

線形代数概論(V3)

市吉 修

2023/9/23

序

行列と行列式は極めて広汎な応用があるが初心者には必ずしも理解が容易ではない。ここではベクトルの集まりとして行列を捉え、Dirac の Bra および ket ベクトルに習って行ベクトルと列ベクトルを記号的に書き分けて全体を整理する。行列や行列式において余因子だけでなく余因子ベクトルなるものを考えると理解の助けになるであろう。

V3 において若干の訂正とより分かり易くなるよう記述を改めた。

内容

1. n 次元線形空間 V_n

1.1. ベクトルの内積

1.2. グラム・シュミットの直交化法

1.3 正規直交系(normalized orthogonal system) 1.4 列(縦)ベクトルと行(横)ベクトル

2. V_n における線形変換(Linear transformation)

2.1 線形変換

2.2 行列(matrix)

2.3 ベクトルの集まりとしての行列

2.4. 行列の積

3 行列式

3.1. 定義

3.2. 余因子行列展開

3.3. ベクトル積

3.4. V_n 空間における行列式

3.4.1. 二次元行列式

3.4.2. 三次元ベクトル積と行列式

3.4.3. n 次元行列と行列式

n 次元ベクトル空間における外積

余因子ベクトル

4. 行列の積の行列式

4.1 $|T.S| = |T| \cdot |S|$ の証明

4.2. $|T.S| = |T| \cdot |S|$ の応用

5. 連立一次方程式の解法への応用

5.1. 連立一次方程式とその解法

5.2 行列演算による解法

6. 固有値問題と座標変換

6.1. 固有値問題 固有ベクトルの直交性 正規直交基底 行列の対角化

6.2. 座標変換

1. n次元線形空間

n 個の独立な **vector**(大きさと向きを有するもの、矢印で表現する)が形成する空間を n 次元線形空間もしくはベクトル空間 V_n と呼ぶ。 V_n においては n 個より多数のベクトルは独立ではあり得ず、線形従属(**Linearly independent**)となる。即ち V_n において任意のベクトル V は n 個の独立なベクトル $\{V[i] ; i=1,2,...,n\}$ の線形結合により表現できる。

$$V = C[1].V[1] + C[2].V[2] + \dots + C[n].V[n]$$

$\{C[i] \ i=1,2,...,n\}$ は少なくとも一個は零でない定数。

1.1. ベクトルの内積

ベクトル u の大きさ或いは絶対値を $|u|$ で表す。

この時ベクトル u と v の内積(**inner product**)あるいはスカラー積(**scaler product**)を次式により定義する。

$$\langle u, v \rangle = |u| \cdot |v| \cdot \cos(\theta[u, v]) \quad (\theta[u, v] \text{ はベクトル } u, v \text{ のなす角})$$

また内積は以下のように表現する事もある。

$$\langle u, v \rangle = u \cdot v = (u, v)$$

直交

零でない大きさのベクトル u, v が $\langle u, v \rangle = 0$ の時 $\theta[u, v] = \pi/2$ となる。この時ベクトル u と v は互いに**直交する**と言う。

1.2. グラム・シュミットの直交化法(Gram・Schmidt's orthogonalization algorithm)

V_n において独立な n 個のベクトル $v[1], v[2], \dots, v[n]$ は以下の直交化法により n 個の正規直交基底 (**normalized orthogonal base**) $\{e[1], e[2], \dots, e[n]\}$ を形成できる。

$$\begin{aligned} e[1] &= v[1] / |v[1]| \\ e[2] &= \{v[2] - \langle v[2], e[1] \rangle \cdot e[1]\} / |\{v[2] - \langle v[2], e[1] \rangle \cdot e[1]\}| \\ e[3] &= \{v[3] - \langle v[3], e[2] \rangle \cdot e[2] - \langle v[3], e[1] \rangle \cdot e[1]\} \\ &\quad / |\{v[3] - \langle v[3], e[2] \rangle \cdot e[2] - \langle v[3], e[1] \rangle \cdot e[1]\}| \end{aligned}$$

以下同様。

1.3 正規直交系(normalized orthogonal system)

Schmidt の直交化法の結果得られるベクトル群 $\{e[i] ; i=1,2,...,n\}$ は正規直交基底(**base**)を成す。

$$\begin{aligned} \langle e[i], e[j] \rangle &= 1 \quad (i = j) \\ &= 0 \quad (\text{それ以外}) \end{aligned}$$

V_n の任意のベクトル v は正規直交系により次のように表現できる。

$$v = v(1).e[1] + v(2).e[2] + \dots + v(n).e[n]$$

$$= (v(1), v(2), \dots, v(n))$$

但し

$$v(i) = \langle v, e[i] \rangle \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

はベクトル v の第 i 成分(element,要素とも言う)である。

1.4 列(縦)ベクトルと行(横)ベクトル

ベクトル v を以下の様にその要素を横に並べた形式

$$v = (v(1), v(2), \dots, v(n))$$

を行(横)ベクトルと呼び $\langle v |$ (Dirac の Bra vector) で表す。

他方成分を縦に並べたものを列(縦)ベクトルと呼び $|v\rangle$ (Dirac の ket vector) で表す。

$$|v\rangle = \langle v |^t = (v(1), v(2), \dots, v(n))^t$$

ここで $()^t$ は転置(transpose)を示す。

するとベクトル u と v の内積は以下のように Dirac の BraKet で記述できる。

$$\langle u, v \rangle = \langle u | \cdot |v\rangle$$

ここで $[u, \langle v |]$ はベクトルの内積 $\langle u | \cdot |v\rangle$ とは全く異なるので要注意。 $[u, \langle v |]$ は行列を成し、冠積と呼ばれるが、Dirac 流では KetBra であろう。更に実数ベクトルでは内積は $\langle u | |v\rangle = \langle v | |u\rangle$ 即ち交換法則が成り立つが一般に $[u, \langle v |]$ と逆順の $|v\rangle \cdot \langle u |$ は等しくない。

ベクトルの内積を要素で表すと以下ようになる。

$$\langle u, v \rangle = u[1] \cdot v[1] + u[2] \cdot v[2] + \dots + u[n] \cdot v[n]$$

$$\langle u, u \rangle = u[1]^2 + u[2]^2 + \dots + u[n]^2 = |u|^2$$

2. V_n における線形変換(Linear transformation)

2.1 線形変換

V_n におけるベクトル x に変換 T を加えてベクトル y を得るものとする。

$$y = T(x)$$

変換 T が線形(linear)であるとは任意の定数 c_1, c_2 とベクトル x_1, x_2 に対して

$$T(c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2) = c_1 \cdot T(x_1) + c_2 \cdot T(x_2)$$

が成り立つ事である。

今ベクトル x

$$x = x(1) \cdot e[1] + x(2) \cdot e[2] + \dots + x(n) \cdot e[n]$$

に対して線形変換 T を加えると

$$y = T(x) = [i=1,n] \sum x(i).T(e[i])$$

$T(e[i])$ はひとつのベクトルであるので正規直交基底で展開できる。

$$T(e[i]) = [j=1,n] \sum t[i,j] e[j] \quad (i=1,2,3,\dots,n)$$

故に

$$y = [j=1,n] \sum [i] \sum x(i).t[i,j]e[j] = [j=1,n] \sum y(j).e[j]$$

ベクトル y の要素は

$$y(j) = [i=1,n] \sum x(i).t[i,j] \quad (j = 1,2,\dots,n)$$

これは次のように簡潔にかける。

$$\langle y \rangle = \langle x \rangle . [T]$$

2.2 行列(matrix)

上述の如く線形変換 T は行列(Matrix)で表現できる。その $[i,j]$ 要素を前記 $t[i,j]$ とすると

$$T = [i,j=1,n] \sum [e[i] \rangle . t[i,j] . \langle e[j]]$$

これは Dyadic と呼ばれる二次元テンソルである。

本概論においては必要に応じて行列 T を $[T]$ と表記する。また簡単の為に

$$\langle e[j] \rangle = \langle j \rangle, \quad [e(i) \rangle = [i \rangle$$

等と表す。

交換法則

Vector と matrix 演算では一般に交換法則は成り立たない。即ち

$$\langle x \rangle [T] \neq [T] \langle x \rangle$$

証明

前述の変換において x は行ベクトルに展開した。

$$x = x(1).\langle 1 \rangle + x(2).\langle 2 \rangle + \dots + x(n).\langle n \rangle$$

ここで $\langle i \rangle$ は第 i 番目の基底行ベクトル ($\langle i \rangle = \langle e(i) \rangle$) である。

今 $T.x$ を行うには x を列(縦)ベクトルの基底で表現すればよい。

$$\begin{aligned} T.x &= [T] \langle x \rangle \\ &= [i,j,k=1,n] \sum \sum x(k).t[i,j]. [i \rangle . \langle j \rangle . [k \rangle \\ &= [i,j=1,n] \sum \sum x(j).t[i,j]. [i \rangle \\ &= [i=1,n] \sum y'(i) [i \rangle \end{aligned}$$

列ベクトル $\langle y' \rangle$ の要素は

$$y'(i) = [j=1,n] \sum t[i,j].x(j) \quad (i=1,2,\dots,n)$$

前述の結果と比べると行列とベクトルの乗算の順序を変えると結果が異なる。即ち

$$\langle x \rangle . T \neq T . \langle x \rangle$$

2.3 ベクトルの集まりとしての行列

行列は前述のごとく Dyadic で表現できるが、演算の順序によって列(縦)ベクトルの集まりあるいは行(横)ベクトルの集まりとして扱う必要がある。

$$\begin{aligned} T &= [i,j=1,n] \sum [i] \cdot t[i,j] \cdot [j] \\ &= [i=1,n] \sum [i] \cdot \langle t(i) \rangle \quad (\langle t(i) \rangle = [j=1,n] \sum t[i,j] \cdot [j]) \\ &= [j=1,n] \sum [t(j)] \cdot [j] \quad ([t(j)] = [i=1,n] \sum t[i,j] \cdot [i]) \end{aligned}$$

2.4 行列の積

$k=1,2,\dots,m$ について $\langle y(k) \rangle = \langle x(k) \rangle \cdot T$ が成立するものとする。

但し $\langle y(k) \rangle, \langle x(k) \rangle$ は n 個の要素を有する n 元ベクトル、 T は $n \times n$ 正方行列である。

上の行ベクトルを列に並べた行列 Y, X は

$$Y = [k=1,m] \sum [k] \cdot \langle y(k) \rangle = [k=1,m] \sum [k] \cdot \langle x(k) \rangle \cdot T = X \cdot T$$

ただし

$$\begin{aligned} \langle x(k) \rangle &= [l=1,n] \sum x[k,l] \cdot [l] \\ \langle y(k) \rangle &= [j=1,n] \sum y[k,j] \cdot [j] \end{aligned}$$

とおくと

$$\langle x(k) \rangle \cdot T = [l=1,n] \sum [i,j=1,n] \sum x[k,l] \cdot [l] \cdot [i] \cdot t[i,j] \cdot [j]$$

ゆえに

$$y[k,j] = [i=1,n] \sum x[k,i] \cdot t[i,j] \quad (k=1,2,\dots,m, \quad j=1,2,\dots,n)$$

このような Y, X は $m \times n$ 行列である。一般には $m \neq n$ であるが実用的には多くの場合 $m = n$ であり、そのような X, Y は正方行列であると言う。

X, Y, Z を $n \times n$ 行列であるとする。と行列の演算に関して次の性質がある。

- (1) $X \cdot Y \neq Y \cdot X$ 交換法則は成り立たず
- (2) $X \cdot (Y \cdot Z) = (X \cdot Y) \cdot Z$ 結合律は成立する。
- (3) $X \cdot (Y + Z) = X \cdot Y + X \cdot Z$
 $(X + Y) \cdot Z = X \cdot Z + Y \cdot Z$ 分配律は成立する。

3. 行列式

3.1. 定義

前記行列 T の行列式(determinant) $|T|$ は次のように定義される。

$$|T| = [i(1), i(2), \dots, i(n)] \sum \text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)] \cdot t[1, i(1)] \cdot t[2, i(2)] \dots t[n, i(n)]$$

但し $[i(1), i(2), \dots, i(n)] \sum = [i(1)=1,n] \sum [i(2)=1,n] \sum \dots [i(n)=1,n] \sum$

即ち各 $i(m)$ ($m=1,2,\dots,n$) について 1 から n まで総和を取るものである。

置換

ここで $\text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)]$ は数列 $\{i(1), i(2), \dots, i(n)\}$ の並びを一度に二個ずつ入れ替える操作（互換）を繰り返して $(1, 2, \dots, n)$ に置換(permutation)するのに偶数回の互換が必要ならば正、奇数回の互換が必要ならば負の符号をとる。置換の偶奇性は数列で一意的に決まる。

この定義から行列式は以下の性質を持つ

- (1) 各行ベクトルから一個の要素を選んで掛けた積 $t[1, i(1)] \cdot t[2, i(2)] \cdots t[n, i(n)]$ に置換の符号 $\text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)]$ をかけたものをすべての相異なる $i(1), i(2), \dots, i(n)$ の組み合わせについて行い総和をとったものである。組み合わせの数は $n!$ 通りある。
- (2) 上記であらゆる要素の組み合わせを取るので各列ベクトルから要素を選ぶとしても同じ値となる。以下の記述は行を列に言い換えても成り立つ。
- (3) もしも行ベクトルの中に同じベクトル（定数倍は同じベクトル）があれば一回置換しても代わらないが、他方一回の置換で符号は逆になるので $|T| = -|T|$,
即ち $|T| = 0$ となる。列についても同様。
- (4) ある行に別な行(の定数倍)を加えてできる行列の行列式は元の行列式と等しい。
- (5) ある行ベクトルを k 倍すると行列は k 倍になる。

等の性質がある事が分かる。

3.2.余因子行列展開

定義により

$$\begin{aligned} |T| &= [i(1), i(2), \dots, i(n)] \sum \text{sgn}(i(1), i(2), \dots, i(n)) \cdot t[1, i(1)] \cdot t[2, i(2)] \cdots t[n, i(n)] \\ &= [i(1)=1, 2, \dots, n] \sum t[1, i(1)] \cdot (-1)^{i(1)+1} \cdot [i(2), \dots, i(n)] \sum \text{sgn}[i(2), \dots, i(n)] \cdot t[2, i(2)] \cdots t[n, i(n)] \\ &= [i(1)=1, 2, \dots, n] \sum t[1, i(1)] \cdot T[i(1)] \end{aligned}$$

但し

$$T[i(1)] = (-1)^{1+i(1)} \cdot [i(2), \dots, i(n)] \sum \text{sgn}[i(2), \dots, i(n)] \cdot t[2, i(2)] \cdot t[3, i(3)] \cdots t[n, i(n)]$$

である。

上の $T[i(1)]$ を $t[1, i(1)]$ の余因子(co-factor)と言い、上の式を行列式の余因数展開という。

余因子 $T[i(1)]$ は元の行列から要素 $t[1, i(1)]$ に対して 1 行 $i(1)$ 列を除いた小行列の行列式に $\text{Sgn}[i(1)] = (-1)^{i(1)+1}$ を乗じたものに他ならない。このようにして順次小行列の余因子行列展開を繰り返す事により行列式の値を計算する事ができる。

3.3.ベクトル積

三次元ベクトル空間の基底ベクトル $e[1], e[2], e[3]$ について

$$e[i] \times e[i] = 0 \quad (i=1, 2, 3)$$

$$e[i] \times e[j] = -e[j] \times e[i]$$

$$e[1] \times e[2] = e[3]$$

$$e[2] \times e[3] = e[1]$$

$$e[3] \times e[1] = e[2]$$

によってベクトル積あるいは外積を定義する。

ベクトル積の幾何学的意味

ベクトル u, v を以下のように表現する。

$$u = r \cdot \cos(\theta) \cdot e[1] + r \cdot \sin(\theta) \cdot e[2]$$

$$v = r \cdot \cos(\phi) \cdot e[1] + r \cdot \sin(\phi) \cdot e[2]$$

ベクトル積

$$\begin{aligned} u \times v &= r^2 \cdot e[3] \cdot \{\cos(\theta) \cdot \sin(\phi) - \sin(\theta) \cdot \cos(\phi)\} \\ &= r^2 \cdot e[3] \cdot \sin(\theta - \phi) \end{aligned}$$

$u \times v$ は大きさがベクトル u, v の張る平行四辺形の面積に等しく、向きは u, v に直交する。向きは u から v へ回転した場合の右ネジの進行方向である。

他方スカラー積は

$$u \cdot v = (u, v) = r^2 \cdot \cos(\theta - \phi)$$

である。

実数ベクトル u, v の内積は交換律を満足するが外積は満足しない。実際 $u \times v = -v \times u$ となり、符号が反対となる。しかし両者を合わせると次の絶対値の法則が成り立つ。

$$|u \times v|^2 + |u \cdot v|^2 = |u|^2 \cdot |v|^2$$

3.4. V_n 空間における行列式

3.4.1. 二次元行列式

$$\text{行列} \quad T = [1 > .t[1,1].<1] + [1 > .t[1,2].<2] + [2 > .t[2,1].<1] + [2 > .t[2,2].<2]$$

通常これは次のように幾何学的に表現される。

$$T = \begin{bmatrix} t[1,1] & t[1,2] \\ t[2,1] & t[2,2] \end{bmatrix}$$

これに対して行列式は

$$|T| = \begin{vmatrix} t[1,1] & t[1,2] \\ t[2,1] & t[2,2] \end{vmatrix}$$

と表す。

定義に従って計算すると

$$|T| = t[1,1] \cdot t[2,2] - t[1,2] \cdot t[2,1]$$

二次元ベクトル積と行列式

行列 T は二つの行ベクトル $\langle t1 \rangle, \langle t2 \rangle$ を列に(縦に)並べたものと見る事ができる。

$$\langle t1 \rangle = t[1,1].e(1) + t[1,2].e(2)$$

$$\langle t2 \rangle = t[2,1].e(1) + t[2,2].e(2)$$

そこでそれらのベクトル積は

$$\langle t1 \rangle . \langle t2 \rangle = \{ t[1,1].t[2,2] - t[1,2].t[2,1] \} . e(3)$$

$$= |T| . e(3)$$

これはまた行列式で次のように表現できる。

$$|T| = \begin{vmatrix} 0 & 0 & e(3) \\ t[1,1] & t[1,2] & 0 \\ t[2,1] & t[2,2] & 0 \end{vmatrix}$$

3.4.2. 三次元ベクトル積と行列式

二次元の場合と同様にして

$$\langle t1 \rangle = t[1,1].e(1) + t[1,2].e(2) + t[1,3].e(3)$$

$$\langle t2 \rangle = t[2,1].e(1) + t[2,2].e(2) + t[2,3].e(3)$$

のベクトル積は

$$\langle t1 \rangle \times \langle t2 \rangle = \begin{vmatrix} e(1) & e(2) & e(3) \\ t[1,1] & t[1,2] & t[1,3] \\ t[2,1] & t[2,2] & t[2,3] \end{vmatrix}$$

となることを示すことができる。

三個の三次元ベクトル $\langle t1 \rangle, \langle t2 \rangle, \langle t3 \rangle$ からなる行列 T の行列式は余因子展開により

$$\begin{aligned} |T| &= \begin{vmatrix} t[1,1] & t[1,2] & t[1,3] \\ t[2,1] & t[2,2] & t[2,3] \\ t[3,1] & t[3,2] & t[3,3] \end{vmatrix} \\ &= t[1,1].e[1]. \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ t[2,1] & t[2,2] & t[2,3] \\ t[3,1] & t[3,2] & t[3,3] \end{vmatrix} \\ &\quad + t[1,2].e[2]. \begin{vmatrix} 0 & e[2] & 0 \\ t[2,1] & t[2,2] & t[2,3] \\ t[3,1] & t[3,2] & t[3,3] \end{vmatrix} + t[1,3].e[3]. \begin{vmatrix} 0 & 0 & e[3] \\ t[2,1] & t[2,2] & t[2,3] \\ t[3,1] & t[3,2] & t[3,3] \end{vmatrix} \\ &= (\langle t1 \rangle , \langle t2 \rangle \times \langle t3 \rangle) \\ &= (\langle t2 \rangle , \langle t3 \rangle \times \langle t1 \rangle) = (\langle t3 \rangle , \langle t1 \rangle \times \langle t2 \rangle) \end{aligned}$$

即ち三次元行列式とは三つのベクトル<t1],<t2],<t3]が作る立体の体積に他ならない。

3.4.3. n 次元行列と行列式

三次元を拡張して一般の n 次元ベクトル空間における行列と行列式を定義する。それには n 元ベクトルの内積と外積を定義すれば良い。内積は三次元の場合と同様である。

三次元のベクトル積は

$$\begin{aligned} \langle t1 \rangle \times \langle t2 \rangle = & \begin{vmatrix} e(1) & e(2) & e(3) \\ t[1,1] & t[1,2] & t[1,3] \\ t[2,1] & t[2,2] & t[2,3] \end{vmatrix} \end{aligned}$$

これに習って n 次元のベクトル積は

$$\begin{aligned} \langle t(2) \rangle \times \langle t(3) \rangle \times \dots \times \langle t(n) \rangle = & \begin{vmatrix} e(1) & e(2) & \dots & e(n) \\ t[2,1] & t[2,2] & \dots & t[2,n] \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ t[n,1] & t[n,2] & \dots & t[n,n] \end{vmatrix} \end{aligned}$$

と想定する。

n 次元行列 T は

$$\begin{aligned} T &= [i,j=1,n] \sum [i] \cdot t[i,j] \cdot [j] \\ &= [i=1,n] \sum [i] \cdot \langle ti \rangle \quad (\langle ti \rangle = [j=1,n] \sum t[i,j] \cdot [j]) \\ &= [j=1,n] \sum [tj] \cdot [j] \quad ([tj] = [i=1,n] \sum t[i,j] \cdot [i]) \end{aligned}$$

行列式は余因数展開により

$$\begin{aligned} |T| &= [i(1)=1,2,\dots,n] \sum t[1,i(1)] \cdot T[i(1)] \\ T[i(1)] &= (-1)^{(i(1)+1)} \cdot [i(2),\dots,i(n)] \sum \text{sgn}(i(2),\dots,i(n)) \cdot t[2,i(2)] \cdots t[n,i(n)] \end{aligned}$$

余因子ベクトル

上の行列式はひとつの行ベクトル

$$\langle t(1) \rangle = [i(1)=1,2,\dots,n] \sum t[1,i(1)] \cdot [i(1)]$$

とその余因子ベクトル

$$[T(1)] = [i(1)=1,2,\dots,n] \sum T[i(1)] \cdot [i(1)]$$

の内積であると考えられる。

$$|T| = \langle t(1) \rangle \cdot [T(1)]$$

他方三次元の場合の類推から

余因子ベクトル[T(1)]は n 次元のベクトル積<t2] x <t3] x ..., x <tn]でもあるとも考えられる。

以上をまとめると

余因子ベクトルとは

$$\begin{aligned}
|T(1)\rangle = \langle t2 | x \langle t3 | x \dots x \langle tn | &= | \begin{matrix} [1] & t[2,1] & t[3,1] & \dots & t[n,1] \\ [2] & t[2,2] & t[3,2] & \dots & t[n,2] \\ & & & & \\ [n] & t[2,n] & t[3,n] & \dots & t[n,n] \end{matrix} | \\
&= | \begin{matrix} [1] & t[2,1] & t[3,1] & \dots & t[n,1] \\ [2] & t[2,2] & t[3,2] & \dots & t[n,2] \\ & & & & \\ [n] & t[2,n] & t[3,n] & \dots & t[n,n] \end{matrix} |
\end{aligned}$$

行列式は

$$|T| = \langle t(1) | \cdot |T(1)\rangle = (\langle t1 |, \langle t2 | x \langle t3 | x \dots x \langle tn |)$$

と表現される。これは行列 T の転置行列 T^t の行列式に他ならない。故に

$$|T| = |T^t|$$

任意の行の余因子展開

以上は第一行のベクトルとそれに対する余因子ベクトルの内積として行列式を示したが、一般に第 k 行ベクトルについて余因子展開を行う事ができる。この場合は第 k 行を第一行に持ってくるには相隣る行の互換を $k-1$ 回行い更に $t[k, i(k)]$ を第一列に持って来るには $i(k)-1$ 回の互換を行えば良い。

そこで第 k 行の余因子展開は

$$\begin{aligned}
|T| &= \langle t(k) | \cdot |T(k)\rangle \\
&= (\langle t(k) |, \langle t1 | x \langle t2 | x \dots x \langle t(k-1) | x \langle t(k+1) | \dots x \langle tn |)
\end{aligned}$$

但し

$$\begin{aligned}
\langle t(k) | &= [i(k)=1, 2, \dots, n] \sum t[k, i(k)] \cdot \langle i(k) | \\
|T(k)\rangle &= [i(k)=1, n] \cdot T[i(k)] \cdot |i(k)\rangle \\
T[i(k)] &= (-1)^{(i(k)+k)} \cdot [i(k)以外] \sum \text{sgn}[i(1), \dots, i(k-1), i(k+1), \dots, i(n)] \\
&\quad \cdot t[1, i(1)] \cdot t[2, i(2)] \dots t[k-1, i(k-1)] \cdot t[k+1, i(k+1)] \dots t[n, i(n)]
\end{aligned}$$

図式に示すと余因子ベクトルは

$$|T(k)\rangle = \langle t1 | x \langle t2 | x \dots x \langle t(k-1) | x \langle t(k+1) | \dots x \langle tn |$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{vmatrix} t[1,1] & t[2,1] & \dots & t[k-1,1] & [1] & t[k+1,1] & \dots & t[n,1] \\ t[1,2] & t[2,2] & \dots & t[k-1,2] & [2] & t[k+1,2] & \dots & t[n,2] \\ & & & & & & & \\ t[1,n] & t[2,n] & \dots & t[k-1,n] & [n] & t[k+1,n] & \dots & t[n,n] \end{vmatrix}
\end{aligned}$$

となる。

4. 行列の積の行列式

4.1 $|TS| = |T| \cdot |S|$ の証明

二次元の場合

$$T = \begin{bmatrix} t[1,1] & t[1,2] \\ t[2,1] & t[2,2] \end{bmatrix}$$

$$S = \begin{bmatrix} s[1,1] & s[1,2] \\ s[2,1] & s[2,2] \end{bmatrix}$$

直接計算により

$$\begin{aligned} |T.S| &= \begin{vmatrix} t[1,1].s[1,1]+t[1,2].s[2,1] & t[1,1].s[1,2]+t[1,2].s[2,2] \\ t[2,1].s[1,1]+t[2,2].s[2,1] & t[2,1].s[1,2]+t[2,2].s[2,2] \end{vmatrix} \\ &= (t[1,1].s[1,1]+t[1,2].s[2,1]).(t[2,1].s[1,2]+t[2,2].s[2,2]) \\ &\quad - (t[1,1].s[1,2]+t[1,2].s[2,2]).(t[2,1].s[1,1]+t[2,2].s[2,1]) \\ &= (t[1,1].t[2,2]-t[1,2].t[2,1]).(s[1,1].s[2,2]-s[1,2].s[2,1]) \\ &= |T| \cdot |S| \end{aligned}$$

三次元の場合

二次元と同様に直接計算で証明できる。

一般の n 次元の場合

$n \times n$ 正方行列 Y, X, T の関係が

$$Y = X.T$$

であるとする。行列 Y の第 (i,j) 成分は X, T の成分と以下の関係がある。

$$y[i,j] = \sum_{k=1,n} x[i,k] \cdot t[k,j]$$

そこで求める行列式の余因子展開は

$$\begin{aligned} |Y| &= [i(1), i(2), \dots, i(n)] \sum \text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)] \cdot y[1, i(1)] \cdot y[2, i(2)] \dots y[n, i(n)] \\ &= [i(1), i(2), \dots, i(n)] \sum \text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)] \cdot [\sum_{k(1)=1,n} x[1, k(1)] \cdot t[k(1), i(1)] \\ &\quad \cdot \sum_{k(2)=1,n} x[2, k(2)] \cdot t[k(2), i(2)] \dots \sum_{k(n)=1,n} x[n, k(n)] \cdot t[k(n), i(n)]] \\ &= [i(1), i(2), \dots, i(n)] \sum [k(1), k(2), \dots, k(n)] \sum \text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)] \\ &\quad \cdot x[1, k(1)] \cdot t[k(1), i(1)] \cdot x[2, k(2)] \cdot t[k(2), i(2)] \dots x[n, k(n)] \cdot t[k(n), i(n)] \\ &= [i(1), i(2), \dots, i(n)] \sum [k(1), k(2), \dots, k(n)] \sum \text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)] \\ &\quad \cdot x[1, k(1)] \cdot x[2, k(2)] \dots x[n, k(n)] \cdot \\ &\quad \cdot t[k(1), i(1)] \cdot t[k(2), i(2)] \dots t[k(n), i(n)] \\ &= [i(1), i(2), \dots, i(n)] \sum [k(1), k(2), \dots, k(n)] \sum \\ &\quad \cdot \text{sgn}[k(1), k(2), \dots, k(n)] \cdot x[1, k(1)] \cdot x[2, k(2)] \dots x[n, k(n)] \\ &\quad \cdot \text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)] \cdot t[k(1), i(1)] \cdot t[k(2), i(2)] \dots t[k(n), i(n)] \\ &= [k(1), k(2), \dots, k(n)] \sum \text{sgn}[k(1), k(2), \dots, k(n)] \cdot x[1, k(1)] \cdot x[2, k(2)] \dots x[n, k(n)] \\ &\quad \cdot [i(1), i(2), \dots, i(n)] \sum \text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)] \cdot t[1, i(1)] \cdot t[2, i(2)] \dots t[n, i(n)] \\ &= |X| \cdot |T| \end{aligned}$$

上の導出に当たって次の置換の性質を用いた。

$$\text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)] = \text{sgn}[1, 2, \dots, n // i(1), i(2), \dots, i(n)]$$

即ち数列 $i(1), i(2), \dots, i(n)$ を $1, 2, 3, \dots, n$ に並べ換えるのに必要なのが偶数回の互換ならば 1, 奇数回ならば -1 となる。すると

$$\text{sgn}[k(1), k(2), \dots, k(n)] = \text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n)] \cdot \text{sgn}[i(1), i(2), \dots, i(n) // k(1), k(2), \dots, k(n)]$$

別解

行列について

$$\begin{aligned} Y &= X \cdot T = [i] \sum [x(i) > < i] \cdot [k] \sum [k > < t(k)] \\ &= [i] \sum [x(i) > < t(i)] \\ &= [i] \sum [i > < y(i)] \\ < y(i) &= [k] \sum x[i, k] \cdot < t(k) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \end{aligned}$$

内積公式により

$$\begin{aligned} |Y| &= (< y(1), < y(2) \times < y(3) \times \dots \times < y(n)) \\ &= [k(1), k(2), \dots, k(n)] \sum x[1, k(1)] \cdot x[2, k(2)] \dots x[n, k(n)] \\ &\quad \cdot (< t(k(1)), < t(k(2)) \times < t(k(3)) \times \dots \times < t(k(n))) \\ &= [k(1), k(2), \dots, k(n)] \sum \text{sgn}[k(1), k(2), \dots, k(n)] \cdot x[1, k(1)] \cdot x[2, k(2)] \dots x[n, k(n)] \\ &\quad \cdot (< t(1), < t(2) \times < t(3) \times \dots \times < t(n)) \\ &= |X| \cdot |T| \end{aligned}$$

4.2. $|T \cdot S| = |T| \cdot |S|$ の応用

座標変換における体積要素の変換

今座標系 $(x(1), x(2), \dots, x(n))$ と $(y(1), y(2), \dots, y(n))$ を考える。

$$y(i) = f[i](x(1), x(2), \dots, x(n)) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

なる関係がある。 $f[i]$ は x 座標 $(x(1), x(2), \dots, x(n))$ から $y(i)$ を定める関数である。

今微分関係式

$$dy(i) = [j=1, n] \sum \partial y(i) / \partial x(j) \cdot dx(j) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

これは列ベクトルとして考えると

$$\begin{aligned} [dy] &= [i=1, n] \sum [k=1, n] \sum [j=1, n] \sum [i > \partial y(i) / \partial x(j) \cdot < j] \cdot [k > dx(k)] \\ &= T \cdot [dx] \end{aligned}$$

行列とベクトルの積として表現できる。座標変換行列 T は

$$T = [j, i=1, n] \sum [i > y(i) / \partial x(j) \cdot < j]$$

一般に座標系 $\{y(i); i = 1, 2, \dots, n\}$ と $\{x(i); i = 1, 2, \dots, n\}$ の関係は線形とは限らないが、微分形式では線形関係として表現できる。

直交座標系の微分体積

ここで両方の座標系とも直交座標系であるとする。それぞれの微分体積はそれぞれ

$dy(1).dy(2),...,dy(n)$ 及び $dx(1).dx(2),...,dx(n)$ と表現できる。

ここで我々は厳密ではないが行列及び行列式の関係から以下の事を類推する。

行列 Y, X が変換行列 T により $Y = T \cdot X$ なる関係がある時行列式は $|Y| = |T| \cdot |X|$ が成立する。更に行列式の意味は行列を構成するベクトルが成す n 次元立体の体積と解釈できるから今の場合以下の関係が成立すると考えてよかろう。

$$dy(1).dy(2),...,dy(n) = |T| \cdot dx(1).dx(2),...,dx(n)$$

関数行列式 Jacobian

上の $|T|$ は関数行列式、Jacobian と呼ばれ $J[(y1,y2,...,yn)/(x1,x2,...,xn)]$ と表記する。

例 直角座標と球座標

直交座標 (x,y,z) と球座標 (r, θ, ϕ) の関係

$$x = r \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\phi)$$

$$y = r \cdot \sin(\theta) \cdot \sin(\phi)$$

$$z = r \cdot \cos(\theta)$$

Jacobian は

$$\begin{aligned} J((x,y,z)/(r, \theta, \phi)) &= \begin{vmatrix} \sin(\theta) \cdot \cos(\phi) & r \cdot \cos(\theta) \cdot \cos(\phi) & -r \cdot \sin(\theta) \cdot \sin(\phi) \\ \sin(\theta) \cdot \sin(\phi) & r \cdot \cos(\theta) \cdot \sin(\phi) & r \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\phi) \\ \cos(\theta) & -r \cdot \sin(\theta) & 0 \end{vmatrix} \\ &= r^2 \cdot \sin(\theta) \end{aligned}$$

故に体積要素の関係は

$$dx \cdot dy \cdot dz = r^2 \cdot \sin(\theta) \cdot dr \cdot d\theta \cdot d\phi = dr \cdot r \cdot d\theta \cdot r \cdot \sin(\theta) \cdot d\phi$$

5. 連立一次方程式の解法への応用

5.1. 連立一次方程式とその解法

n 個の未知数 $x_1, x_2, ..., x_n$ を含む m 個の一次連立方程式は次の形式を取る。

$$a[1,1] \cdot x(1) + a[1,2] \cdot x(2) + \dots + a[1,n] \cdot x(n) = b(1)$$

$$a[2,1] \cdot x(1) + a[2,2] \cdot x(2) + \dots + a[2,n] \cdot x(n) = b(2)$$

.....

$$a[m,1] \cdot x(1) + a[m,2] \cdot x(2) + \dots + a[m,n] \cdot x(n) = b(m)$$

消去法による解法

(1) $a[1,1] \neq 0$ の場合第二行以下の各 i 行に第一行の $-a[i,1]/a[1,1]$ 倍をかけて加える。

すると第二行以降の最初の項は 0 となる。

(2) 次に第二行以降について上と同様の事を行う。もし $a[i,i]=0$ であれば i より後ろの項と

入れ替えて上の動作を続ける。これは未知数 $x(i)$ の順番を互換する事になる。
 以上の消去法により下記の結果が得られる。

$$\begin{array}{rcl}
 a[1,1].x(1) + a[1,2].x(2) + \dots + a[1,n].x(n) & = & b'(1) \\
 0 + a'[2,2].x(2) + \dots + a'[2,n].x'(n) & = & b'(2) \\
 0 & & + a'[3,n].x'(n) = b'(3) \\
 & & \dots \\
 & & a'[n,n].x'(n) = b'(n) \\
 & & \dots \\
 & & a'[m,n].x'(n) = b'(m)
 \end{array}$$

$m > n$ の場合 $a'(n+1), \dots, a'(m) = 0$ であるから $b'(n+1) = \dots, b'(m) = 0$ の場合だけ解がある。

$m = n$ の場合は $a'[n].x'(n) = b'(n)$ より

- ◆ $a'[n] \neq 0$ なら $x'(n) = b'(n)/a'[n]$ が求まり、それから順に $x'(n-1), \dots, x'(1)$ が求まる。
- ◆ $a'[n] = 0$ の時 $b'[n] \neq 0$ なら解が無い。

$b'[n] = 0$ なら $x'[n]$ は任意となる。この場合は残りの式から $x'[n]$ の項を右辺に移して $n-1$ 元方程式に縮小して解く事ができる。

- ◆ 以上を繰り返してすべての解を求める事ができる。

5.2 行列演算による解法

上の連立方程式は行列形式で次のように表現できる。

$$[A].[x] = [b]$$

ここで $[A]$ は $m \times n$ 元係数行列、 $[x]$ は n 元列ベクトル、 $[b]$ は m 元列ベクトルである。

$$[A] = [i=1,2,\dots,m] \sum [j=1,2,\dots,n] \sum a[i,j].[i]>.<j]$$

$$[x] = [j=1,2,\dots,n] \sum x(j)[j]>$$

$$[b] = [i=1,2,\dots,m] \sum b(i)[i]>$$

行の互換

行列 A に左からかけると p 行と q 行を交換する行列 U を次のように定義する。

$$U = I - [p><p] + [p><q] + [q><p] - [q><q]$$

但し I は $n \times n$ 単位行列である。

実際

$$U.A = A$$

$$\begin{aligned}
 & + \{ -[p><p] + [p><q] + [q><p] - [q><q] \} [i=1,2,\dots,m] \sum [j=1,2,\dots,n] \sum a[i,j].[i]>.<j] \\
 = & A - [j=1,2,\dots,n] \sum a[p,j].[p>.<j] + [j=1,2,\dots,n] \sum a[q,j].[p>.<j] \\
 & + [j=1,2,\dots,n] \sum a[p,j].[q>.<j] - [j=1,2,\dots,n] \sum a[q,j].[q>.<j] \\
 = & A - [p><a(p)] + [p><a(q)] + [q><a(p)] - [q><a(q)]
 \end{aligned}$$

即ち行列 A の縦に p 番目の行ベクトルと q 番目の行ベクトルを入れ替える動作である。

さて

$$\begin{aligned} U \cdot U^t &= \{ I - [p > < p] + [p > < q] + [q > < p] - [q > < q] \} \cdot \{ I - [p > < p] + [p > < q] + [q > < p] - [q > < q] \} \\ &= I + 2(-[p > < p] + [p > < q] + [q > < p] - [q > < q]) \\ &\quad + [p > < p] - [p > < q] + [p > < p] - [p > < q] - [q > < p] + [q > < q] - [q > < p] + [q > < q] \\ &= I \end{aligned}$$

故に $U^t \cdot U = I$

即ち U と U^t は互いに逆行列である。

問題 上の U を行列 A の右からかけると A の p 番目と q 番目の列を入れ替える事を示せ。

行の加算

左側からかけて A の p 番目の行に q 番目の行の定数 c 倍を加える行列 V は

$$V = I + c \cdot [p > < q]$$

である。

ここでは係数行列 A が正則、即ち逆行列がある場合を扱う。正則でない場合には前述の方法で縮小して正則な場合に変える事ができる。

ここでは行列 A を列ベクトルの集まりとして扱う。

$$\begin{aligned} [A] &= [j=1,2,\dots,n] \sum [a[j] > < j] \\ [a[j] > &= [i=1,2,\dots,m] \sum a[i,j] \cdot [i > \end{aligned}$$

各列ベクトル $[a[j] >$ の余因子ベクトルを $< A[j]$ と書くと

余因子ベクトルと A の列ベクトルの内積については次の関係がある。

$$\begin{aligned} < A[j] \cdot [a[i] > &= |A| \quad (i=j) \\ &= 0 \quad (i \neq j) \end{aligned}$$

そこで余因子行列 $[A^c]$ を次のように定義する。

$$[A^c] = [i=1,2,\dots,n] \sum [i > < [A[j]]$$

すると次の関係が成り立つ。

$$[A^c] \cdot [A] = |A| \cdot [I]$$

但し $[I]$ は単位行列 (対角成分はすべて 1, それ以外の要素はすべて 0 である行列) である。

$$[A^c] = [i=1,2,\dots,n] \sum [j > < A[i]]$$

そこで連立方程式の行列による解法はつぎのようになる。

$$[A][x > = [b >$$

に対して

$$[A^c] \cdot [A][x > = |A| [x > = [A^c] [b >$$

その要素は

$$x(i) = \langle A[i], b \rangle / |A| \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

$$= \begin{vmatrix} a[1,1] & a[1,2] & \dots & a[1,i-1] & b[1] & a[1,i+1] & \dots & a[1,n] \\ a[2,1] & a[2,2] & \dots & a[2,i-1] & b[2] & a[2,i+1] & \dots & a[2,n] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a[n,1] & a[n,2] & \dots & a[n,i-1] & b[n] & a[n,i+1] & \dots & a[n,n] \end{vmatrix} / |A|$$

これを **Cramer** の公式という。

6. 固有値問題と座標変換

6.1. 固有値問題

n 次元ベクトル空間 V_n に於いてベクトル x に線形変換 T を施すと一般に異なるベクトル y に変換される。 $y = T.x$

ベクトル y が定数係数 λ を除いてベクトル x に等しい場合を研究してみよう。

$$T.x = \lambda x$$

これより

$$(T - \lambda I).x = 0$$

ただし I は n 次元単位行列である。

零でないベクトル x に対してこれが成り立つためには **Cramer** の公式により

$$|T - \lambda I| = 0$$

でなくてはならない。その根を $\lambda(i)$ ($i=1,2,\dots,n$) とすると

$$T.e(i) = \lambda(i).e(i) \quad (i=1,2,\dots,n)$$

ここで $\lambda(i)$ を固有値、 $e(i)$ を固有ベクトルと言う。

固有ベクトルの直交性

今異なる固有値について考える。

$$T.e(i) = \lambda(i).e(i) \quad T.e(j) = \lambda(j).e(j)$$

両者の内積を取ると

$$\langle e(j), T.e(i) \rangle = \lambda(i). \langle e(j), e(i) \rangle$$

$$\langle e(i), T.e(j) \rangle = \lambda(j). \langle e(i), e(j) \rangle$$

右辺の内積については交換律が成り立つから両式の差を取ると

$$\langle e(j), T.e(i) \rangle - \langle e(i), T.e(j) \rangle = (\lambda(i) - \lambda(j)). \langle e(j), e(i) \rangle$$

そこでもし

$$\langle e(j), T.e(i) \rangle - \langle e(i), T.e(j) \rangle = 0$$

であれば異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する事が分かる。

このような変換を直交変換という。

$$\langle e(j), T.e(i) \rangle = \langle e(i), T.e(j) \rangle$$

正規直交基底

同じ固有値に対する固有ベクトルはグラム・シュミットの方法で直交化できる。こうして n 次元ベクトル空間 V_n の直交変換 T の固有ベクトル $\{e(i); i=1,2,\dots,n\}$ から成る正規直交基底が得られる。

行列の対角化

行列 T の固有ベクトルによりつくられる下記行列を E とする。

$$E = [j=1,2,\dots,n] \sum [e(j)><j]$$

その転置行列は

$$E^t = [i=1,2,\dots,n] \sum [i><e(i)]$$

両者の関係は

$$\begin{aligned} E^t, E &= [i=1,2,\dots,n] \sum [i><e(i)] \cdot [j=1,2,\dots,n] \sum [e(j)><j] \\ &= [i=1,2,\dots,n] \sum [i><i] \\ &= I \text{ (単位行列)} \end{aligned}$$

即ち E^t は E の逆行列である。

次の演算により

$$\begin{aligned} E^t.T.E &= [i=1,2,\dots,n] \sum [i><e(i)] \cdot T \cdot [j=1,2,\dots,n] \sum [e(j)><j] \\ &= [i=1,2,\dots,n] \sum [i><e(i)] \cdot [j=1,2,\dots,n] \sum T.[e(j)><j] \\ &= [i=1,2,\dots,n] \sum [i><e(i)] \cdot [j=1,2,\dots,n] \sum \lambda(j) \cdot [e(j)><j] \\ &= [i=1,2,\dots,n] \sum [j=1,2,\dots,n] \sum \lambda(j) [i><e(i)].[e(j)><j] \\ &= [i=1,2,\dots,n] \sum \lambda(i) [i><i] \end{aligned}$$

即ち対角線に固有値が並びそれ以外の要素は零になる。

6.2.座標変換

上の事柄を吟味するともとの直角座標系に於いて行列 T で表されるものが T が**直交変換であれば**その固有ベクトルから形成される正規直交基底により T が対角行列となる座標系に変換される事を示している。

元の座標系においてベクトル x で表せるものが新たな座標系において $x' = E^t.x$ で表せるものとする。この時 $x = E.x'$ となる。

そこでもとの座標系で $y = T.x$ なる関係は $E.y' = T \cdot E.x'$ となる。

これより $y' = (E^t.T.E).x' = T'.x'$ となる。新たな座標系において変換 T は対角行列 T' になる。