$$= a_{11}x_1^2 + 2a_{12}x_1x_2 + a_{22}x_2^2$$

$$= [x_1 \ \ x_2]\underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{bmatrix}}_{\text{対称行列}}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

この式を逆に計算すると，元の式に戻るのが分かるはずだ。

(ii) $n = 3$ のときも同様に変形すると，

$$\sum_{i=1}^{3}\left(\sum_{j=1}^{3} a_{ij}x_ix_j\right) = \sum_{i=1}^{3}\left(a_{i1}x_ix_1 + a_{i2}x_ix_2 + a_{i3}x_ix_3\right)$$

$$= a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2 + 2a_{12}\,x_1x_2 + 2a_{13}\,x_1x_3 + 2a_{23}\,x_2x_3$$

$$= [x_1 \ \ x_2 \ \ x_3]\underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix}}_{\text{対称行列}}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad \text{となる。}$$

ここで，

(i) $n = 2$ のとき，$a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + 2a_{12}\,x_1x_2$ は，

$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = U\begin{bmatrix} x_1' \\ x_2' \end{bmatrix}$ （U：直交行列）によって，x_1'，x_2' に変数変換すると，

$a'_{11}x_1'^2 + a'_{22}x_2'^2$ （標準形）にもち込める。

(ii) $n = 3$ のとき，$a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2 + 2a_{12}\,x_1x_2 + 2a_{13}\,x_1x_3 + 2a_{23}\,x_2x_3$ は，

$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = U\begin{bmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \end{bmatrix}$ （U：直交行列）によって，x_1'，x_2'，x_3' に変数変換すると，

$a'_{11}x_1'^2 + a'_{22}x_2'^2 + a'_{33}x_3'^2$ （標準形）にもち込める。

§4. エルミート行列とユニタリ行列

成分が複素数である行列やベクトルを，複素行列や複素ベクトルと呼ぼう。複素ベクトル $\boldsymbol{x}$ の成分をその共役複素数にしたベクトルを，$\boldsymbol{x}$ の**複素共役** $\overline{\boldsymbol{x}}$ と定める。2 つの複素ベクトル

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

の**内積** $\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y}$ を次式で定義する。

$$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}={}^t\boldsymbol{x}\overline{\boldsymbol{y}}=[x_1\ \ x_2\ \ \cdots\ \ x_n]\begin{bmatrix}\overline{y_1}\\ \overline{y_2}\\ \vdots\\ \overline{y_n}\end{bmatrix}=x_1\overline{y_1}+x_2\overline{y_2}+\cdots+x_n\overline{y_n}$$

すると，複素ベクトル $\boldsymbol{x}$ の絶対値 $\|\boldsymbol{x}\|$ は，

$\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}}=\sqrt{{}^t\boldsymbol{x}\cdot\overline{\boldsymbol{x}}}=\sqrt{x_1\overline{x_1}+x_2\overline{x_2}+\cdots+x_n\overline{x_n}}$ で計算される。

また，$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}=0$ のとき，$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ は**直交する**といい，$\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{y}$ で表す。

一般に行列 A に対して，${}^t\overline{A}$ を A の**共役転置行列**または**随伴行列**と呼び，$A^*={}^t\overline{A}$ で表す。ここで，**エルミート行列** A_H の定義を示す。

n 次の複素行列 A_H が， $A_H{}^*=A_H$ のこと
${}^t\overline{A_H}=A_H\quad\cdots(*1)$ をみたすとき，A_H を**エルミート行列**と呼ぶ。

公式：${}^t\overline{A}=\overline{{}^tA}$ より，${}^t\overline{A_H}=\overline{{}^tA_H}$ となる。これを $(*1)$ の左辺に代入し，

左の公式の A に A_H を代入した

さらに両辺の複素共役をとると，

$\overline{\overline{{}^tA_H}}=\overline{A_H}\quad\therefore\ {}^tA_H=\overline{A_H}$ が導かれる。

「$\overline{\alpha}=\alpha\Leftrightarrow\alpha$ は実数」より

$(*1)$ から，エルミート行列 A_H の対角成分 $a_{jj}\ (j=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$ は，$\overline{a_{jj}}=a_{jj}$ をみたすから実数である。また，この対角線に関して対称な位置にある a_{jk} と a_{kj} に対して，$a_{kj}=\overline{a_{jk}}$ となるから，a_{jk} と a_{kj} は互いに共役な複素数である。

エルミート行列 A_H には次の性質がある。

エルミート行列 A_H の固有値はすべて実数であり，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。

次に，**ユニタリ行列** U_U の定義を示す。

n 次の複素行列 U_U が， $U_U{}^*U_U=E$ のこと
${}^t\overline{U_U}U_U=E$(単位行列)$\cdots(*2)$ をみたすとき，U_U を**ユニタリ行列**と呼ぶ。

$(*2)$ より，${}^t\overline{U_U}$ は U_U の逆行列 $U_U{}^{-1}$ である：${}^t\overline{U_U}=U_U{}^{-1}$

n 次のユニタリ行列 U_U を，次のように n 個の列ベクトル $\boldsymbol{u}_1,\ \boldsymbol{u}_2,\ \cdots,\ \boldsymbol{u}_n$ に分解して考える。

$\boldsymbol{u}_U=[\boldsymbol{u}_1\ \ \boldsymbol{u}_2\ \ \cdots\ \ \boldsymbol{u}_n]\ \cdots\cdots①$ 　すると，${}^t\overline{U_U}=\begin{bmatrix}{}^t\overline{\boldsymbol{u}_1}\\ {}^t\overline{\boldsymbol{u}_2}\\ \vdots\\ {}^t\overline{\boldsymbol{u}_n}\end{bmatrix}$

これらを $(*2)$ の左辺に代入すると,

$$ {}^t\overline{U}_U U_U = \begin{bmatrix} {}^t\overline{\boldsymbol{u}}_1 \\ {}^t\overline{\boldsymbol{u}}_2 \\ \vdots \\ {}^t\overline{\boldsymbol{u}}_n \end{bmatrix} [\boldsymbol{u}_1 \ \ \boldsymbol{u}_2 \ \ \cdots \ \ \boldsymbol{u}_n] = \begin{bmatrix} \overbrace{{}^t\overline{\boldsymbol{u}}_1\boldsymbol{u}_1}^{1} & \overbrace{{}^t\overline{\boldsymbol{u}}_1\boldsymbol{u}_2}^{0} & \cdots & \overbrace{{}^t\overline{\boldsymbol{u}}_1\boldsymbol{u}_n}^{0} \\ \overbrace{{}^t\overline{\boldsymbol{u}}_2\boldsymbol{u}_1}^{0} & \overbrace{{}^t\overline{\boldsymbol{u}}_2\boldsymbol{u}_2}^{1} & \cdots & \overbrace{{}^t\overline{\boldsymbol{u}}_2\boldsymbol{u}_n}^{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \overbrace{{}^t\overline{\boldsymbol{u}}_n\boldsymbol{u}_1}^{0} & \overbrace{{}^t\overline{\boldsymbol{u}}_n\boldsymbol{u}_2}^{0} & \cdots & \overbrace{{}^t\overline{\boldsymbol{u}}_n\boldsymbol{u}_n}^{1} \end{bmatrix} $$

よって，これが単位行列 E となるための条件は,

$$ \underbrace{{}^t\overline{\boldsymbol{u}}_i}_{\overline{{}^t\boldsymbol{u}_i}}\boldsymbol{u}_j = \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad \cdots ② \qquad (i,\ j = 1,\ 2,\ \cdots,\ n) \text{ である。} $$

「$\overline{\alpha} = \alpha \Leftrightarrow \alpha$ は実数」より

②の右辺は実数だから，左辺はその複素共役をとっても変わらない。

$$ \therefore\ \underbrace{{}^t\boldsymbol{u}_i\overline{\boldsymbol{u}}_j}_{\boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_j} = \boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_j = \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad \cdots ③ $$

となる。 よって，①で与えられたユニタリ行列 U_U の列ベクトル $\boldsymbol{u}_1$, $\boldsymbol{u}_2$, $\cdots$, $\boldsymbol{u}_n$ は正規直交系をつくる。

互いに直交するノルム(大きさ)1 のベクトルの集合

n 次のエルミート行列 A_H は，互いに直交するノルム 1 の固有ベクトル $\boldsymbol{u}_1$, $\boldsymbol{u}_2$, $\cdots$, $\boldsymbol{u}_n$ をもつので，対応する固有値を λ_1, λ_2, $\cdots$, λ_n として，固有方程式 $A_H\boldsymbol{u}_i = \lambda_i\boldsymbol{u}_i\,(i=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$ より

$$ [A_H\boldsymbol{u}_1 \ \ A_H\boldsymbol{u}_2 \ \ \cdots \ \ A_H\boldsymbol{u}_n] = [\lambda_1\boldsymbol{u}_1 \ \ \lambda_2\boldsymbol{u}_2 \ \ \cdots \ \ \lambda_n\boldsymbol{u}_n] $$

$$ A_H\underbrace{[\boldsymbol{u}_1 \ \ \boldsymbol{u}_2 \ \ \cdots \ \ \boldsymbol{u}_n]}_{U_U} = \underbrace{[\boldsymbol{u}_1 \ \ \boldsymbol{u}_2 \ \ \cdots \ \ \boldsymbol{u}_n]}_{U_U \text{ とおける}} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix} $$

よって，ユニタリ行列 $U_U = [\boldsymbol{u}_1 \ \ \boldsymbol{u}_2 \ \ \cdots \ \ \boldsymbol{u}_n]$ により,

$$ A_H U_U = U_U \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix} $$

この両辺に $\underbrace{U_U^{-1}}_{U_U^* = {}^t\overline{U}_U}$ を左からかけて，エルミート行列 A_H は，

$$ U_U^{-1} A_H U_U = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix} $$

と対角化できる。