = \sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{k=1}^{2}a_{jk}x_k\right)^2 = A'A(x,x). \tag{18}$$

このように 2 乗の和で表わされるので**正値 2 次形式**という．複素数の成分とする行列 $A$ において $a_{jk} = \bar{a}_{kj}$ である場合の 2 次形式

$$H(x,\bar{x}) = \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}a_{jk}x_j\bar{x}_k = \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}a_{kj}\bar{x}_j x_k, \tag{19}$$

を**エルミート形式**という．$AA^\dagger$ の 2 次形式に対して次式が成り立つ．

$$AA^\dagger(x,\bar{x}) = \sum_{k=1}^{n}\left|\sum_{j=1}^{2}a_{jk}x_j\right|^2 = \sum_{j=1}^{n}\left|\sum_{k=1}^{2}a_{jk}\bar{x}_k\right|^2 = A^\dagger A(x,\bar{x}). \tag{20}$$

双 1 次形式 (15) において，変数 $x, y$ にそれぞれ，行列 $C, B$ なる変換

$$x_j = \sum_k c_{jk}\zeta_k, \quad y_j = \sum_k b_{jk}\eta_k, \tag{21}$$

を行うと

$$A(x,y) = \sum_{\ell=1}^{n}\sum_{m=1}^{n}p_{\ell m}\zeta_\ell\eta_m, \text{ ただし，} p_{\ell m} = \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}a_{jk}c_{j\ell}b_{km}.$$

すなわち，

$$A(x,y) = C'AB(\zeta,\eta) \tag{22}$$

である．2 次形式 $K(x,x)$ に対しては

$$K(x,x) = C'KC(\zeta,\zeta) \tag{23}$$

である．上式において変換前後において

$$E(x,x) = E(\zeta,\zeta) \tag{24}$$

を満たす場合を**直交変換**という．この場合には (23) において $K = E$ とおいて $C'C = E$ であるから

$$C' = C^{-1} \tag{25}$$

が成り立つ．複素数まで拡張した 2 次形式 $H(x, \bar{x})$ においては，変換前後において

$$E(x, \bar{x}) = E(\zeta, \bar{\zeta}) \tag{26}$$

が成立する場合には次式を満たす.

$$CC^\dagger = C^\dagger C = E, \quad \text{あるいは,} \qquad C^\dagger = C^{-1}. \tag{27}$$

このような変換を**ユニタリ変換**という.

# 2 固有値問題

2 次形式

$$A(x, x) = \sum_{j=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} a_{jk} x_j x_k, \tag{28}$$

に変換行列 $T$ の直交変換

$$y_j = \sum_{k=1}^{n} t_{jk} x_k, \quad (j = 1, 2, \ldots, n) \tag{29}$$

をし，次のような**標準形**に変形しよう.

$$A(x, x) = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j y_j^2 = B(y, y), \tag{30}$$

上式の行列 $B$ は次のような**対角行列**である.

$$B = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & \lambda_n \end{pmatrix}. \tag{31}$$

なお，任意の行列 $C$ について，$CB = BC$ が成り立つ．しかるに，$x$ の多項式

$$f(x) = (x - \lambda_1)(x - \lambda_2) \ldots (x - \lambda_n) = |xE - B| \tag{32}$$

であるから，$\lambda_j$ は方程式 $|xE - B| = 0$ の $x$ についての根である．$B = T^{-1}AT$ であるから

$$|xE - B| = |xE - T^{-1}AT| = |T^{-1}||TxET^{-1} - A||T| = |xE - A|,$$

$$\therefore \quad |xE - A| = 0. \tag{33}$$

したがって，(33) を $x$ について解けば $\lambda_j$ が得られる．この式を $A$ の**固有方程式**といい，この方程式の根を**固有値**という.

変換行列 $T$ は次の条件から得られる.

$$TT' = E \tag{34}$$

$$AT = TB. \tag{35}$$

(35) より，$x = \lambda_\ell$ に対して次の $n$ 個の等式が成り立つ.

$$\sum_{j=1}^{n} a_{kj} t_{j\ell} = \lambda_\ell t_{k\ell}, \quad (k = 1, 2, \ldots, n) \tag{36}$$

これらのうち独立なのは $n-1$ 個である．(34) よりの式

$$\sum_{k=1}^{n} t_{k\ell}^2 = 1, \tag{37}$$

を加えると $n$ 個の $t_{j\ell}\,(j=1,2,\ldots,n)$ を求めることができる．

例えば,

$$A(x,x) = x_1^2 + x_2^2 + 2x_1x_3 + 2x_2x_3$$

の場合には

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$A$ を対称行列にするため $A(x,x) = x_1^2 + x_1x_3 + x_2^2 + x_2x_3 + x_3x_1 + x_3x_2$ のように変形した．固有方程式は

$$\begin{vmatrix} x-1 & 0 & -1 \\ 0 & x-1 & -1 \\ -1 & -1 & x \end{vmatrix} = x(x-1)(x-1) - (x-1) - (x-1) = (x-1)(x+1)(x-2) = 0,$$

したがって，$\lambda_1 = -1, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 2$ である．即ち，標準形は

$$A(x,x) = B(y,y) = -y_1^2 + y_2^2 + 2y_3^2$$

である．(36) より，固有値 $\lambda = -1$ に対して,

$$t_{11} + t_{31} = -t_{11}, \quad t_{21} + t_{31} = -t_{21}, \quad t_{11} + t_{21} = -t_{31}.$$

であるから，$t_{31} = -2t_{11}$，$t_{21} = t_{11}$ を得る．さらに (37) より $\{1^2 + 1^2 + (-2)^2\}t_{11} = 1$，したがって，$t_{11} = t_{21} = \dfrac{1}{\sqrt{6}}$，$t_{31} = -\dfrac{2}{\sqrt{6}}$ を得る．$\lambda_2 = 1$，$\lambda_3 = 2$ に対しても同様な方法で $t_{12} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}, t_{22} = -\dfrac{1}{\sqrt{2}}, t_{32} = 0$，$t_{13} = \dfrac{1}{\sqrt{3}}, t_{32} = \dfrac{1}{\sqrt{3}}, t_{32} = \dfrac{1}{\sqrt{3}}$ を得る．

ベクトル $\boldsymbol{t}_1, \boldsymbol{t}_2, \ldots, \boldsymbol{t}_n$ を

$$\boldsymbol{t}_\ell = (t_{1\ell}, t_{2\ell}, \ldots, t_{n\ell}), \quad (\ell = 1,2,\ldots,n) \tag{38}$$

のように定義すると，(36) は

$$\sum_{j=1}^{n} a_{\ell j}\boldsymbol{t}_j = \lambda_\ell \boldsymbol{t}_\ell, \quad \text{或いは} \quad \boldsymbol{t}_\ell A = \lambda_\ell \boldsymbol{t}_\ell \quad (\ell = 1,2,\ldots,n). \tag{39}$$

上式のように表される $\boldsymbol{t}_j$ を $A$ の固有値 $\lambda_j$ に属する**固有ベクトル**という.