§4. エルミート行列とユニタリ行列

これまで解説した行列やベクトルはその成分がすべて実数であるものだけだったんだね。しかし，ここでは話を拡張して，その成分に複素数が含まれる行列やベクトルについても解説しよう。したがって，これから，この2つを区別するために，その成分が実数のみからなる行列やベクトルを実行列や実ベクトルと呼び，これに対して，その成分に複素数が含まれる行列やベクトルは複素行列や複素ベクトルと呼ぶことにしよう。

すると，実行列において，対称行列 $\boldsymbol{A}$ を直交行列 $\boldsymbol{U}$ により対角化したのと同様の操作が，複素行列においても，**"エルミート行列"** $\boldsymbol{A_H}$ を **"ユニタリ行列"** $\boldsymbol{U_U}$ により対角化することができる。これから詳しく解説しよう。

● まず複素ベクトルと複素行列の基本を押さえよう！

エルミート行列やユニタリ行列など，本格的な複素行列の解説に入るための準備として，複素数 α について，ここで簡単に必要なものだけを復習しておこう。

複素数 α は，次のように，2つの実数と虚数単位で定義される。

$\alpha = \underbrace{\boldsymbol{a}}_{\text{実部}} + \underbrace{\boldsymbol{b}}_{\text{虚部}}\boldsymbol{i}$ 　($\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$：実数，　$\boldsymbol{i}$：虚数単位 $(\boldsymbol{i}^2 = -1)$)

($\boldsymbol{a}$：実部，　$\boldsymbol{b}$：虚部)

また，この複素数 $\alpha = \boldsymbol{a} + \boldsymbol{bi}$ に対して，共役(きょうやく)複素数 $\overline{\alpha}$ は，$\overline{\alpha} = \boldsymbol{a} - \boldsymbol{bi}$ で表される。このとき，α と $\overline{\alpha}$ は「互いに複素共役な関係である」と言うことにする。

そして，複素数 $\alpha = \boldsymbol{a} + \boldsymbol{bi}$ の絶対値 $|\alpha|$ は，

$|\alpha| = \sqrt{\boldsymbol{a}^2 + \boldsymbol{b}^2}$ で定義されるので，

$$\begin{cases} |\alpha|^2 = \boldsymbol{a}^2 + \boldsymbol{b}^2 \text{ でありまた} \\ \alpha\overline{\alpha} = (\boldsymbol{a} + \boldsymbol{bi})(\boldsymbol{a} - \boldsymbol{bi}) = \boldsymbol{a}^2 - \boldsymbol{b}^2 \overbrace{\boxed{\boldsymbol{i}^2}}^{-1} = \boldsymbol{a}^2 + \boldsymbol{b}^2 \end{cases}$$

より，重要公式：

$|\alpha|^2 = \alpha\overline{\alpha}$ ……$(*1)$ 　が導かれるんだね。さらに，

$\overline{\overline{\alpha}} = \alpha$ であり，2つの複素数 α, β に対して $\overline{\alpha \cdot \beta} = \overline{\alpha} \cdot \overline{\beta}$ が成り立

$\alpha = \boldsymbol{a} + \boldsymbol{bi}$ に対して，$\overline{\alpha} = \boldsymbol{a} - \boldsymbol{bi}$ であり　さらに $\overline{\overline{\alpha}} = \overline{\boldsymbol{a} - \boldsymbol{bi}} = \boldsymbol{a} + \boldsymbol{bi} = \alpha$ となる。

つことも頭に入れておこう。

また，実数 a に対しては $a+0i$ も $a-0i$ も同じ a なので，当然 $\overline{a}=a$ となることも大丈夫だね。

では準備も整ったので，次の，n 次の複素ベクトル $\boldsymbol{x}$：

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$ ($x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n$：複素数) のノルムの 2 乗 $\|\boldsymbol{x}\|^2$ を次のように定義する。

$$\|\boldsymbol{x}\|^2=x_1\overline{x_1}+x_2\overline{x_2}+\cdots+x_n\overline{x_n}$$
$$=[x_1\ \ x_2\ \ \cdots\ \ x_n]\begin{bmatrix} \overline{x}_1 \\ \overline{x}_2 \\ \vdots \\ \overline{x}_n \end{bmatrix}={}^t\boldsymbol{x}\overline{\boldsymbol{x}}$$

$\overline{\boldsymbol{x}}$ は，$\boldsymbol{x}$ のすべての成分の共役複素数をとったもので，$\boldsymbol{x}$ と $\overline{\boldsymbol{x}}$ は互いに複素共役な関係にあると言える。

ここで，$\|\boldsymbol{x}\|^2$ は，内積を使って，$\|\boldsymbol{x}\|^2=\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}$ と表せるので，公式：

$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}={}^t\boldsymbol{x}\overline{\boldsymbol{x}}\ \cdots(*2)$ が導ける。では，例題で練習しておこう。

(ex) $\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} 1+2i \\ -i \end{bmatrix}$ の $\|\boldsymbol{x}\|^2$ は，

$$\|\boldsymbol{x}\|^2=(1+2i)(1-2i)+(-i)\cdot i$$
$$=1-4\underbrace{i^2}_{-1}-\underbrace{i^2}_{-1}=1+4+1=6$$ となる。

${}^t\boldsymbol{x}\overline{\boldsymbol{x}}=[1+2i\ \ -i]\begin{bmatrix} 1-2i \\ i \end{bmatrix}$
$=(1+2i)(1-2i)+(-i)\cdot i$

(ex) $\boldsymbol{y}=\begin{bmatrix} 1 \\ 2i \\ 2-i \end{bmatrix}$ の $\|\boldsymbol{y}\|^2$ は，$\|\boldsymbol{y}\|^2={}^t\boldsymbol{y}\overline{\boldsymbol{y}}$ より，

$$\|\boldsymbol{y}\|^2=1\cdot 1+2i\cdot(-2i)+(2-i)(2+i)$$
$$=1-4i^2+4-i^2=1+4+4+1=10$$ となるんだね。

そして，$\|\boldsymbol{y}\|^2={}^t\boldsymbol{y}\overline{\boldsymbol{y}}=10$（実数）であるので，${}^t\boldsymbol{y}\overline{\boldsymbol{y}}=10$ の両辺の共役複素数をとって，$\overline{{}^t\boldsymbol{y}\overline{\boldsymbol{y}}}=\underbrace{\overline{10}}_{10}$

実数の共役複素数をとっても変化しない。

${}^t\overline{\boldsymbol{y}}\overline{\overline{\boldsymbol{y}}}=10$ よって，${}^t\overline{\boldsymbol{y}}\boldsymbol{y}=10$ とも表せることに注意しよう。

公式 $(*1)$ と $(*2)$ が同様の形式であることに注意すると，今度は $\boldsymbol{n}$ 次の $\mathbf{2}$ つの異なるベクトル

$$|\alpha|^2=\alpha\overline{\alpha} \quad \cdots\cdots(*1)$$
$$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}={}^t\boldsymbol{x}\overline{\boldsymbol{x}} \quad \cdots(*2)$$

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \text{ と } \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \qquad (x_i,\ y_i \text{ 複素数 } (i=1,\ 2,\ \cdots,\ n))$$

の内積 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}$ が次式で定義されることも納得頂けると思う。

$$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}={}^t\boldsymbol{x}\overline{\boldsymbol{y}} \quad \cdots\cdots(*3)$$

$(*3)$ を具体的に表すと，当然次式のようになるんだね。

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

この結果は，$\|\boldsymbol{x}\|^2=\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}$ のときのように実数になるとは限らないので，異なる $\mathbf{2}$ つの複素ベクトルの内積においては，一般に交換法則は成り立たない。つまり，$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}\fallingdotseq\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x}$ であり，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x}={}^t\boldsymbol{y}\overline{\boldsymbol{x}}&=y_1\overline{x_1}+y_2\overline{x_2}+\cdots+y_n\overline{x_n}\\&=\overline{x_1}y_1+\overline{x_2}y_2+\cdots+\overline{x_n}y_n\\&=\overline{x_1\overline{y_1}+x_2\overline{y_2}+\cdots+x_n\overline{y_n}}=\overline{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}}\end{aligned} \quad \text{より，}$$

$\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x}=\overline{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}}$ であることに気を付けよう。もちろん，$\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}$ が実数のときは，$\overline{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}$ が成り立つので，内積の交換法則：

たとえば，内積 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}=2+3i$ であったとすると，$\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x}$ はその共役複素数 $\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x}=2-3i$ になるんだね。納得いった？

$\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}$ が成り立つのはいいね。では，計算練習をしておこう。

(ex) $\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} 1 \\ i \\ 1-i \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix} -i \\ 1+i \\ 1 \end{bmatrix}$ のとき，内積 $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}$ を求めると，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}&=1\cdot(\overline{-i})+i(\overline{1+i})+(1-i)\cdot\overline{1}=1\cdot i+i(1-i)+(1-i)\cdot 1\\&=i+\cancel{i}-i^2+1-\cancel{i}=2+i\end{aligned}$$ となるんだね。大丈夫？

では次，複素数をその成分に含む複素行列についても解説しておこう。
次の例のような3次の複素行列Aについて，考えよう。

$$A=\begin{bmatrix} 1+i & -i & 1-i \\ 1 & 2-i & i \\ 2i & 1 & 1+2i \end{bmatrix}$$

この複素共役な行列を$\overline{A}$とおくと，$\overline{A}$は，Aのすべての成分が共役複素数となる行列のことなんだ。つまり，

$$\overline{A}=\begin{bmatrix} 1-i & i & 1+i \\ 1 & 2+i & -i \\ -2i & 1 & 1-2i \end{bmatrix}$$

となるんだね。さらに，この転置行列${}^t\overline{A}$は，次のように対角線に対して，対称な行列となる。つまり

$${}^t\overline{A}=\begin{bmatrix} 1-i & 1 & -2i \\ i & 2+i & 1 \\ 1+i & -i & 1-2i \end{bmatrix}$$

対角線

となるのも大丈夫だね。

● エルミート行列とユニタリ行列について解説しよう！

では，準備も整ったので，2つの複素行列“**エルミート行列** A_H”と“**ユニタリ行列** U_U”についてこれから解説しよう。

“エルミート行列”(*hermitian matrix*)の頭文字Hを添字に使った。

“ユニタリ行列”(*unitary matrix*)の頭文字Uを添字に使った。

まず，エルミート行列A_Hは次のように定義される。

エルミート行列 A_H の定義

n次の複素行列A_Hが，

${}^t\overline{A_H}=A_H \cdots (*)$　（または，${}^tA_H=\overline{A_H} \cdots (*)'$）を満たすとき，

A_Hを“**エルミート行列**”と呼ぶ。

では，エルミート行列A_Hとは，具体的にどのような行列なのか？考えてみよう。A_Hの複素共役な行列$\overline{A_H}$を求め，それをさらに転置した${}^t\overline{A_H}$が，元のA_Hと等しいということは当然A_Hの左上から右下にかけての対角成分は実数でなければならない。

さらに，この対角線に対して，対称な位置にある成分は互いに共役な複素数でなければならないことも分かるはずだ。以上より，2 次，および 3 次のエルミート行列 A_H の例を下にそれぞれ示しておこう。

(*ex*1) 2 次のエルミート行列の例　　(*ex*2) 3 次のエルミート行列の例

$$A_H=\begin{bmatrix} 2 & \sqrt{3}+i \\ \sqrt{3}-i & -1 \end{bmatrix} \qquad A_H=\begin{bmatrix} 0 & i & 1 \\ -i & 0 & -i \\ 1 & i & 1 \end{bmatrix}$$

(*ex*1) の A_H について，その複素共役な行列 $\overline{A_H}$ は，

$$\overline{A_H}=\begin{bmatrix} \overline{2} & \overline{\sqrt{3}+i} \\ \overline{\sqrt{3}-i} & \overline{-1} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 2 & \sqrt{3}-i \\ \sqrt{3}+i & -1 \end{bmatrix}$$ であり，

さらに，この転置行列を求めると，

$$^t\overline{A_H}=\begin{bmatrix} 2 & \sqrt{3}+i \\ \sqrt{3}-i & -1 \end{bmatrix}$$ となって，元の A_H と同じになること，

つまり，A_H がエルミート行列であることが，お分かりになったと思う。(*ex*2) も同様にご自分で調べてごらんになるといい。

ここで，A_H の成分がすべて実数の場合 $\overline{A_H}=A_H$ となるので，エルミート行列の定義式：$^t\overline{A_H}=A_H$……$(*1)$ は，$^tA_H=A_H$ となる。つまり，これは実行列では，A_H は，対称行列に他ならないことを示している。これから，エルミート行列のすべての成分が実数である特別な場合が対称行列と言えるんだね。納得いった？

では次，**“ユニタリ行列”** U_U の定義も下に示そう。

ユニタリ行列 U_U の定義

n 次の複素行列 U_U が，
$^t\overline{U_U}U_U=U_U{}^t\overline{U_U}=E$（単位行列）……$(**)$ を満たすとき，
U_U を **“ユニタリ行列”** と呼ぶ。

つまり，ユニタリ行列 U_U とは，その複素共役な行列 $\overline{U_U}$ をさらに転置行列にした $^t\overline{U_U}$ が，元の U_U の逆行列 U_U^{-1} となるような複素行列のことなんだね。

この 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 u_1, u_2, …, u_n に分割して考え，U_U と ${}^t\overline{U_U}$ をイメージで表すと，

$$U_U=\begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_n \end{bmatrix}\cdots であり，\qquad {}^t\overline{U_U}=\begin{bmatrix} {}^t\overline{u_1} \\ {}^t\overline{u_2} \\ \vdots \\ {}^t\overline{u_n} \end{bmatrix} となる。$$

よって，(＊＊) の定義式にこれを代入する。

$${}^t\overline{U_n}\cdot U_n=\begin{bmatrix} {}^t\overline{u_1} \\ {}^t\overline{u_2} \\ \vdots \\ {}^t\overline{u_n} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_n \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} {}^t\overline{u_1}u_1 & {}^t\overline{u_1}u_2 & \cdots & {}^t\overline{u_1}u_n \\ {}^t\overline{u_2}u_1 & {}^t\overline{u_2}u_2 & \cdots & {}^t\overline{u_2}u_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ {}^t\overline{u_n}u_1 & {}^t\overline{u_n}u_2 & \cdots & {}^t\overline{u_n}u_n \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} \overset{1}{\|u_1\|^2} & \overset{0}{u_1\cdot u_2} & \cdots & \overset{0}{u_1\cdot u_n} \\ \overset{0}{u_2\cdot u_1} & \overset{1}{\|u_2\|^2} & \cdots & \overset{0}{u_2\cdot u_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \overset{0}{u_n\cdot u_1} & \overset{0}{u_n\cdot u_2} & \cdots & \overset{1}{\|u_n\|^2} \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}=E \text{（単位行列）}$$

u_i と u_j の内積は，
$u_i\cdot u_j=\delta_{ij}=\begin{cases} 1\,(i=j) \\ 0\,(i\neq j) \end{cases}$
と実数であるので，
$u_i\cdot u_j={}^tu_i\overline{u_j}$ の
右辺の複素共役をとっても変化しない。
つまり，
$u_i\cdot u_j={}^t\overline{u_i}u_j$
となるんだね。

以上より，ユニタリ行列 U_U の n 個の複素列ベクトル $u_i(i=1, 2, \cdots, n)$ は，そのノルム（大きさ）$\|u_i\|=1$ で，$i\neq j$ のとき，$u_i\cdot u_j=0$ となる。複素ベクトルなので図形的なイメージは浮かばないんだけれど，$i\neq j$ のとき，u_i と u_j は互いに直交する正規ベクトルになっている。

ということは，もし，ユニタリ行列 U_U のすべての成分が実数であるならば，これは，直交行列 U に他ならない。つまり，ユニタリ行列 U_U の特別な場合が，直交行列 U であることも分かったんだね。

● エルミート行列 A_H も対角化できる！

エルミート行列 A_H とユニタリ行列 U_U の全成分が実数である特別な場合がそれぞれ対称行列 A と直交行列 U であるんだね。そして，対称行列 A が，$U^{-1}AU$ により対角化できたように，複素行列においても，エルミート行列 A_H は，ユニタリ行列 U_U を用いて，$U_U^{-1}A_HU_U$ によって対角化できる。この手続は，実行列のときとまったく同じなので，理解しやすいと思う。これから，詳しく解説しよう。

まず，エルミート行列 A_H の 2 つの異なる固有値 λ_i，λ_j が得られたとき，

これらは，実数とする。

P195 で解説したことと同様に，それぞれの固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i$ と $\boldsymbol{x}_j$ は直交して，$\boldsymbol{x}_i \cdot \boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{0}$ となることが示せる。

ここで，n 次のエルミート行列 A_H が異なる n 個の固有値 λ_1，λ_2，…，λ_n をもつものとしよう。そして，それぞれに対応した，大きさを 1 にそろえた固有ベクトルを $\boldsymbol{u}_1$，$\boldsymbol{u}_2$，…，$\boldsymbol{u}_n$ とおくと，固有方程式は，

$\frac{1}{\|\boldsymbol{x}_1\|}\boldsymbol{x}_1$　$\frac{1}{\|\boldsymbol{x}_2\|}\boldsymbol{x}_2$　$\frac{1}{\|\boldsymbol{x}_n\|}\boldsymbol{x}_n$ と正規化する。

$$A_H\boldsymbol{u}_1 = \lambda_1\boldsymbol{u}_1 \ \cdots ①,\quad A_H\boldsymbol{u}_2 = \lambda_2\boldsymbol{u}_2 \ \cdots ②,\quad \cdots,\quad A_H\boldsymbol{u}_n = \lambda_n\boldsymbol{u}_n \ \cdots ③$$

となる。これら①，②，…，③を 1 つの方程式にまとめると，

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

$$= [\boldsymbol{u}_1\ \ \boldsymbol{u}_2\ \ \cdots\ \ \boldsymbol{u}_n]\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & \lambda_n \end{bmatrix} \cdots ④$$ と表せる。

ここで，$[\boldsymbol{u}_1\ \ \boldsymbol{u}_2\ \ \cdots\ \ \boldsymbol{u}_n]$ は，$\boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j \text{ のとき}) \\ 0 & (i \neq j \text{ のとき}) \end{cases}$

の性質を満たすので，これはユニタリ行列 U_U とおくことができる。

よって，④は，$A_HU_U = U_U\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & \lambda_n \end{bmatrix}$ …④′となり

この両辺に U_U の逆行列 U_U^{-1} を左からかけると，A_H は，

ユニタリ行列の定義より，これは，${}^t\overline{U_U}$ と同じだね。

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

と，対角化できるんだね。納得いった？

● 具体的に，エルミート行列を対角化してみよう！

考え方は理解して頂けたと思うので，これから，具体例を使って，エルミート行列 A_H を対角化する練習に入ろう。

(1) エルミート行列 $A_H=\begin{bmatrix}2 & \sqrt{3}+i\\ \sqrt{3}-i & -1\end{bmatrix}$ を，ユニタリ行列 U_U を用いて，$U_U^{-1}A_HU_U$ として対角化せよ。

実対称行列の対角化のときと同様に，固有値を λ，固有ベクトルを $\boldsymbol{x}$ とおくと，$A_H\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$ より，$\underline{(A_H-\lambda E)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ すなわち $T\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ …①となる。

これを，T とおく。

ここで，$T=A_H-\lambda E=\begin{bmatrix}2-\lambda & \sqrt{3}+i\\ \sqrt{3}-i & -1-\lambda\end{bmatrix}$ より，固有方程式：

$$|T|=\begin{vmatrix}2-\lambda & \sqrt{3}+i\\ \sqrt{3}-i & -1-\lambda\end{vmatrix}=(2-\lambda)(-1-\lambda)-\underbrace{(\sqrt{3}+i)(\sqrt{3}-i)}_{(\sqrt{3})^2-i^2=3+1=4}=0$$

を解いて，まず固有値を求めよう。

$\lambda^2-\lambda-6=0$ $(\lambda-3)(\lambda+2)$ より，$\lambda=\underbrace{3}_{\lambda_1}$，$\underbrace{-2}_{\lambda_2}$ となる。

(i) $\lambda_1=3$ のとき，①を $T_1\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{0}$ そして $\boldsymbol{x}_1=\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}$ とおくと，

$$\begin{bmatrix}-1 & \sqrt{3}+i\\ \sqrt{3}-i & -4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}-1 & \sqrt{3}+i\\ \sqrt{3}-i & -4\end{bmatrix}\to\begin{bmatrix}-1 & \sqrt{3}+i\\ 0 & 0\end{bmatrix}\Big\}r=1$$

よって，$-\alpha_1+(\sqrt{3}+i)\alpha_2=0$ より，$\alpha_2=k_1$ とおくと，

$\alpha_1=(\sqrt{3}+i)k_1$ となる。

よって，$\boldsymbol{x}_1=\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{bmatrix}=k_1\begin{bmatrix}\sqrt{3}+i\\ 1\end{bmatrix}$

ここで，$\boldsymbol{x}_1'=\begin{bmatrix}\sqrt{3}+i\\ 1\end{bmatrix}$ とおくと，

$\|\boldsymbol{x}_1'\|^2=\boldsymbol{x}_1'\cdot\boldsymbol{x}_1'={}^t\boldsymbol{x}_1'\overline{\boldsymbol{x}_1'}$

$=(\sqrt{3}+i)(\sqrt{3}-i)+1\cdot 1$

$=3-i^2+1=3+1+1=5$

$\therefore\ \|\boldsymbol{x}_1'\|=\sqrt{5}$ より，

$k_1=\dfrac{1}{\sqrt{5}}$ とおくと，$\boldsymbol{x}_1$ は正規化されて，$\boldsymbol{u}_1$ となる。

ここで，$k_1=\dfrac{1}{\sqrt{5}}$ とおくと，$\boldsymbol{x}_1$ は，正規化される。よって，これを $\boldsymbol{u}_1$ とおくと，

$\therefore\ \boldsymbol{u}_1=\dfrac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}\sqrt{3}+i\\ 1\end{bmatrix}$

(ii) $\lambda_2=-2$ のとき，①を $T_2\boldsymbol{x}_2=\boldsymbol{0}$，そして，$\boldsymbol{x}_2=\begin{bmatrix}\beta_1\\ \beta_2\end{bmatrix}$とおくと，

$\begin{bmatrix}2-\lambda_2 & \sqrt{3}+i\\ \sqrt{3}-i & -1-\lambda_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta_1\\ \beta_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$ のこと。

$$\begin{bmatrix}4 & \sqrt{3}+i\\ \sqrt{3}-i & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta_1\\ \beta_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ 0\end{bmatrix}$$

$\begin{bmatrix}\sqrt{3}-i & 1\\ 4 & \sqrt{3}+i\end{bmatrix}\to\begin{bmatrix}\sqrt{3}-i & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix}\}r=1$

$(\sqrt{3}-i)\beta_1+\beta_2=0$ より，$\beta_1=k_2$ とおくと，

$\beta_2=-(\sqrt{3}-i)k_2$ となる。

よって，$\boldsymbol{x}_2=k_2\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{3}+i\end{bmatrix}$

ここで，$\boldsymbol{x}_2'=\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{3}+i\end{bmatrix}$ とおくと，

$\|\boldsymbol{x}_2'\|^2=1\cdot 1+(-\sqrt{3}+i)(-\sqrt{3}-i)$

$=1+3-i^2=1+3+1=5$

$\therefore\ \|\boldsymbol{x}_2'\|=\sqrt{5}$ より，

$k_2=\dfrac{1}{\sqrt{5}}$ とおくと，

$\boldsymbol{x}_2$ は正規化されて，$\boldsymbol{u}_2$ となる。

ここで，$k_2=\dfrac{1}{\sqrt{5}}$ とおくと，$\boldsymbol{x}_2$ は正規化される。よって，これを $\boldsymbol{u}_2$ とおくと，

$\therefore\ \boldsymbol{u}_2=\dfrac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{3}+i\end{bmatrix}$

以上 (i)(ii) より，ユニタリ行列 U_U を

$U_U=[\boldsymbol{u}_1\ \ \boldsymbol{u}_2]=\dfrac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}\sqrt{3}+i & 1\\ 1 & -\sqrt{3}+i\end{bmatrix}$ とおくと，エルミート行列

$A_H=\begin{bmatrix}2 & \sqrt{3}+i\\ \sqrt{3}-i & -1\end{bmatrix}$ は，$U_U^{-1}A_HU_U$ により，対角化されて，

$U_U^{-1}A_HU_U=\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3 & 0\\ 0 & -2\end{bmatrix}$となる。大丈夫だった？

では，次の例題で 3 次のエルミート行列 A_H の対角化の問題にもチャレンジしてみよう。

> **(2) エルミート行列 $A_H=\begin{bmatrix} 0 & i & 1 \\ -i & 0 & -i \\ 1 & i & 1 \end{bmatrix}$ を，ユニタリ行列 U_U を用いて，**
>
> **$U_U^{-1}A_HU_U$ として対角化せよ。**

$T=A_H-\lambda E$ とおいて，$T\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}\cdots①$　とする。

$T=\begin{bmatrix} -\lambda & i & 1 \\ -i & -\lambda & -i \\ 1 & i & 1-\lambda \end{bmatrix}$ より，固有方程式：

$|T|=\lambda^2(1-\lambda)-\underbrace{i^2}_{-1}-\underbrace{i^2}_{-1}-(-\lambda)-\underbrace{i^2}_{-1}\lambda+\underbrace{i^2}_{-1}(1-\lambda)=0$ を解いて，

固有値を求めると，

$\lambda^2-\lambda^3+1+1+\lambda+\lambda-(1-\lambda)=0$ より，

$\lambda^3-\lambda^2-3\lambda-1=0$

$(\lambda+1)(\lambda^2-2\lambda-1)=0$

よって，$\lambda=\underbrace{-1}_{\lambda_1},\ \underbrace{1+\sqrt{2}}_{\lambda_2},\ \underbrace{1-\sqrt{2}}_{\lambda_3}$

3 次方程式の組み立て除法

$$\begin{array}{r|rrrr} & 1 & -1 & -3 & -1 \\ -1) & \downarrow & -1 & 2 & 1 \\ \hline & 1 & -2 & -1 & (0) \end{array}$$

(i)$\lambda_1=-1$ のとき，①を $T_1\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{0}$，そして $\boldsymbol{x}_1=\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix}$ とおくと，

$$\begin{bmatrix} 1 & i & 1 \\ -i & 1 & -i \\ 1 & i & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & i & 1 \\ 1 & i & 2 \\ -i & 1 & -i \end{bmatrix}\rightarrow\left.\begin{bmatrix} 1 & i & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\right\} r=2$$

$\alpha_1+i\alpha_2+\cancel{\alpha_3}=0$　かつ　$\alpha_3=0$

よって，$\alpha_2=k_1$ とおくと，$\alpha_1=-k_1i$

よって，$\boldsymbol{x}_1=k_1\begin{bmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

$\boldsymbol{x}_1'=\begin{bmatrix} -i \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ とおくと，

$\|\boldsymbol{x}_1'\|^2=-i\cdot i+1\cdot 1+\cancel{0\cdot 0}=2$

$\therefore\|\boldsymbol{x}_2'\|=\sqrt{2}$ より，

$k_1=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$ とおけばいい。

ここで，$k_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$ とおくと，$\boldsymbol{x}_1$ は正規化される。よって，これを $\boldsymbol{u}_1$ とおくと，

$$\therefore\ \boldsymbol{u}_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-i\\1\\0\end{bmatrix}$$ となるんだね。

(ⅱ) $\lambda_2=1+\sqrt{2}$ のとき，①を $\underline{T_2\boldsymbol{x}_2=\boldsymbol{0}}$，そして $\boldsymbol{x}_2=\begin{bmatrix}\beta_1\\\beta_2\\\beta_3\end{bmatrix}$ とおくと，

$$\begin{bmatrix}-\lambda_2 & i & 1\\-i & -\lambda_2 & -i\\1 & i & 1-\lambda_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta_1\\\beta_2\\\beta_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$ のこと

$$\begin{bmatrix}-1-\sqrt{2} & i & 1\\-i & -1-\sqrt{2} & -i\\1 & i & -\sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\beta_1\\\beta_2\\\beta_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}1 & i & -\sqrt{2}\\-i & -1-\sqrt{2} & -i\\-1-\sqrt{2} & i & 1\end{bmatrix}$$
$$\to\begin{bmatrix}1 & i & -\sqrt{2}\\0 & -2-\sqrt{2} & -(\sqrt{2}+1)i\\0 & (2+\sqrt{2})i & -(\sqrt{2}+1)\end{bmatrix}$$
$$\to\left.\begin{bmatrix}1 & i & -\sqrt{2}\\0 & \sqrt{2} & i\\0 & 0 & 0\end{bmatrix}\right\}r=2$$

$$\begin{cases}\beta_1+i\beta_2-\sqrt{2}\beta_3=0\\\sqrt{2}\beta_2+i\beta_3=0\end{cases}$$ となる。

$\beta_3=\sqrt{2}k_2$ とおくと，

$\beta_2=-ik_2$

$\beta_1-i^2k_2-2k_2=0$ より，$\beta_1=k_2$

よって，$\boldsymbol{x}_2=k_2\begin{bmatrix}1\\-i\\\sqrt{2}\end{bmatrix}$

$\boldsymbol{x}_2'=\begin{bmatrix}1\\-i\\\sqrt{2}\end{bmatrix}$ とおくと，

$\|\boldsymbol{x}_2'\|^2=1\cdot1+(-i)\cdot i+\sqrt{2}\cdot\sqrt{2}$
$=1+1+2=4$

$\therefore\|\boldsymbol{x}_2'\|=2$ より，$k_2=\frac{1}{2}$ とおけばいい。

ここで，$k_2=\frac{1}{2}$ とおくと，$\boldsymbol{x}_2$ は正規化される。よって，これを $\boldsymbol{u}_2$ とおくと，

$$\therefore\ \boldsymbol{u}_2=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\-i\\\sqrt{2}\end{bmatrix}$$ となる。

(iii) $\lambda_3 = 1-\sqrt{2}$ のとき，①を $\underline{T_3\boldsymbol{x}_3=\boldsymbol{0}}$，そして $\boldsymbol{x}_3=\begin{bmatrix}\gamma_1\\ \gamma_2\\ \gamma_3\end{bmatrix}$ とおくと，

$$\begin{bmatrix}-\lambda_3 & i & 1\\ -i & -\lambda_3 & -i\\ 1 & i & 1-\lambda_3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\gamma_1\\ \gamma_2\\ \gamma_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$ のこと

$$\begin{bmatrix}-1+\sqrt{2} & i & 1\\ -i & -1+\sqrt{2} & -i\\ 1 & i & \sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\gamma_1\\ \gamma_2\\ \gamma_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}1 & i & \sqrt{2}\\ -i & -1+\sqrt{2} & -i\\ -1+\sqrt{2} & i & 1\end{bmatrix}\to\begin{bmatrix}1 & i & \sqrt{2}\\ 0 & -2+\sqrt{2} & (\sqrt{2}-1)i\\ 0 & (2-\sqrt{2})i & \sqrt{2}-1\end{bmatrix}\to\begin{bmatrix}1 & i & \sqrt{2}\\ 0 & -\sqrt{2} & i\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}\Big\}\, r=2$$

$$\begin{cases}\gamma_1+i\gamma_2+\sqrt{2}\gamma_3=0\\ -\sqrt{2}\gamma_2+i\gamma_3=0\end{cases}$$ となる。

$\gamma_2 = k_3$ とおくと，

$$\gamma_3=\frac{\sqrt{2}}{i}\gamma_2=-\frac{i^2\sqrt{2}}{i}k_3=-\sqrt{2}ik_3$$

$\gamma_1+ik_3-2ik_3=0$ より，$\gamma_1=ik_3$

よって，$\boldsymbol{x}_3=\begin{bmatrix}\gamma_1\\ \gamma_2\\ \gamma_3\end{bmatrix}=k_3\begin{bmatrix}i\\ 1\\ -\sqrt{2}i\end{bmatrix}$

ここで，$k_3=\dfrac{1}{2}$ とおくと，$\boldsymbol{x}_3$ は正規化される。よって，これを $\boldsymbol{u}_3$ とおくと，

$\boldsymbol{x}_3'=\begin{bmatrix}i\\ 1\\ -\sqrt{2}i\end{bmatrix}$ とおくと，

$\|\boldsymbol{x}_3'\|^2=i\cdot(-i)+1\cdot 1+(-\sqrt{2}i)\cdot\sqrt{2}i$

$=1+1+2=4$

$\therefore \|\boldsymbol{x}_3'\|=2$ より，$k_3=\dfrac{1}{2}$ とおけばいい。

$$\therefore\ \boldsymbol{u}_3=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}i\\ 1\\ -\sqrt{2}i\end{bmatrix}$$ となる。

以上 (i)(ii)(iii) より，ユニタリ行列 $\boldsymbol{U}_U$ を

$$\boldsymbol{U}_U=[\boldsymbol{u}_1\ \boldsymbol{u}_2\ \boldsymbol{u}_3]=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}-\sqrt{2}i & 1 & i\\ \sqrt{2} & -i & 1\\ 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2}i\end{bmatrix}$$ とおくと，エルミート行列

$\boldsymbol{A}_H$ は $\boldsymbol{U}_U^{-1}\boldsymbol{A}_H\boldsymbol{U}_U=\begin{bmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1+\sqrt{2} & 0\\ 0 & 0 & 1-\sqrt{2}\end{bmatrix}$ と対角化できる。大丈夫？

講義 7 ● 行列の対角化　公式エッセンス

1. 固有値と固有ベクトルの関係

n 次正方行列 A の 2 つの固有値 λ_i, λ_j が $\lambda_i \neq \lambda_j$ $(i \neq j)$ のとき，それぞれに対応する固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i$ と $\boldsymbol{x}_j$ は線形独立となる。

2. 行列の対角化

n 次正方行列 A が，n 個の異なる固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ をもち，それぞれの固有値に対応する線形独立な固有ベクトルが $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_n$ のとき，正則行列 $P = [\boldsymbol{x}_1 \ \boldsymbol{x}_2 \cdots \boldsymbol{x}_n]$ を用いて，行列 A は次のように対角化できる。

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

対角成分 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ は，すべて固有値

3. ノルム $\|\boldsymbol{a}\|$ の性質

(i) $\|\boldsymbol{a}\| \geqq 0$　(ii) $\|k\boldsymbol{a}\| = |k|\,\|\boldsymbol{a}\|$　$(k \in R)$　など。

4. 直交行列 U の性質　(i) ${}^tUU = U\,{}^tU = E$　(ii) ${}^tU = U^{-1}$

5. 直交行列 U を表現行列にもつ線形変換 $f : R^n \to R^n$ の性質

(1) $\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y} = f(\boldsymbol{x}) \cdot f(\boldsymbol{y})$　(内積の保存)　(2) $\|\boldsymbol{x}\| = \|f(\boldsymbol{x})\|$　(大きさの保存)

(3) $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ のなす角と，$f(\boldsymbol{x})$ と $f(\boldsymbol{y})$ のなす角は等しい。　(角の保存)

6. シュミットの正規直交化法

R^n における一般の基底 $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\}$ を次の手順に従って，正規直交基底 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n\}$ に変換することができる。

(i) $m = 1$ のとき，$\boldsymbol{u}_1 = \dfrac{1}{\|\boldsymbol{a}_1\|}\boldsymbol{a}_1$ で求める。

(ii) $2 \leqq m \leqq n$ のとき，

$$\boldsymbol{b}_m = \boldsymbol{a}_m - \sum_{k=1}^{m-1}(\boldsymbol{u}_k \cdot \boldsymbol{a}_m)\boldsymbol{u}_k \text{ から，} \quad \boldsymbol{u}_m = \frac{1}{\|\boldsymbol{b}_m\|}\boldsymbol{b}_m \text{ を求める。}$$

7. 対称行列 A は，直交行列 U を用いて，$U^{-1}AU$ により，必ず対角化できる。

8. エルミート行列 A_H は，ユニタリ行列 U_U を用いて，$U_U{}^{-1}A_HU_U$ により，対角化できる。