線形代数 II 第 5 回講義資料

担当：大矢 浩徳 (OYA Hironori)*

以下では $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ または $\mathbb{C}$ とする．単に「n 次正方行列」と書いた時には $\mathbb{K}$ の元を成分とする n 次正方行列を考えているとする．

今回は $\mathbb{K}^n$ の基底という概念を学び，この概念を元に『対角化とは何をしているのか』ということをとらえ直す．これは後に線形空間論で一般化される話の見本となるような考え方であり，難しい部分もあると思うが是非頑張って理解してもらいたい．後半では次回の準備として，$\mathbb{K}^n$ に内積を考え，ベクトルの大きさや，直交性について説明を行う．

5.1　$\mathbb{K}^n$ の基底

第 4 回の講義資料命題 4.3 では正則性と一次独立性の関係について述べた：

命題 4.3 (再掲)

n 次正方行列 P に対し，P の i 列目の列ベクトルを $\boldsymbol{p}_i$ と書くことにする (つまり，$P = (\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n)$)．このとき，以下は同値である．

(1) P は正則．

(2) $\boldsymbol{p}_1, \ldots, \boldsymbol{p}_n$ は一次独立．

$\mathbb{K}^n$ における一次独立性・従属性というのは n 個以外のベクトル対しても意味を持つ概念であるが (例えば第 4 回講義資料例 4 には $\mathbb{K}^3$ における 2 個の一次独立なベクトルの組が紹介されている)，$\mathbb{K}^n$ における$\underline{n \text{ 個}}$の一次独立なベクトルは次のような特別な性質をもつ．

命題 5.1

$\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n$ を $\mathbb{K}^n$ における一次独立なベクトルの組とする．このとき，任意の $\mathbb{K}^n$ の元は $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n$ の一次結合としてただ一通りに表される．つまり，任意の $\boldsymbol{v} \in \mathbb{K}^n$ に対し，ある $c_1, c_2, \ldots, c_n \in \mathbb{K}$ がただ一通りに定まり，

$$\boldsymbol{v} = c_1\boldsymbol{b}_1 + c_2\boldsymbol{b}_2 + \cdots + c_n\boldsymbol{b}_n$$

となる．

証明． 列ベクトル $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n$ を並べて n 次正方行列 $B = (\boldsymbol{b}_1 \cdots \boldsymbol{b}_n)$ を作る．このとき命題 4.3 より，B は正則である．いま，$c_1, \ldots, c_n \in \mathbb{K}$ に対して，

$$c_1\boldsymbol{b}_1 + c_2\boldsymbol{b}_2 + \cdots + c_n\boldsymbol{b}_n = (\boldsymbol{b}_1 \cdots \boldsymbol{b}_n)\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = B\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

であることに注意すると，今示すべきことは任意の $\boldsymbol{v} \in \mathbb{K}^n$ に対して，ある $c_1, \ldots, c_n \in \mathbb{K}$ がただ一通りに定まり，

$$B\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \boldsymbol{v}$$

* *e-mail*：hoya@shibaura-it.ac.jp

となるということである．このためにはこの式を B を係数行列，$c_1,\dots,c_n$ を未知数とする連立一次方程式とみて，その解がただ一つだけ定まることを言えばよいが，いま B が正則であることよりこの主張は正しい．実際，任意の $\boldsymbol{v}\in\mathbb{K}^n$ に対して $\begin{pmatrix}c_1\\ \vdots\\ c_n\end{pmatrix}=B^{-1}\boldsymbol{v}$ とすれば上の式は成立し，逆に上の式を成立させるためには，$\begin{pmatrix}c_1\\ \vdots\\ c_n\end{pmatrix}$ をこのように取るしかない．よって，命題は示された． □

命題 5.1 は『$\mathbb{K}^n$ における一次独立なベクトルの組 $\boldsymbol{b}_1,\dots,\boldsymbol{b}_n$ は $\mathbb{K}^n$ の標準的な座標に代わる新たな座標 (“目盛り”) として使える』ということを主張している．実際，

$$\boldsymbol{v}=c_1\boldsymbol{b}_1+c_2\boldsymbol{b}_2+\cdots+c_n\boldsymbol{b}_n$$

と表されるとき，$\boldsymbol{v}$ に対して $\begin{pmatrix}c_1\\ \vdots\\ c_n\end{pmatrix}$ を対応させることにすると，これは新たな座標を与えていると考えることができる：

$$\mathbb{K}^n\ni\boldsymbol{v}=c_1\boldsymbol{b}_1+c_2\boldsymbol{b}_2+\cdots+c_n\boldsymbol{b}_n\leftrightarrow\begin{pmatrix}c_1\\ \vdots\\ c_n\end{pmatrix}\in\mathbb{K}^n$$

これは “通常の座標” が

$$x_1\boldsymbol{e}_1+x_2\boldsymbol{e}_2+\cdots+x_n\boldsymbol{e}_n=\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_n\end{pmatrix}$$

というものであったことと比較するとわかりやすい考え方であろう．つまり，『$\boldsymbol{b}_1,\dots,\boldsymbol{b}_n$ は $\boldsymbol{e}_1,\dots,\boldsymbol{e}_n$ の代わりとして使える』ということである．

この視点から『対角化とは何か』ということを見直してみる．n 次正方行列 A は n 個の一次独立な固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1,\dots,\boldsymbol{p}_n$ を持つときに対角化可能で，$P=(\boldsymbol{p}_1\cdots\boldsymbol{p}_n)$ とすると，$P^{-1}AP$ が対角行列となるのであった．このとき命題 5.1 から，任意の $\boldsymbol{v}\in\mathbb{K}^n$ は

$$\boldsymbol{v}=c_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+c_n\boldsymbol{p}_n,\quad c_1,\dots,c_n\in\mathbb{K}$$

の形に一通りに表すことができるので，上での議論したように『$\boldsymbol{p}_1,\dots,\boldsymbol{p}_n$ は $\boldsymbol{e}_1,\dots,\boldsymbol{e}_n$ の代わりとして使う』ということを考えてみる．すると，

$$A\boldsymbol{v}=c_1A\boldsymbol{p}_1+\cdots+c_nA\boldsymbol{p}_n=c_1\lambda_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+c_n\lambda_n\boldsymbol{p}_n$$

(ただし λ_i は $\boldsymbol{p}_i$ に対応する固有値) となり，$\mathbb{K}^n$ において『A を掛ける』という操作で表される変換 (一次変換という) が非常に簡単に計算できることがわかる．つまり，

$$c_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+c_n\boldsymbol{p}_n\leftrightarrow\begin{pmatrix}c_1\\ \vdots\\ c_n\end{pmatrix}$$

という対応で考えてみると，A を掛けるという変換は

$$\begin{pmatrix}c_1\\ \vdots\\ c_n\end{pmatrix}\mapsto\begin{pmatrix}\lambda_1c_1\\ \vdots\\ \lambda_nc_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\lambda_1&0&\cdots&0\\ 0&\lambda_2&\ddots&\vdots\\ \vdots&\ddots&\ddots&0\\ 0&\cdots&0&\lambda_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ \vdots\\ c_n\end{pmatrix}$$

という対角行列を掛ける変換とみることができる．これが『対角化の意味』である．気持ちを説明すると，『n 次正方行列 A が複雑に見えるのは通常の座標の取り方が A に合っていないからで，適切な座標をとると，A が綺麗な形に見えるようになる』と言った具合である．これは見方として結構面白いのではないだろうか．

後で一般の線形空間 (ベクトル空間) を学ぶときに似たような考え方をする．用語を少し先取りして説明しておこう．

定義 5.2

$\mathbb{K}^n$ の部分集合 B が次の性質 (1)，(2) を満たすとき，B を $\mathbb{K}^n$ の**基底**という．

(1) B は一次独立である．

(2) 任意の $\mathbb{K}^n$ の元は B の元の一次結合として表される．つまり，任意の $\boldsymbol{v} \in \mathbb{K}^n$ に対し，ある $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_k \in B$ と $c_1, \ldots, c_k \in \mathbb{K}$ が存在し，

$$\boldsymbol{v} = c_1\boldsymbol{b}_1 + \cdots + c_k\boldsymbol{b}_k$$

となる．((2) の条件を『$\mathbb{K}^n$ は B の元で**生成される**』，または『$\mathbb{K}^n$ は B によって**張られる**』という．)[*1]

この言葉を使うと，命題 5.1 は

『$\mathbb{K}^n$ における一次独立な n 個のベクトル $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n$ からなる集合 $\{\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n\}$ は $\mathbb{K}^n$ の基底をなす』

というように言い換えられる．実は，逆の『$\mathbb{K}^n$ における任意の基底 B は一次独立な n 個のベクトルからなる集合である』という方向も正しい．これについては先の講義で扱うが，気になる方は理由を自分で考えてみて欲しい．これを認めると，対角化可能性の同値条件 (定理 4.4) も次のように言い直すことができる．

定理 5.3

n 次正方行列 A に対し，以下は同値である．

(1) A は対角化可能．

(2) $\mathbb{K}^n$ が A の固有ベクトルからなる基底を持つ．

次に『対角化とは何か』という説明のところで書いた議論をもう少し一般的に書いておこう．この話も後に線形空間論のところで『表現行列』という形で一般化される話であるが，その先取りである．

[*1] 定義 5.2 (2) の条件には命題 5.1 にあった『ただ一通りに』という条件が入っていないが，実はこれは条件 (1) から自動的に導かれる．実際，ある $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_k \in B$(各 $\boldsymbol{b}_i$ らは相異なるとする) と $c_1, \ldots, c_k, c'_1, \ldots, c'_k, \in \mathbb{K}$ が存在し，

$$c_1\boldsymbol{b}_1 + \cdots + c_k\boldsymbol{b}_k = c'_1\boldsymbol{b}_1 + \cdots + c'_k\boldsymbol{b}_k$$

となったと仮定すると，移項して，

$$(c_1 - c'_1)\boldsymbol{b}_1 + \cdots + (c_k - c'_k)\boldsymbol{b}_k = \boldsymbol{0}$$

となるが，B の一次独立性 (条件 (1)) により，このとき

$$c_1 - c'_1 = \cdots = c_k - c'_k = 0$$

つまり，

$$c_1 = c'_1,\ c_2 = c'_2, \ldots, c_k = c'_k$$

となる．これより，上での議論と同様に基底は $\mathbb{K}^n$ の “座標を与えるもの” というように考えられる．

定理 5.4

$\{\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n\}$ を $\mathbb{K}^n$ の基底とし，$B = (\boldsymbol{b}_1 \cdots \boldsymbol{b}_n)$ をこの基底の元を並べてできる n 次正則行列とする．このとき，

$$\mathbb{K}^n \ni c_1\boldsymbol{b}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{b}_n \leftrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \in \mathbb{K}^n$$

というように，$\mathbb{K}^n$ の各元を $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n$ の一次結合で表した時の係数に着目して再び $\mathbb{K}^n$ の元で表示することにすると，もとの $\mathbb{K}^n$ において，A を (左から) 掛けるという変換は，新しい元の表示では $B^{-1}AB$ を $\mathbb{K}^n$ に (左から) 掛けるという変換で表されることになる．

証明． $A(c_1\boldsymbol{b}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{b}_n) = c_1A\boldsymbol{b}_1 + \cdots + c_nA\boldsymbol{b}_n$ を再び $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n$ の一次結合で表して，

$$c_1A\boldsymbol{b}_1 + \cdots + c_nA\boldsymbol{b}_n = c'_1\boldsymbol{b}_1 + \cdots + c'_n\boldsymbol{b}_n$$

となったとする．このとき，$\boldsymbol{b}_i = B\boldsymbol{e}_i, B^{-1}\boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{e}_i$, $(i = 1, \ldots, n)$ に注意して (例えば命題 4.3 の証明 (1) $\Rightarrow$ (2) 参照) 両辺に B^{-1} を掛けると，

$$c_1B^{-1}AB\boldsymbol{e}_1 + \cdots + c_nB^{-1}AB\boldsymbol{e}_n = c'_1\boldsymbol{e}_1 + \cdots + c'_n\boldsymbol{e}_n$$

となる，ここで，左辺を $B^{-1}AB(c_1\boldsymbol{e}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{e}_n)$ とまとめ，$c_1\boldsymbol{e}_1 + \cdots + c_n\boldsymbol{e}_n, c'_1\boldsymbol{e}_1 + \cdots + c'_n\boldsymbol{e}_n$ をそれぞれ成分表示すると，

$$B^{-1}AB \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c'_1 \\ \vdots \\ c'_n \end{pmatrix}$$

となる．これは示したかった主張そのものである． □

定理 5.4 の見方をすると，前回紹介した以下の定理 4.1 にもう少し意味を持たせられる．

定理 4.1 (再掲)

任意の n 次正方行列 A と任意の n 次正則行列 X に対し，A の固有多項式と，$X^{-1}AX$ の固有多項式は一致する．つまり，n 次正方行列 A の固有多項式を $\Phi_A(t)$ と書くことにするとこのとき，

$$\Phi_A(t) = \Phi_{X^{-1}AX}(t)$$

である．

これは，要するに『固有多項式は $\mathbb{K}^n$ の基底を取り替えて行列の "見方" を変えても変わらないものである』という定理だったのである．固有多項式 (そしてそこからわかる固有値) が "座標の取り方" というある意味人工的なものに依らない本質的な量であるということを実感していただけたのではないだろうか．

注意 1. n 次正方行列 A の対角成分の和をトレースといい，$\mathrm{Tr}(A)$ と書くのであった (第 3 回講義資料 p.5 注意 1)．つまり，A の (i, j) 成分を a_{ij} と書くことにすると，

$$\mathrm{Tr}(A) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$$

である．このとき，任意の n 次正方行列 $A = (a_{ij})_{i,j=1,\ldots,n}, B = (b_{ij})_{i,j=1,\ldots,n}$ に対して，

$$\mathrm{Tr}(AB) = \sum_{i=1}^{n}(\sum_{k=1}^{n} a_{ik}b_{ki}) = \sum_{k=1}^{n}(\sum_{i=1}^{n} b_{ki}a_{ik}) = \mathrm{Tr}(BA)$$

が成立するので，特に任意の n 次正方行列 A と任意の n 次正則行列 X に対し，

$$\mathrm{Tr}(X^{-1}AX) = \mathrm{Tr}(AXX^{-1}) = \mathrm{Tr}(A)$$

となる．よって，トレースも $\mathbb{K}^n$ の基底の取り方によらず定まる重要な値であることがわかる．

5.2 $\mathbb{K}^n$ における内積と正規直交基底

5.1 節では基底という概念を導入し，単位ベクトルのなす集合『$\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n$ の代わりとして使えるもの』という説明を行った．しかし，実際には $\{\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n\}$ という基底は，一般の基底に比べてもう少し特別である．それは，

(I) 各元 $\boldsymbol{e}_i$ の大きさが 1 である．

(II) $i \neq j$ のとき，$\boldsymbol{e}_i$ と $\boldsymbol{e}_j$ は直交している．つまり，$\{\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_n\}$ は互いに直交しあうベクトルからなっている，

という性質があるところである．ここで，“大きさ” や “直交” という概念が出てきたが，これらは (特に 4 次元以上の場合) どのように定義していただろうか? ここでは，内積という概念を導入し，これらの意味を明確にしつつ，(I)，(II) のような性質を持つ基底について考察する[*2]．

定義 5.5

$\mathbb{K}^n$ の 2 元 $\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix}$ に対し，

$$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} \coloneqq \begin{cases} v_1 w_1 + \cdots + v_n w_n & \mathbb{K} = \mathbb{R} \text{ のとき，} \\ \overline{v_1} w_1 + \cdots + \overline{v_n} w_n & \mathbb{K} = \mathbb{C} \text{ のとき，} \end{cases}$$

とする．ここで，$z = a + bi \in \mathbb{C}$ に対し，$\overline{z}$ は z の複素共役 $a - bi$ である $(a, b \in \mathbb{R}, i = \sqrt{-1})$．
$\mathbb{K} = \mathbb{R}$ のときこの写像 $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) \mapsto \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w}$ を**内積**と呼び，$\mathbb{K} = \mathbb{C}$ のときこの写像 $\mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}, (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) \mapsto \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w}$ を**エルミート内積**と呼ぶ．ただし，本講義では $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ または $\mathbb{C}$ のとき，これらの写像 $\mathbb{K}^n \times \mathbb{K}^n \to \mathbb{K}, (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) \mapsto \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w}$ をどちらも単に $\mathbb{K}^n$ の内積と呼ぶことにする．

注意 2. $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ のとき $\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = v_1 w_1 + \cdots + v_n w_n$ であるが，$x \in \mathbb{R}$ に対しては $\overline{x} = x$ なので，$\mathbb{K} = \mathbb{R}$ のときも

$$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = \overline{v_1} w_1 + \cdots + \overline{v_n} w_n$$

と書いて間違いではない (少々奇妙だが…)，このため，以下では $\mathbb{K}^n$ における内積を常に，

$$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = \overline{v_1} w_1 + \cdots + \overline{v_n} w_n$$

と書くことにする．これは $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ のときと $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ のときで毎回場合分けして証明などを記述する必要が無いようにするための工夫である．

以下は内積の基本性質である．

[*2] ここまで，“進んで勉強している方は $\mathbb{K}$ を一般の体 (field) として良い” として話を進めてきたが，内積が関係する議論についてはある内積の値が正になることを使う部分や，大きさを定義する際にルートをとるという操作が入る部分があるので一般の体では通用しないところがある．このため，本節以降は $\mathbb{K}$ は “本当に”$\mathbb{R}$ または $\mathbb{C}$ であると思って読んでいただきたい．

命題 5.6

$\mathbb{K}^n$ の内積は以下を満たす：

(1) 任意の $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in \mathbb{K}^n$ に対し，$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = \overline{\boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{v}}$.

(2) 任意の $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in \mathbb{K}^n$ に対し，$(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{w} = \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{w} + \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w}$，$\boldsymbol{u} \cdot (\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{v} + \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{w}$.

(3) 任意の $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in \mathbb{K}^n$，$c \in \mathbb{K}$ に対し，$(c\boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{w} = \overline{c}(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w})$，$\boldsymbol{v} \cdot (c\boldsymbol{w}) = c(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w})$.

(4) 任意の $\boldsymbol{v} \in \mathbb{K}^n$ に対し，$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} \geq 0$，さらに，$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} = 0$ ならば $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$.

ただし，$\mathbb{K} = \mathbb{R}$ のときは，$x \in \mathbb{R}$ に対して，$\overline{x} = x$ なので，上にある複素共役は全て無視して良い．(例えば，$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = \boldsymbol{w} \cdot \boldsymbol{v}$ 等).

証明． (1), (2), (3) の証明は容易なので省略する (各ベクトルを成分表示すれば直ちにわかる)．(4) の証明も難しくないが，大事なのでここで解説する．任意の $\boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \in \mathbb{K}^n$ に対して，

$$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} = \overline{v_1}v_1 + \cdots + \overline{v_n}v_n \geq 0$$

である．ここで，$z = a + bi \in \mathbb{C}(a, b \in \mathbb{R})$ に対し，$\overline{z}z = (a-bi)(a+bi) = a^2 + b^2 (= |z|^2) \geq 0$ であることに注意する．$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v} = 0$ となるのは，全ての $i = 1, \ldots, n$ に対して，$|v_i|^2 = \overline{v_i}v_i = 0$ となるときであるが，こうなるのは $v_i = 0$ のときだけなので，結局このとき $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$ である． □

注意 3. $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ のときに，内積を $v_1w_1 + \cdots + v_nw_n$ ではなく $\overline{v_1}w_1 + \cdots + \overline{v_n}w_n$ と定義したのは，命題 5.6 の (4) の性質を得るためである．複素共役を付けないとすると，例えば $\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$ に対して，

$$\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = 1^2 + i^2 = 1 - 1 = 0$$

というようになってしまい，自分自身との内積の値が 0 であるような $\boldsymbol{0}$ でないベクトルができてしまう．すぐ下で $\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v}$ の値を用いて $\boldsymbol{v}$ の『大きさ』を定義するが，これだと大きさが 0 であるような $\boldsymbol{0}$ でないベクトルがあるように見え，あまり良い定義ではないことが納得できるだろう．他にも $\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v}$ が大きさと関係していて欲しいと考えると，その値は 0 以上の実数になっていてほしいところであるが，複素共役を付けないと，$\begin{pmatrix} 1 \\ 1+i \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$ に対して，

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1+i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1+i \end{pmatrix} = 1^2 + (1+i)^2 = 1 + 2i$$

というように値が複素数になることもあり，やはりこれは良い定義とは思えない．

複素共役を付けた正しい内積の定義では，

$$\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = 1 \cdot 1 + (-i) \cdot i = 1 + 1 = 2$$
$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1+i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1+i \end{pmatrix} = 1 \cdot 1 + (1-i) \cdot (1+i) = 1 + 2 = 3$$

というようにちゃんと 0 以上の実数の値が出る．

注意 4. 本によっては，$\mathbb{C}^n$ の内積の定義を，

$$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = v_1\overline{w_1} + \cdots + v_n\overline{w_n}$$

にしているものもある．この場合，命題 5.6 の (1)，(2)，(4) は全く同様に成立し，(3) は

(3)′ 任意の $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in \mathbb{C}^n$，$c \in \mathbb{C}$ に対し，$(c\boldsymbol{v}) \cdot \boldsymbol{w} = c(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w})$，$\boldsymbol{v} \cdot (c\boldsymbol{w}) = \overline{c}(\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w})$.

に変わる．

定義 5.7

- $\boldsymbol{v} \in \mathbb{K}^n$ に対し，$||\boldsymbol{v}|| = \sqrt{\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{v}}$ を $\boldsymbol{v}$ の**大きさ**という．命題 5.6 (4) より，これは 0 以上の実数である．
- $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in \mathbb{K}^n$ に対し，$\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{w} = 0$ のとき，$\boldsymbol{v}$ と $\boldsymbol{w}$ は**直交する**という．
- $B = \{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ を $\mathbb{K}^n$ の基底とする．ここで，

$$\boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_j = \begin{cases} 1 & i = j \text{ のとき,} \\ 0 & i \neq j \text{ のとき,} \end{cases}$$

が成立するとき，B を $\mathbb{K}^n$ の**正規直交基底**という．つまり，正規直交基底とは，各元の大きさが全て 1 で互いに直交するベクトルからなる $\mathbb{K}^n$ の基底のことである．

正規直交基底と直交行列・ユニタリ行列は以下のように関係している：

命題 5.8

(I) $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ とする．n 次実正方行列 A に対し，A の i 列目の列ベクトルを $\boldsymbol{a}_i$ と書くことにする (つまり，$A = (\boldsymbol{a}_1 \cdots \boldsymbol{a}_n)$)．このとき，以下は同値である．

(1) A は直交行列である．つまり，${}^tAA = I_n$ である．

(2) $\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n\}$ は正規直交基底である．

(II) $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ とする．n 次複素正方行列 A に対し，A の i 列目の列ベクトルを $\boldsymbol{a}_i$ と書くことにする．このとき，以下は同値である．

(1) A はユニタリ行列である．つまり，$A^*A = I_n$ である．ここで，$A^* := {}^t\overline{A}$ (A を転置し，各成分の複素共役をとったもの)．

(2) $\{\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n\}$ は正規直交基底である．

証明. 任意の n 次正方行列 $A = (a_{ij})_{i,j=1,\ldots,n}, B = (b_{ij})_{i,j=1,\ldots,n}$ に対して，積 A^*B の (i,j) 成分は，A^* の (i,j) 成分が $\overline{a_{ji}}$ であることに注意すると，

$$\overline{a_{1i}}b_{1j} + \cdots + \overline{a_{ni}}b_{nj} = \boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j$$

(ここで，$\boldsymbol{a}_i$ は A の i 列目の列ベクトル，$\boldsymbol{b}_i$ は B の i 列目の列ベクトル) となる．これより，

$$A^*A = I_n \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{a}_j = \begin{cases} 1 & i = j \text{ のとき,} \\ 0 & i \neq j \text{ のとき,} \end{cases}$$

となるので (II) は示された．(I) は上の議論で複素共役を全て無視すればよい． □

例 1. 注意 3 での計算より，

$$\left|\left|\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}\right|\right| = \sqrt{\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}} = \sqrt{2}$$

$$\left|\left|\begin{pmatrix} 1 \\ 1+i \end{pmatrix}\right|\right| = \sqrt{\begin{pmatrix} 1 \\ 1+i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1+i \end{pmatrix}} = \sqrt{3}$$

である．

例 2. $\begin{pmatrix} -1 \\ 2i \\ 1 \end{pmatrix}$ と $\begin{pmatrix} 1 \\ i \\ -1 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^3$ は直交する．実際，

$$\begin{pmatrix} -1 \\ 2i \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ -1 \end{pmatrix} = (-1) \cdot 1 + (-2i) \cdot i + 1 \cdot (-1) = -1 + 2 - 1 = 0$$

となる．

例 3. $\left\{ \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix} \right\}$ は $\mathbb{R}^3$ の正規直交基底である．実際，

$$A = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 1/2 & 1/2 \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

とすると，

$${}^tAA = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 1/2 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \\ 1/2 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 1/2 & 1/2 \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となるので，A は直交行列である (命題 5.8 (I) を用いてチェックした)．

次回，実対称行列は直交行列を用いて，エルミート行列はユニタリ行列を用いて対角化されるということを証明する．これは 5.1 節 (定理 5.3 参照) での考え方を思い出すと，実対称行列やエルミート行列は固有ベクトルからなる正規直交基底を持つということである．この話は応用の多い重要な話となる．(お楽しみに！)