線形代数 II 第 6 回講義資料

担当：大矢 浩徳 (OYA Hironori)*

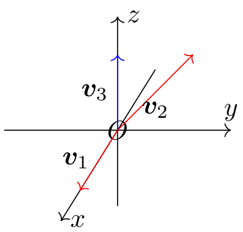
以下では $\mathbb{K}=\mathbb{R}$ または $\mathbb{C}$ とする．単に「n 次正方行列」と書いた時には $\mathbb{K}$ の元を成分とする n 次正方行列を考えているとする．

6.1　$\mathbb{K}^n$ の基底に関する補足

第 5 回講義資料では，

『$\mathbb{K}^n$ の n 個の一次独立なベクトルの組は $\mathbb{K}^n$ の基底をなす』

ということを学んだ (命題 5.1，定義 5.2 参照)．一方，$\mathbb{K}^n$ において一次独立という概念自体は n 個でない元の組に対しても定義される (第 4 回講義資料例 4 参照)．以下の命題は『任意の $k(<n)$ 個の一次独立な $\mathbb{K}^n$ の元の組に対して，適当に $\mathbb{K}^n$ の元を $(n-k)$ 個選んでくれば n 個の一次独立な元の組にできる，つまり，任意の任意の $k(<n)$ 個の一次独立な $\mathbb{K}^n$ の元の組は基底の一部にできる』ということを保証している．例えば，第 4 回講義資料例 4 を考えると，$\mathbb{K}^3$ の一次独立な 2 つの元 $\boldsymbol{v}_1=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_2=\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$ に対し，例えば，$\boldsymbol{v}_3=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$ をとると，$\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{v}_3\}$ が $\mathbb{K}^3$ の基底となる ($\det(\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2\ \boldsymbol{v}_3)=1$ であるため．命題 4.3 参照．)．



これが感覚的に十分理解でき，証明を読むと逆に混乱しそうであるという方は以下の命題の証明は一旦飛ばして読んでも後の議論には影響しない．実際，これは "感覚的にはほぼ明らか" と言って良いだろう．

命題 6.1

$k<n$ とし，$\boldsymbol{b}_1,\dots,\boldsymbol{b}_k$ を一次独立な $\mathbb{K}^n$ の元の組とする．このとき，ある $(n-k)$ 個の元 $\boldsymbol{b}_{k+1},\dots,\boldsymbol{b}_n\in\mathbb{K}^n$ が存在して，$\boldsymbol{b}_1,\dots,\boldsymbol{b}_k,\boldsymbol{b}_{k+1},\dots,\boldsymbol{b}_n$ が n 個の一次独立な元，つまり，$\{\boldsymbol{b}_1,\dots,\boldsymbol{b}_k,\boldsymbol{b}_{k+1},\dots,\boldsymbol{b}_n\}$ が $\mathbb{K}^n$ の基底となるようにできる．

証明． $\boldsymbol{b}_1,\dots,\boldsymbol{b}_k$ に対して，

$$m:=\max\{\ell\in\mathbb{Z}_{\geq 0}\mid \text{ある } \boldsymbol{b}_{k+1},\dots,\boldsymbol{b}_{k+\ell}\in\mathbb{K}^n \text{が存在して，} \boldsymbol{b}_1,\dots,\boldsymbol{b}_k,\boldsymbol{b}_{k+1},\dots,\boldsymbol{b}_{k+\ell}\text{は一次独立}\}$$

とおく ($\max\{\dots\}$ は $\{\dots\}$ の元の中での最大値をとるという意味)．言葉で書くと，『m は一次独立性を保ったまま $\boldsymbol{b}_1,\dots,\boldsymbol{b}_k$ に付け足せる元の数の最大値』である．示すべきことは $m=n-k$ である．

$\mathbb{K}^n$ における n 個の一次独立な元は基底になることより (命題 5.1)，$m\leq n-k$ である ($n-k+1$ 個目の元を追加しようとすると，それはそれまでの n 個の一次独立な元の一次結合として書けてしまうので一次独立性

* *e-mail*：hoya@shibaura-it.ac.jp

を保った元の追加とはならない)．これより，$m=n-k$ であることを示すためには，$m<n-k$ であると仮定して矛盾を導けばよい．

$\boldsymbol{b}_1,\ldots,\boldsymbol{b}_k,\boldsymbol{b}_{k+1},\ldots,\boldsymbol{b}_{k+m}$ を一次独立な $\mathbb{K}^n$ の元の組とする．m の最大性より，各 $j=1,\ldots,n$ に対し，$\boldsymbol{b}_1,\ldots,\boldsymbol{b}_k,\boldsymbol{b}_{k+1},\ldots,\boldsymbol{b}_{k+m},\boldsymbol{e}_j$ は一次従属となる．よって，ある $\widetilde{c}_{1,j},\ldots,\widetilde{c}_{k+m,j},a_j\in\mathbb{K},a_j\neq 0$ が存在して，

$$\widetilde{c}_{1,j}\boldsymbol{b}_1+\cdots+\widetilde{c}_{k+m,j}\boldsymbol{b}_{k+m}+a_j\boldsymbol{e}_j=\mathbf{0}$$

となる (ここで，a_j が 0 でないのは，もしこれが 0 であったとすると $\boldsymbol{b}_1,\ldots,\boldsymbol{b}_{k+m}$ が一次独立であるという仮定に矛盾するためである)．$a_j\boldsymbol{e}_j$ を移項した後，両辺を $-1/a_j$ 倍して，$c_{i,j}:=-\widetilde{c}_{i,j}/a_j$ とおくと，

$$c_{1,j}\boldsymbol{b}_1+\cdots+c_{k+m,j}\boldsymbol{b}_{k+m}=\boldsymbol{e}_j \tag{6.1}$$

となる．ここで，$\boldsymbol{b}_j$ を第 j 列に持つ $n\times(k+m)$ 行列 $B=(\boldsymbol{b}_1\cdots\boldsymbol{b}_{k+m})$ と，$c_{i,j}$ を (i,j) 成分とする $(k+m)\times n$ 行列 $C=(c_{i,j})_{i=1,\ldots,k+m,j=1,\ldots,n}$ を考えると，(6.1) は

$$BC=(\boldsymbol{e}_1\cdots\boldsymbol{e}_n)=I_n$$

と書き換えられる．ここで，n 個の未知数 $x_1,\ldots,x_n$ を含む連立一次方程式

$$C\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_n\end{pmatrix}=\mathbf{0} \tag{6.2}$$

を考える．このとき，両辺に左から B をかけることで，

$$\begin{aligned}C\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_n\end{pmatrix}=\mathbf{0}\ &\Rightarrow BC\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_n\end{pmatrix}=B\mathbf{0}\\ &\Rightarrow I_n\begin{pmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_n\end{pmatrix}=\mathbf{0}\\ &\Rightarrow x_1=\cdots=x_n=0\end{aligned}$$

となる．よって，連立一次方程式 (6.2) の解の自由度は 0 なので，いま $n-\operatorname{rank}C=0$，つまり，$\operatorname{rank}C=n$ であることがわかる．ここで，$m<n-k$ とすると，$m+k<n$ なので，C の行の数が n より小さくなり，このとき $\operatorname{rank}C=n$ とはなりえないため矛盾する．よって，$m=n-k$ である． □

注意 1．命題 6.1 の証明は第 5 回資料で証明を飛ばした，

『$\mathbb{K}^n$ 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』

ということの証明にもなっている．まず，$\mathbb{K}^n$ の基底 B の元の個数が $n+1$ 以上にならないということは『一次独立な n 個のベクトルがあると既に基底になる』という命題 5.1 からわかっている．よって，B の元の個数が n 未満だと仮定して矛盾を導けば良い．$B=\{\boldsymbol{b}_1,\ldots,\boldsymbol{b}_\ell\}$ $(\ell<n)$ と仮定すると，基底の性質 (定義 5.2 (2)) から，各 $j=1,\ldots,n$ に対し，$\boldsymbol{e}_j$ は $\boldsymbol{b}_1,\ldots,\boldsymbol{b}_\ell$ らの一次結合で書ける．これは式で書くと (6.1) の形の式になっており，そうするとその後の証明は上の命題 6.1 の証明と同じである．以上より，$\mathbb{K}^n$ の部分集合 B に対し，

$$B\text{ は }\mathbb{K}^n\text{ の基底である}\Leftrightarrow B\text{ は一次独立な }n\text{ 個のベクトルからなる集合である}$$

という同値性が厳密に証明できた．

6.2　グラム・シュミットの直交化法

6.1 節では，いくつかの一次独立な $\mathbb{K}^n$ があれば，そこに元をいくつか付け足して $\mathbb{K}^n$ の基底が構成できるということを学んだ．この節では，次に『基底が与えられた場合に，そこから正規直交基底を得る方法』について学ぶ．これは，**グラム・シュミットの直交化法**と呼ばれる方法である．

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』のことであった．ここで，正規直交基底を作ろうと思ったときに難しい部分は『互いに直交する n 個の元』を作る部分である．それさえできてしまえば，各元の大きさを 1 にするという部分は，各元を適当にスカラー倍して大きさを調整すれば良いだけなので容易である．よって，良く理解するべき部分は『如何にして一般の基底から互いに直交する n 個の元を作るか』というところである．一般的な方法は後に回して，例で考えよう (この例は一般的な状況を十分に説明していると言える).

例 1. $B = \left\{\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix}\right\}$ という $\mathbb{R}^3$ の部分集合は $\mathbb{R}^3$ の基底となる．($\left|\begin{pmatrix}1&1&1\\1&0&2\\0&-1&3\end{pmatrix}\right| = -2 \neq 0$ より，B は 3 つの一次独立なベクトルからなる集合である．) ここから正規直交基底を作ってみよう．

$$\boldsymbol{u}'_1 = \boldsymbol{v}_1 \coloneqq \begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 \coloneqq \begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_3 \coloneqq \begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix}$$

とおく．まず，

$$\boldsymbol{u}'_2 \coloneqq \boldsymbol{v}_2 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_2)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1 = \begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1/2\\-1/2\\-1\end{pmatrix}$$

とおく．すると，

$$\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_2 = \boldsymbol{u}'_1 \cdot \left(\boldsymbol{v}_2 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_2)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1\right) = \boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{v}_2 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_2)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1) = \boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{v}_2 - \boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{v}_2 = 0$$

となるので，$\boldsymbol{u}'_1$ と $\boldsymbol{u}'_2$ は直交する．次に，

$$\boldsymbol{u}'_3 \coloneqq \boldsymbol{v}_3 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1 - \frac{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_2)}\boldsymbol{u}'_2 = \begin{pmatrix}1\\2\\3\end{pmatrix} - \frac{3}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix} - \frac{-7/2}{3/2}\begin{pmatrix}1/2\\-1/2\\-1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}2/3\\-2/3\\2/3\end{pmatrix}$$

とすると，$\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_2 = \boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_1 = 0$ より，

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_3 &= \boldsymbol{u}'_1 \cdot \left(\boldsymbol{v}_3 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1 - \frac{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_2)}\boldsymbol{u}'_2\right) \\
&= \boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_3 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1) - \frac{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_2)}(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_2) \\
&= \boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_3 - \boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_3 - 0 = 0, \\
\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_3 &= \boldsymbol{u}'_2 \cdot \left(\boldsymbol{v}_3 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1 - \frac{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_2)}\boldsymbol{u}'_2\right) \\
&= \boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{v}_3 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_1) - \frac{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_2)}(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_2) \\
&= \boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{v}_3 - 0 - \boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{v}_3 = 0
\end{aligned}$$

となるので，$\boldsymbol{u}'_3$ は $\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2$ と直交する．以上より，$\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2, \boldsymbol{u}'_3$ は互いに直交する $\mathbb{R}^3$ の 3 つの元である．よって，後はそれぞれの元の大きさが 1 になるようにスカラー倍で調整すれば正規直交基底が得られるが (それぞれをスカラー倍しても直交性は失われないことに注意)，そのためには，

$$\boldsymbol{u}_k \coloneqq \frac{1}{\|\boldsymbol{u}'_k\|}\boldsymbol{u}'_k, \quad k = 1, 2, 3$$

とすればよい．なぜなら，このとき

$$\|\boldsymbol{u}_k\| = \sqrt{\boldsymbol{u}_k \cdot \boldsymbol{u}_k} = \sqrt{\left(\frac{1}{\|\boldsymbol{u}'_k\|}\boldsymbol{u}'_k\right) \cdot \left(\frac{1}{\|\boldsymbol{u}'_k\|}\boldsymbol{u}'_k\right)} = \sqrt{\frac{1}{\|\boldsymbol{u}'_k\|^2}(\boldsymbol{u}'_k \cdot \boldsymbol{u}'_k)} = \frac{1}{\|\boldsymbol{u}'_k\|}\sqrt{\boldsymbol{u}'_k \cdot \boldsymbol{u}'_k} = \frac{\|\boldsymbol{u}'_k\|}{\|\boldsymbol{u}'_k\|} = 1$$

となるためである．具体的に求めると，

$$\boldsymbol{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\1/\sqrt{2}\\0\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{3/2}}\begin{pmatrix}1/2\\-1/2\\-1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1/\sqrt{6}\\-1/\sqrt{6}\\-2/\sqrt{6}\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{4/3}}\begin{pmatrix}2/3\\-2/3\\2/3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1/\sqrt{3}\\-1/\sqrt{3}\\1/\sqrt{3}\end{pmatrix}$$

となり，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3\}$ は $\mathbb{R}^3$ の正規直交基底である．

例 1 の方針は以下のようにまとめられる：

$\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ という一次独立なベクトルが与えられたとき，

1) まず，$\boldsymbol{v}_2$ から $\boldsymbol{u}'_1 = \boldsymbol{v}_1$ の定数倍を適切に引くことで “直交性における余分” を削り，$\boldsymbol{u}'_1$ と直交する元 $\boldsymbol{u}'_2$ を作る．
2) 次に，$\boldsymbol{v}_3$ から $\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2$ の定数倍を適切に引くことで “直交性における余分” を削り，$\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2$ と直交する元 $\boldsymbol{u}'_3$ を作る．
3) 次に，$\boldsymbol{v}_4$ から $\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2, \boldsymbol{u}'_3$ の定数倍を適切に引くことで “直交性における余分” を削り，$\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2, \boldsymbol{u}'_3$ と直交する元 $\boldsymbol{u}'_4$ を作る．

$\cdots$

$n-1$) 次に，$\boldsymbol{v}_n$ から $\boldsymbol{u}'_1, \ldots, \boldsymbol{u}'_{n-1}$ の定数倍を適切に引くことで “直交性における余分” を削り，$\boldsymbol{u}'_1, \ldots, \boldsymbol{u}'_{n-1}$ と直交する元 $\boldsymbol{u}'_n$ を作る．

n) ここまでのステップで，互いに直交する n 個の元が作れているので，後は，

$$\boldsymbol{u}_k := \frac{1}{\|\boldsymbol{u}'_k\|}\boldsymbol{u}'_k, \quad k = 1, \ldots, n$$

として，すべての元の大きさを 1 に調整すれば，$\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ が正規直交基底である．

ここでの “直交性における余分” が $\dfrac{(\boldsymbol{u}'_i \cdot \boldsymbol{v}_k)}{(\boldsymbol{u}'_i \cdot \boldsymbol{u}'_i)}$ という形で与えられることは，例 1 の計算を見れば納得できるだろう (例 1 における直交性の計算では具体的な数字を用いていないことに注意)．

このアルゴリズムを厳密な形でも述べておこう．ただし，これで本当に正規直交基底が得られるということの厳密な証明は補足プリントに回すことにする．既に十分納得できたという方は読まなくても良いが，気になる方は一読いただけると良いと思う．

グラム・シュミットの直交化法 (Gram–Schmidt orthonormalization)

$B = \{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ を $\mathbb{K}^n$ の基底とする．このとき，以下の方法で B から $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底を得ることができる：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{u}'_1 &\coloneqq \boldsymbol{v}_1, \\
\boldsymbol{u}'_2 &\coloneqq \boldsymbol{v}_2 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_2)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1, \\
\boldsymbol{u}'_3 &\coloneqq \boldsymbol{v}_3 - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1 - \frac{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{v}_3)}{(\boldsymbol{u}'_2 \cdot \boldsymbol{u}'_2)}\boldsymbol{u}'_2, \\
&\ \vdots \\
\boldsymbol{u}'_k &\coloneqq \boldsymbol{v}_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{(\boldsymbol{u}'_i \cdot \boldsymbol{v}_k)}{(\boldsymbol{u}'_i \cdot \boldsymbol{u}'_i)}\boldsymbol{u}'_i, \\
&\ \vdots \\
\boldsymbol{u}'_n &\coloneqq \boldsymbol{v}_n - \frac{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{v}_n)}{(\boldsymbol{u}'_1 \cdot \boldsymbol{u}'_1)}\boldsymbol{u}'_1 - \cdots - \frac{(\boldsymbol{u}'_{n-1} \cdot \boldsymbol{v}_n)}{(\boldsymbol{u}'_{n-1} \cdot \boldsymbol{u}'_{n-1})}\boldsymbol{u}'_{n-1},
\end{aligned}$$

とし，

$$\boldsymbol{u}_k \coloneqq \frac{1}{||\boldsymbol{u}'_k||}\boldsymbol{u}'_k, \quad k = 1, \ldots, n$$

とすると，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ は $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底.

6.3 実対称行列/エルミート行列の直交行列/ユニタリ行列を用いた対角化

本節では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．既に習ったものもあると思われるが，初めに言葉を思い出しておこう．

定義 6.2

n 次正方行列 A に対し，

$$A^* = {}^t\overline{A} \ (A \text{ を転置し，各成分の複素共役をとったもの})$$

とする．これを A の**随伴行列**と呼ぶ．$(A^*)^* = A$，A の各成分が実数のとき，$A^* = {}^tA$ であることに注意する．また，任意の n 次正方行列 B に対し，$(AB)^* = B^*A^*$ となる．さらに，以下のように定義する．

(1) $A^*A = I_n$ となるとき，A を**ユニタリ行列**という．このとき，$A^* = A^{-1}$ なので，$AA^* = I_n$ でもあることに注意する．

(2) ${}^tAA = I_n$ となるとき，A を**直交行列**という．このとき，${}^tA = A^{-1}$ なので，$A{}^tA = I_n$ でもあることに注意する．また，直交行列 A の各成分が全て実数のとき，A を**実直交行列**という。実直交行列はユニタリ行列でもあることに注意する．

(3) $A^* = A$ となるとき，A を**エルミート行列**という．

(4) ${}^tA = A$ となるとき，A を**対称行列**という．また，対称行列 A の各成分が全て実数のとき，A を**実対称行列**という。実対称行列はエルミート行列でもあることに注意する．

例 2.

- $A = \begin{pmatrix} 1+i & 2i \\ -4 & 3i \end{pmatrix}$ のとき，$A^* = \begin{pmatrix} 1-i & -4 \\ -2i & -3i \end{pmatrix}$ である．
- $A = \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{6} & i/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \\ 0 & 2/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$ は，ユニタリ行列である．$A^*A = I_3$ は各自確認せよ．

- $A = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 1/2 & 1/2 \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$ は，(実) 直交行列である．${}^tAA = I_3$ は各自確認せよ．
- $A = \begin{pmatrix} 0 & -i & i \\ i & 0 & -1 \\ -i & -1 & 0 \end{pmatrix}$ は，エルミート行列である．
- $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ は，(実) 対称行列である．

次が本節の主定理である．

定理 6.3

A を n 次エルミート行列とする．このとき，以下が成立する．

(1) A の固有値は全て実数である．
(2) A は対角化可能である．
(3) A はあるユニタリ行列 U を用いて対角化できる．つまり，あるユニタリ行列 U が存在して，$U^{-1}AU(=U^*AU)$ が対角行列になる．

定理 6.3 は第 5 回講義資料の 5.1 節 (定理 5.3 参照) での考え方を思い出すと，『エルミート行列はその固有ベクトルで $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底が作れる』という事実も述べている．特に，A の固有空間は $\mathbb{C}^n$ において全て直交している (第 5 回本レポート課題問題 2 参照)．今回は定理 6.3 をとりあえず抽象的に証明し，定理 6.3 (3) のユニタリ行列をどうやって見つけてくるかということは次回解説する．

例 3. $A = \begin{pmatrix} 0 & -i & i \\ i & 0 & -1 \\ -i & -1 & 0 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{6} & i/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \\ 0 & 2/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$ とすると，U はユニタリ行列で，

$$U^{-1}AU = U^*AU = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

となる．

定理 6.3 の証明. n に関する数学的帰納法で示す．$n=1$ のとき，$A=(a)$ とすると，$A^* = (\overline{a})$ であるので $A^* = A$ のとき $a = \overline{a}$．よって a は実数で，これが A の固有値なので，(1) は正しい．(2), (3) は $n=1$ のときは自明である．

$(n-1)$ 次エルミート行列に対して定理が成立すると仮定して，n 次エルミート行列 A に対する定理の主張を示す．λ_1 を A の固有方程式 $\Phi_A(t)=0$ の解とする．ただし，この段階では実数解が存在するとは限らないので複素数の範囲で解をとる (代数学の基本定理*1より複素数解は常に存在する)．このとき，λ_1 は A の固有値で，固有値 λ の固有ベクトルは少なくとも 1 つは存在するので，そのうち大きさが 1 のものをとって (適当にスカラー倍で大きさを調整する)，$\boldsymbol{u}_1$ とおく (つまり，$A\boldsymbol{u}_1 = \lambda_1\boldsymbol{u}_1, \|\boldsymbol{u}_1\| = 1$)．

このとき命題 6.1 より，ある $(n-1)$ 個の $\mathbb{C}^n$ の元 $\boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ が存在して，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots, \boldsymbol{v}_n\}$ は $\mathbb{C}^n$ の基底となり，さらにグラム・シュミットの直交化法により，これを正規直交基底 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ にすることができる．ここで，グラム・シュミットの直交化法の手順を思い出すと，得られる正規直交基底の 1 つ目の元は $\boldsymbol{u}_1$ のままであることに注意する．

$U_1 = (\boldsymbol{u}_1\ \boldsymbol{u}_2 \cdots \boldsymbol{u}_n)$ とおくと，命題 5.8 より U_1 はユニタリ行列である．ここで，

$$U_1^{-1}AU_1 = (U_1^{-1}A\boldsymbol{u}_1\ U_1^{-1}A\boldsymbol{u}_2 \cdots U_1^{-1}A\boldsymbol{u}_n) = (\lambda_1 U_1^{-1}\boldsymbol{u}_1\ U_1^{-1}A\boldsymbol{u}_2 \cdots U_1^{-1}A\boldsymbol{u}_n) = (\lambda_1\boldsymbol{e}_1\ U_1^{-1}A\boldsymbol{u}_2 \cdots U_1^{-1}A\boldsymbol{u}_n).$$

*1 今はこの定理は認めることにする．

($U_1^{-1}\boldsymbol{u}_1 = \boldsymbol{e}_1$ については $\boldsymbol{u}_1 = U_1\boldsymbol{e}_1$ からわかる．) よって，行列の形で書くと，

$$U_1^{-1}AU_1 = \left(\begin{array}{c|ccc} \lambda_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & A_2 & \\ 0 & & & \end{array}\right) \tag{6.3}$$

となることがわかる．また，$A^* = A, U_1^* = U_1^{-1}$ なので，

$$(U_1^{-1}AU_1)^* = U_1^*A^*(U_1^{-1})^* = U_1^*A^*(U_1^*)^* = U_1^{-1}AU_1 \tag{6.4}$$

となるため，$U_1^{-1}AU_1$ もエルミート行列である．これより，(6.3) において，

- λ_1 は実数 ($\overline{\lambda_1} = \lambda_1$ とならないといけないため)，
- $a_2 = \cdots = a_n = 0$，
- A_2 は $(n-1)$ 次エルミート行列，

となることがわかる．ここで，帰納法の仮定より，あるユニタリ行列 U_2 と実数 $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$ が存在して，

$$U_2^{-1}A_2U_2 = \begin{pmatrix} \lambda_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$$

となる．これより，

$$U = U_1 \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & U_2 & \\ 0 & & & \end{array}\right)$$

とすると，U は n 次ユニタリ行列で (計算は容易である．各自確認せよ．一般にユニタリ行列の積はユニタリ行列である．)，

$$\begin{aligned} U^{-1}AU &= \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & U_2 & \\ 0 & & & \end{array}\right)^{-1} U_1^{-1}AU_1 \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & U_2 & \\ 0 & & & \end{array}\right) \\ &= \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & U_2^{-1} & \\ 0 & & & \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|ccc} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & A_2 & \\ 0 & & & \end{array}\right) \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & U_2 & \\ 0 & & & \end{array}\right) \\ &= \left(\begin{array}{c|ccc} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & U_2^{-1}A_2U_2 & \\ 0 & & & \end{array}\right) \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる．これにより，n 次エルミート行列の場合に (1)，(2)，(3) が全て示された． □

定理 6.3 の “実バージョン” も以下のように得られる．実対称行列はエルミート行列の特別な場合なので，どこが新しい部分なのか一見見逃しがちであるが，(3) の U として実直交行列がとれるというのが新しい部分である．

定理 6.4

A を n 次実対称行列とする．このとき，以下が成立する．

(1) A の固有値は全て実数である．
(2) A は対角化可能である．
(3) A はある実直交行列 U を用いて対角化できる．つまり，ある実直交行列 U が存在して，$U^{-1}AU(={}^tUAU)$ が対角行列になる．

証明は定理 6.3 の証明と全く同じである．複素共役を全て忘れれば良い．ただし，今回は定理 6.3 を既に証明しているため，証明中の λ_1 を取るところで λ_1 が既に実数の範囲で取れることがわかっていることがポイントである．これにより，A が実行列であることと合わせて，固有値 λ_1 の固有ベクトルを $\mathbb{R}^n$ から取ってくることができることがわかり，上の証明中を全て実数の範囲で行うことができることがわかる．実ユニタリ行列は直交行列なので，これで定理 6.4 が得られる．

定理 6.4 は第 5 回講義資料の 5.1 節 (定理 5.3 参照) での考え方を思い出すと，『実対称行列はその固有ベクトルで $\mathbb{R}^n$ の正規直交基底が作れる』という事実も述べている．特に，A の固有空間は $\mathbb{R}^n$ において全て直交している．

例 4. $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ とすると，A は実対称行列である．A の固有多項式は

$$\Phi_A = \left| \begin{pmatrix} t-1 & -1 \\ -1 & t+1 \end{pmatrix} \right| = t^2 - 2 = (t+\sqrt{2})(t-\sqrt{2})$$

より，A の固有値は $\pm\sqrt{2}$ である．
$\mathbb{R}^2$ における固有値 $\sqrt{2}$ の固有空間を求めると，

$$V(\sqrt{2}) = \left\{ c \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}-1 \end{pmatrix} \;\middle|\; c \in \mathbb{R} \right\}.$$

$\mathbb{R}^2$ における固有値 $-\sqrt{2}$ の固有空間を求めると，

$$V(-\sqrt{2}) = \left\{ c \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2}-1 \end{pmatrix} \;\middle|\; c \in \mathbb{R} \right\}.$$

となるが，

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

となるので，固有空間 $V(\sqrt{2})$ と $V(-\sqrt{2})$ は $\mathbb{R}^2$ において確かに直交している (下のグラフの青が $V(\sqrt{2})$，黄色が $V(-\sqrt{2})$)．