1　行列とその演算

1.1　行列とベクトル

行列：　次のように、縦に m 個、横に n 個の数を並べた「かたまり」を行列と呼ぶことにしよう。

$$m\left\{\overbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}}^{n}\right.$$

行列はそれ自身を一つの文字で表すと簡潔なことが多い、たとえば

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \tag{1.1.1}$$

のように。また、行列を構成しているそれぞれの数のことを「行列の成分」と呼ぶことにする。この例のように、縦に m 個、横に n 個の成分が並んだ行列は、$m \times n$ 行列、とか (m, n) 行列などと呼ばれる。二つの行列があって、それらの m と n のいずれか一方でも異なるとき、それらは「型」の違う行列であるという。

　行列の成分は、置かれている位置によって番号付けられている。番号付のルールは「上から i 番目、左から j 番目にある成分を a_{ij} と書く」、つまり

$$\begin{array}{cc} & j \\ i & \begin{pmatrix} & & \\ & a_{ij} & \\ & & \end{pmatrix} \end{array}$$

のようなものである。この a_{ij} を「行列 A の (i, j) 成分」と呼ぼう。i を行の添字、j を列の添字ということが一般的である。

ベクトル：　行列の中でも、特に $m \times 1$ 行列は重要で、よく太い文字を用いて

$$\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} \tag{1.1.2}$$

のように書かれる。$\boldsymbol{a}$ はもちろん行列だが、列成分は一つだけ $(n = 1)$ なので成分は行の添字 i だけで表してあり、m 次元ベクトル、あるいは m 次列ベクトルなどとも呼ばれる。ベクトルは $\vec{a}$ と書いた方が馴染み深いかも知れないが、ただの書き方の違いに過ぎないのでどちらを使おうと自由である。

この列ベクトル $\boldsymbol{a}$ は縦長だが、これを横に寝かせたものを ${}^t\boldsymbol{a}$ と書く、つまり

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \end{pmatrix} = {}^t\boldsymbol{a} \tag{1.1.3}$$

である。${}^t\boldsymbol{a}$ は $1 \times m$ 行列だが、やはり m 次ベクトルとも呼ばれるし、縦長の「列」ベクトルと区別するために、m 次行ベクトルと呼んだりもする。このようにもとの $\boldsymbol{a}$ を横に寝かせる操作、あるいは逆に横長のものを縦長にする操作を「転置 (transposition)」と呼ぶ。${}^t\boldsymbol{a}$ の t はそういう意味である。教科書によっては転置の添字を右上に書いたり、大文字を使ったりすることも多い。つまり、$\boldsymbol{a}^t$ とか $\boldsymbol{a}^T$ とか ${}^T\boldsymbol{a}$ など、みんな同じ意味である。

ベクトルの内積：　後ほど必要になるので、m 次行ベクトルと m 次列ベクトルの「掛け算（積）」を定義しておこう。ある行ベクトル ${}^t\boldsymbol{a}$ と列ベクトル $\boldsymbol{b}$ の積を ${}^t\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}$ と書き

$${}^t\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \equiv a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots a_m b_m = \sum_{j=1}^{m} a_j b_j \tag{1.1.4}$$

のように定義する。つまり、これはベクトルの「内積」であるが、この「積」は一方が行ベクトル、他方が列ベクトルの場合に対して定義されていることに注意しよう。

ここで行列に戻り、以後必要になる言葉の定義をしておこう。

ゼロ行列：　全ての成分 a_{ij} が 0 である行列 A をゼロ行列と呼び、$A = O$ と表す。

相等：　行列 A と B は共に $m \times n$ 行列で、すべての (i, j) 成分が等しい、つまり $a_{ij} = b_{ij}$ とする。このとき行列 A と B は等しい、または相等であると呼び $A = B$ と書く。つまり同じ型の二つの行列があり、それらのただ一つの成分が異なるだけであっても相等ではない ($A \neq B$ である)。

定数倍（スカラー倍）：　ある $m \times n$ 行列 A の全ての成分を k 倍した行列を A の定数倍行列（スカラー倍行列）と呼び、kA と書く。つまり、

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \longrightarrow kA = \begin{pmatrix} ka_{11} & ka_{12} & \cdots & ka_{1n} \\ ka_{21} & ka_{22} & \cdots & ka_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ ka_{m1} & ka_{m2} & \cdots & ka_{mn} \end{pmatrix} \tag{1.1.5}$$

である。

1.2　行列の演算

行列の加法：　行列は普通の数のような演算ができる。まずは加法、つまり足し算引き算を定義しよう。

行列 A と B が共に $m \times n$ 行列であり (i, j) 成分はそれぞれ a_{ij} と b_{ij} とする。A と B の和行列と差行列 $A \pm B$ を (i, j) 成分が $a_{ij} \pm b_{ij}$ であるような行列と定義する。つまり、

$$A \pm B = \begin{array}{cc} & j \\ i & \begin{pmatrix} & & \\ & a_{ij} \pm b_{ij} & \\ & & \end{pmatrix} \end{array}$$

である。行列の加法にはあきらかに交換法則 $A+B=B+A$、および結合法則 $(A+B)+C=A+(B+C)$ が成立する。

行列の乗法：　次に行列どうしの乗法、つまり積を考えよう。まず m 個の N 次行ベクトル　${}^t\boldsymbol{a}_j$ $(j=1,2,\ldots,m)$ たちと N 次列ベクトル $\boldsymbol{b}$ の内積を考えると、これらはもちろん m 個あって

$${}^t\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{N} a_{1j} b_j \tag{1.2.1}$$

$${}^t\boldsymbol{a}_2 \cdot \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{N} a_{2j} b_j \tag{1.2.2}$$

$$\vdots \tag{1.2.3}$$

$${}^t\boldsymbol{a}_m \cdot \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{N} a_{mj} b_j \tag{1.2.4}$$

のようになる。これら m 個の内積はまとめて

$$\begin{pmatrix} {}^t\boldsymbol{a}_1 \\ {}^t\boldsymbol{a}_2 \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{a}_m \end{pmatrix} \cdot \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{N} a_{1j} b_j \\ \sum_{j=1}^{N} a_{2j} b_j \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{N} a_{mj} b_j \end{pmatrix} \tag{1.2.5}$$

のように記述することができる。さてここで真ん中の式を眺めると、これは $m \times N$ 行列 A と $N \times 1$ 行列 $\boldsymbol{b}$ の「積」と考えることもできるから、これをもとにしてより一般に $m \times N$ 行列と $N \times n$ 行列の積を、次のように作れそうである。つまり、ここまで一つだけだった N 次列ベクトル $\boldsymbol{b}$ を n 個用意して、それらを横に並べた行列 B を作り、A との積を考えれば

$$AB = \begin{pmatrix} {}^t\boldsymbol{a}_1 \\ {}^t\boldsymbol{a}_2 \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{a}_m \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \boldsymbol{b}_1 & \boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{N1} & b_{N2} & \cdots & b_{Nn} \end{pmatrix} \tag{1.2.6}$$

のように積を書くことができる。そしてこの積行列 AB の (i,j) 成分を内積 ${}^t\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j$ と定義する。こう定義しておけば、先ほどの例は B が $\boldsymbol{b}_1$ だけの場合に他ならないから、その自然な一般化になっていると考えて良いだろう。この定義から、この積行列の (i,j) 成分の計算は

$$
\begin{array}{c} \\ \\ i \\ \\ \end{array}
\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mN} \end{pmatrix}
\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} \phantom{b_{11}} & \phantom{b_{12}} & j & \phantom{b_{1n}} \end{array} \\ \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{N1} & b_{N2} & \cdots & b_{Nn} \end{pmatrix} \end{array}
$$

のような赤い矢印の位置にあるベクトルの内積で表すことができる。具体的に書いてみれば

$$
(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^{N} a_{ik} b_{kj} \tag{1.2.7}
$$

である。ここで行列 M の (i,j) 成分を $(M)_{ij}$ と書く記法を用いたが、この書き方もよく使われるので慣れておこう。さて、積行列 AB はどのような型の行列だろう？これを見るには AB の添え字である i と j がどのような値をとるかが分かればよい。上の図からすぐにわかるように i は A の行の数 m だけあり、j は B の列の数 n だけあるから、結果としてできる行列 AB は $m \times n$ 行列になることがわかる。

これで行列の積が作れることがわかったが、その土台にあったのは行ベクトルと列ベクトルの積（内積）だった。ベクトルの内積が作れるのは、それぞれのベクトルの次数（次元）が等しい場合だけだから、行列の積についても同様の制限がつく。ここで見た例では行列 A の型は $m \times N$、一方行列 B の型は $N \times n$ のように N が共通していなければならない。結果として分かったことは、２つの行列 A と B の積 AB が作れるのは A の列の個数と B の行の個数が一致していること、積行列 AB は $m \times n$ 型行列になること、である。したがって、一般に行列の積 AB があるときに、順序を変えた積 BA が作れるとは限らない。また、A と B が共に $N \times N$ 型のように正方形の場合（これを正方行列と呼ぼう）には、積 AB と BA を作ることは可能だが、一般にこれらは一致しない（$AB \neq BA$、 演習課題で確かめよう）。通常の数の積とは異なり、行列の積に関しては交換法則は成立しないのである。

演習課題 1

(1-3) (a) $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ とするとき、AB および BA を求めよ。

(b) $C = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix}$, $D = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \end{pmatrix}$ とするとき、CD および DC を求めよ。

(1-4) (a) 2×2 行列 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$, $C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}$ に対して、結合法則 $(AB)C = A(BC)$ が成立することを確かめよ。

(b) $n \times n$ 行列 $A = (a_{ij})$, $B = (b_{ij})$, $C = (c_{ij})$ に対して、結合法則 $(AB)C = A(BC)$ の成立を証明せよ。

転置行列：　もう少し言葉の準備をしておこう。以前、列ベクトル（$n \times 1$ 行列）を横に寝かせて行ベクトル（$1 \times n$ 行列）を作ったときに「転置」という操作をした。この操作はベクトルに限らず、一般の行列に対しても定義できる。例えば、3×2 行列 A に対して、その「転置行列」${}^tA$ は元の行列の行と列の入れ替えとして

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \\ a_3 & b_3 \end{pmatrix} \longrightarrow {}^tA = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{pmatrix} \tag{1.2.8}$$

のように定義でき、すぐにわかるように ${}^tA$ は 2×3 行列になる。一般に $m \times n$ 行列 A の転置行列 ${}^tA$ は $n \times m$ 行列になること、さらにこれらの成分同士の関係は、$({}^tA)_{ij} = (A)_{ji}$ となっていることはすぐにわかるであろう。

転置行列に関しては、次の性質が確かめられる：

$${}^t(A+B) = {}^tA + {}^tB,\ {}^t(kA) = k\,{}^tA \tag{1.2.9}$$

ここで k はある定数である。また、共に正方行列である A と B に対して、

$${}^t(AB) = {}^tB\,{}^tA \tag{1.2.10}$$

となることを演習課題で確かめよう。

転置行列に関連した言葉の紹介をもう少し続けよう。今まで行列の成分に関しては、ただ「数」であると考えてきたが、その「数」が複素数であるような場合が特に物理では頻出する。複素数 $z = x + iy$ に対しては、その共役 $\bar{z} = x - iy$ を考えると便利なことが多いが、行列の世界では「転置」と「複素共役」を合わせた操作

$$A^* = {}^t\bar{A} \tag{1.2.11}$$

をすることがよくある。ここで $\bar{A}$ は A の全ての成分を共役複素数に変えた行列である。この行列 A^* を A の随伴行列、あるいは物理ではエルミート共役行列と呼ぶ。物理分野ではエルミート共役行列は $A^\dagger$ と書く方が一般的である（ここでは数学系の教科書に合わせた記法を使った)。

1.3　2 次正方行列

行列に馴染んでいくために、まずは 2×2 行列について考えてみよう、以後これを 2 次正方行列と呼ぶことにする。これは行列の中では最も単純なものと考えられるが、ただの数とは異なる、行列ならではの性質を垣間見ることができる。

2 次正方行列のなかでも、特に単純なのは $E \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ のような行列である。この行列と任意の 2 次正方行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ との積を考えると、$AE = EA = A$ が示せる（確かめよ！)。したがって、E は 2 次正方行列の世界では積における単位元、つまり普通の数の掛け算における 1 と同じ働きをするので、これを単位行列と呼ぼう。

Fact 1:　2 次正方行列 X が任意の A と交換可能（$AX = XA$) ならば、X は E の定数倍行列である。

（証明）$E = \begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix}$ とおけば、まず少なくとも $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ と交換可能でなければならないから、

$$AX = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & y \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\ XA = \begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & 0 \\ z & 0 \end{pmatrix} \tag{1.3.1}$$

したがって、これらが等しいためには $y = z = 0$ が必要である。また、この制限の下で $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ と交換可能であるためには、

$$AX = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & w \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\ XA = \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & x \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.3.2}$$

から、$x = w$ が必要である。結果として $X = \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & x \end{pmatrix} = xE$ でなければならない。xE が任意の行列と交換することは簡単に確かめられる。■

以下では 2 次正方行列のもついくつかの性質を見ていこう。

Fact 2: $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ ならば $A^2 - (a+d)A + (ad - bc)E = O$ である。

（証明）A と E は交換するので、普通の数と同様に

$$A^2 - (a+d)A + adE = (A - aE)(A - dE) \tag{1.3.3}$$

と「因数分解」ができる（右辺が左辺に等しい）。右辺は、

$$\begin{pmatrix} 0 & b \\ c & d-a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a-d & b \\ c & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} bc & 0 \\ 0 & bc \end{pmatrix} = bcE \tag{1.3.4}$$

と計算できるから、主張は示せた。■

今の例のように、行列が交換可能ならば普通の数のように因数分解ができる。では、行列は普通の数とまったく同じようなものかといえば、そんなことは決してないのである。

例えば、あらかじめ「因数分解」されている

$$(A - 3E)(A + E) = O \tag{1.3.5}$$

をみたす 2 次正方行列 A はどのようなものだろうか？すぐにわかるのは $A = 3E$ と $A = -E$ が、この「2 次方程式」の解になっていることだが、

$$(A - 3E)(A + E) = A^2 - 2A - 3E = O \tag{1.3.6}$$

と展開すれば、上の事実から $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ は $a + d = 2$ および $ad - bc = -3$ をみたす行列であればよく、たとえば $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 0 \end{pmatrix}$ のように $A = 3E$ と $A = -E$ の二つ以外にも解があることがわかる。実際このとき、$A - 3E = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 3 & -3 \end{pmatrix}$ および $A + E = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}$ だから、

$$(A - 3E)(A + E) = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 3 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} = O \tag{1.3.7}$$

となっている。つまり、普通の数であれば $xy = 0$ の解は $x = 0$ または $y = 0$ に限られるが、行列の場合は必ずしもそうとは限らないのである。

次に行列のべき乗 A^n $(n = 3, 4, \cdots)$ が、A と E の定数倍行列によって計算できることを見よう。

Fact 3:　行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ に対して

$$(\alpha - \beta)A^n = (\alpha^n - \beta^n)A + (\alpha\beta^n - \alpha^n\beta)E \tag{1.3.8}$$

である。ただし、$\alpha,\ \beta$ は 2 次方程式 $x^2 - (a+d)x + ad - bc = 0$ の相異なる 2 つの解である。

（証明）2 次方程式の解と係数の関係から $\alpha + \beta = a + d$ および $\alpha\beta = ad - bc$ であるから、Fact 2 より

$$A^2 - (\alpha+\beta)A + \alpha\beta E = O \ \Leftrightarrow\ (A - \alpha E)(A - \beta E) = O \tag{1.3.9}$$

右を 2 通りに展開すれば、

$$\begin{cases} A(A - \beta E) = \alpha(A - \beta E) \\ A(A - \alpha E) = \beta(A - \alpha E) \end{cases} \tag{1.3.10}$$

上の第 1 式に左から A をかければ $A^2(A - \beta E) = \alpha A(A - \beta E) = \alpha^2(A - \beta E)$ だから、これを繰り返せば

$$\begin{cases} A^n(A - \beta E) = \alpha^n(A - \beta E) \\ A^n(A - \alpha E) = \beta^n(A - \alpha E) \end{cases} \tag{1.3.11}$$

がわかり、第 1 式から第 2 式を引けば示したい関係が得られる。

演習課題 2

(2-3) $n \times n$ 行列 $A = [a_{ij}],\ B = [b_{ij}]$ に対して、${}^t(AB) = {}^tB\,{}^tA$ となることを証明せよ。

(2-4) (a) n を 2 以上の自然数とし、x^n を 2 次式 $x^2 + x - 2$ で割るときの余りを $r_n x + s_n$ とおく。このとき $r_n,\ s_n$ を n を用いて表せ。

(b) $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -4 & -3 \end{pmatrix}$ とする。自然数 n に対して、(a) および Fact 2 を利用して A^n を n を用いて表せ。

(c) A^5 を求めよ。

1.4 一般の正方行列

次に $n \geq 2$ として、$n \times n$ 正方行列を考えよう。今後の考察のため、いつものようにまず言葉の定義から始める。

単位行列： 対角成分に 1 が並んでいて、非対角成分がすべて 0 であるような行列

$$E = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{pmatrix} \tag{1.4.1}$$

を、単位行列と呼ぶ。明らかに任意の $n \times n$ 行列 A に対して、

$$AE = EA = A \tag{1.4.2}$$

が成立するから、これは $n \times n$ 正方行列の積における単位元である。

上（下）三角行列： 図の左側のように、対角線より下の成分がすべて 0 であるような行列を上三角行列、右側のように対角線より上の成分がすべて 0 であるような行列をした三角行列と呼ぶ。

成分に対する条件で書けば、上三角行列は $a_{ij} = 0, (i > j)$、下三角行列は $a_{ij} = 0, (i < j)$ である。

対角行列： 次の D のように、対角線上の成分以外はすべて 0 であるような行列を対角行列という。

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{pmatrix} \tag{1.4.3}$$

対角線上の成分 d_j, $(j=1,\ldots,n)$ を、以降は対角成分と呼ぶことにしよう。このように、成分が 0 の場合そこに何も書かない方が見やすい場合も多々あるので、今後も使っていこう。また、スペースを節約するため

$$D=\mathrm{diag}(d_1,\ldots,d_n) \tag{1.4.4}$$

と書く場合も多い[1]。

対称行列：　行列 S が、その転置行列 ${}^tS$ と等しい場合、S を対称行列という。たとえば、

$$S=\begin{pmatrix} a & p & q \\ p & b & r \\ q & r & c \end{pmatrix} \tag{1.4.5}$$

のような場合である。成分の関係は $s_{ij}=s_{ji}$ となる。

交代（反対称）行列：　逆に行列 A とその転置行列に ${}^tA=-A$ のような関係がある場合、A を交代行列または反対称行列という。たとえば、

$$A=\begin{pmatrix} 0 & p & q \\ -p & 0 & r \\ -q & -r & 0 \end{pmatrix} \tag{1.4.6}$$

のような場合である。交代行列の対角成分は必ず 0 であることに注意しよう。成分の関係は $a_{ij}=-a_{ji}$ となる。

エルミート行列：　物理でよく出てくるのは、随伴行列（エルミート共役行列）とそれ自身が等しい行列である。この行列を H とすれば、$H^*=H$ あるいは $H^\dagger=H$ と書ける。たとえば、

$$H=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{1.4.7}$$

のような場合である。

歪（反）エルミート行列：　同様に、随伴行列と $\tilde{H}^*=-\tilde{H}$ または $\tilde{H}^\dagger=-\tilde{H}$ の関係があるような行列を歪エルミート行列または反エルミート行列という。たとえば、

$$\tilde{H}=\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{1.4.8}$$

のような場合である。

次に今後よく使われる操作を定義する。

対角和（トレース）：　行列 A の対角成分 a_{ii}, $(i=1,\ldots,n)$ の総和を、行列 A の対角和あるいはトレースと呼び、$\mathrm{Tr}A$ あるいは $\mathrm{tr}A$ と書く。つまり

$$\mathrm{Tr}A=\sum_{i=1}^{n} a_{ii} \tag{1.4.9}$$

である。明らかに

$$\mathrm{Tr}kA=k\mathrm{Tr}A, \quad \mathrm{Tr}(A+B)=\mathrm{Tr}A+\mathrm{Tr}B \tag{1.4.10}$$

が成立する。ここで A, B はともに $n\times n$ 行列、k はある数である。さらに、

$$\mathrm{Tr}BA=\mathrm{Tr}AB \tag{1.4.11}$$

が示せる（演習課題参照）。

[1] diag は diagonal（対角線）の略。

逆行列：　$n \times n$ 正方行列 A に対して、

$$AX = XA = E \tag{1.4.12}$$

となる $n \times n$ 行列 X を、A の逆行列とよび、$X = A^{-1}$ と書く。
　まず具体例で考えよう。

- $n = 1$ のとき、$A = a_{11} = a$ とすれば、あきらかに X は a の逆数であり、$X = 1/a$ であることはすぐにわかる。したがって、X は一般に行列の世界の「逆数」と考えられる。ここで $a = 0$ なら X は存在しないから、行列 X が存在するためには $a \neq 0$ が必要であることもわかる。

- $n = 2$ のとき、

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \tag{1.4.13}$$

　とすれば、

$$X = A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix} \tag{1.4.14}$$

　であることが確かめられる。したがって、この場合も $ad - bc = 0$ であれば、X は存在しないことがわかる。

このように、与えられた正方行列 A に対して、いつでもその逆行列 X が存在するという保証はなさそうである。どのような場合に逆行列 X が存在するのかは、第 3 章で考えることにするが、ここで逆行列が存在するならばそれはただ一つであることを示しておこう。

定理 (逆行列の一意性)**.** n 次正方行列 A に対し、逆行列 X が存在すればそれはただ一つである。

（証明）A の逆行列が 2 つあると仮定して、それらを X および Y としよう。つまり、$AX = XA = E$ および $AY = YA = E$ が成立するとする。このとき

$$A(X - Y) = E - E = O \ \Rightarrow\ XA(X - Y) = E(X - Y) = O \ \Rightarrow\ X - Y = O \tag{1.4.15}$$

なので $X = Y$ である。■

　逆行列が定義できたところで、もう少し言葉を紹介しておこう。

直交行列：　転置行列がもとの行列の逆行列になっているような正方行列 A、つまり

$${}^tA = A^{-1} \ \Leftrightarrow\ {}^tAA = A{}^tA = E \tag{1.4.16}$$

であるような正方行列を直交行列という。

ユニタリー行列：　随伴行列がもとの行列の逆行列になっているような正方行列 U、つまり

$$U^*(= U^\dagger) = U^{-1} \ \Leftrightarrow\ U^\dagger U = UU^\dagger = E \tag{1.4.17}$$

であるような正方行列をユニタリー行列という。

演習課題 3

(3-4) 上三角行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & p & q \\ 0 & 1 & r \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ に対して、逆行列 A^{-1} もまた上三角行列であることを示せ。

(3-5) E を 3 次の単位行列、また $B = \begin{pmatrix} 0 & b & c \\ 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ とする。このとき行列 $A = aE + B$ に対して、A^n を E および B で表せ。（hint: $B^2,\ B^3$ を具体的に計算してみよ。）

(3-6) 2 つの n 次正方行列 $A,\ B$ に対して、$\mathrm{Tr}AB = \mathrm{Tr}BA$ を示せ。