線形代数 II 第 7 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．

6.3 節では以下の事実を証明した．

定理 6.3 (再掲)

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 6.4 (再掲)

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．

今回はこれらの定理の (3) で述べられているユニタリ行列/実直交行列 U を見つける具体的な方法を解説する．ここで第 6 回講義資料で学んだグラム・シュミットの直交化法が活躍する．『実対称行列/エルミート行列が実直交行列/ユニタリ行列で対角化できると何が嬉しいのか』ということについては気になるところだと思われるが，次回その応用を解説するので一旦お待ちいただきたい．

7.1 実対称行列/エルミート行列の実直交行列/ユニタリ行列を用いた対角化の具体的な方法

まず，n 次正方行列 A がある正則行列 P をによって対角化可能であるとき，P は A の固有ベクトルを並べて得られる行列となるのであった (命題 3.1)．さらに，命題 5.8 より，$\mathbb{K}^n$ の n 個のベクトル $\boldsymbol{w}_1, \dots, \boldsymbol{w}_n$ に関して，

$$\boldsymbol{w}_1, \dots, \boldsymbol{w}_n \text{を並べてできる } n \text{ 次正方行列 } (\boldsymbol{w}_1 \cdots \boldsymbol{w}_n) \text{ が} \begin{cases} \text{実直交行列 } (\mathbb{K} = \mathbb{R} \text{ のとき}) \\ \text{ユニタリ行列 } (\mathbb{K} = \mathbb{C} \text{ のとき}). \end{cases}$$
$$\Leftrightarrow \{\boldsymbol{w}_1, \dots, \boldsymbol{w}_n\} \text{ が } \mathbb{K}^n \text{の正規直交基底}$$

という対応があったことを思い出すと，実対称行列/エルミート行列 A を対角化する実直交行列/ユニタリ行列 U を得るということは，結局

『A の固有ベクトルだけを使って $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底を作る』

* *e-mail*：hoya@shibaura-it.ac.jp

ということになる (作ってしまえばあとはそれを並べれば求める実直交行列/ユニタリ行列である).

ここで，一般論である定理 6.3, 6.4 から n 次の実対称行列/エルミート行列 A についてはその固有ベクトルだけを使って $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底 $\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ が作れるということは保証されている．A が固有値として λ, λ' $(\lambda \neq \lambda')$ を持ち，$\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ のうち，固有値 λ に対応する固有ベクトルが $\boldsymbol{u}_{i_1}, \ldots, \boldsymbol{u}_{i_k}$，固有値 λ' に対応する固有ベクトルが $\boldsymbol{u}_{j_1}, \ldots, \boldsymbol{u}_{j_\ell}$ であったとする．このとき，対角化の際の固有ベクトルの取り方を思い出すと，A の固有値 λ, λ' に対応する固有空間 $V(\lambda), V(\lambda')$ はそれぞれ,

$$\begin{aligned} V(\lambda) &= \{c_1\boldsymbol{u}_{i_1} + \cdots + c_k\boldsymbol{u}_{i_k} \mid c_1, \ldots, c_k \in \mathbb{K}\} \\ V(\lambda') &= \{c'_1\boldsymbol{u}_{j_1} + \cdots + c'_\ell\boldsymbol{u}_{j_\ell} \mid c'_1, \ldots, c'_\ell \in \mathbb{K}\} \end{aligned}$$

となることがわかる．ここで，$\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ は正規直交基底なので，特に任意の $1 \leq s \leq k, 1 \leq t \leq \ell$ に対し，

$$\boldsymbol{u}_{i_s} \cdot \boldsymbol{u}_{j_t} = 0$$

となるから，任意の元 $c_1\boldsymbol{u}_{i_1} + \cdots + c_k\boldsymbol{u}_{i_k} \in V(\lambda), c'_1\boldsymbol{u}_{j_1} + \cdots + c'_\ell\boldsymbol{u}_{j_\ell} \in V(\lambda')$ に対し，

$$(c_1\boldsymbol{u}_{i_1} + \cdots + c_k\boldsymbol{u}_{i_k}) \cdot (c'_1\boldsymbol{u}_{j_1} + \cdots + c'_\ell\boldsymbol{u}_{j_\ell}) = \sum_{s=1}^{k}\sum_{t=1}^{\ell} \overline{c_s}c'_t(\boldsymbol{u}_{i_s} \cdot \boldsymbol{u}_{j_t}) = 0$$

となることがわかる (内積の性質については命題 5.6 参照)．つまり，$V(\lambda)$ と $V(\lambda')$ から任意に 1 つづつ元をとってきたとき，これらは直交するということである．これより，

固有空間 $V(\lambda)$ と $V(\lambda')$ は直交している

ということがわかる．定理の形でまとめておこう[*1].

定理 7.1

A を n 次の実対称行列 ($\mathbb{K} = \mathbb{R}$ のとき)/エルミート行列 ($\mathbb{K} = \mathbb{C}$ のとき) とする．このとき，A の 2 つの異なる固有値 λ, λ' に対応する固有空間をそれぞれ $V(\lambda), V(\lambda')$ とすると，$\mathbb{K}^n$ において $V(\lambda)$ と $V(\lambda')$ は直交する．

さて，定理 7.1 から実対称行列/エルミート行列の異なる固有値に対応する固有空間は自動的に直交するということがわかった．このため，正規直交基底を作りたいのであれば，各固有空間から固有ベクトルを選んでくる際に毎回直交するベクトルを選んでくれば良いということになる．実際にはいきなり直交するベクトルを選んでくるのは難しいので，

- まず固有空間から一次独立なベクトルを選んできて，その後グラム・シュミットの直交化法によって直交化させる

という手続きをとれば良い．ここで，グラム・シュミットの直交化法の具体的な手順を思い出すと，これは大まかに言えば「初めに準備したベクトルの組を用いて足したり引いたりすることで正規直交基底を作る」というような手法だったので，グラム・シュミットの直交化法の過程で固有空間からはみ出してしまう (つまり固有ベクトルでないものができてしまう) ということは起こらないということに注意しよう．

以上をまとめると実対称行列/エルミート行列 A を対角化する実直交行列/ユニタリ行列 U を求める手順は以下のようになる．

(Step 1) 第 4 回講義資料 p.7 以降に述べたアルゴリズムに従って，A の固有空間・固有ベクトルを求める．

(Step 2) 固有値ごとにグラム・シュミットの直交化法を用いて選んできたベクトルを正規直交化する．

(Step 3) Step 2 で得られたベクトルを列ベクトルとして並べれば U が得られる．

[*1] ここでは固有ベクトルからなる正規直交基底の存在を用いて実対称行列/エルミート行列の固有空間の直交性を説明したが，実は正規直交基底の存在を使わなくてもこれらの固有空間の直交性は証明できる．実は第 5 回本レポート課題の問題 2 がこれに対応する話となっており，問題 2 の解答およびその補足解説で解説を書いているので参照してもらいたい．

以下ではいくつか例を見てみよう．

例 1． $A := \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ とすると，A は実対称行列である．A を対角化する実直交行列 U を求めてみよう．A の固有多項式は，

$$\begin{aligned} \Phi_A(t) &= \left| \begin{pmatrix} t-2 & 1 & 0 \\ 1 & t-2 & 1 \\ 0 & 1 & t-2 \end{pmatrix} \right| \\ &= (t-2)^3 + 0 + 0 - (t-2) - (t-2) - 0 = (t-2)(t-(2+\sqrt{2}))(t-(2-\sqrt{2})) \end{aligned}$$

となるので，A の固有値は $2, 2 \pm \sqrt{2}$ である．

固有値 2 の固有ベクトルを求める．x_1, x_2, x_3 に関する連立一次方程式

$$(2I_3 - A)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を解くと，

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = c\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (c \text{ は任意パラメータ})$$

となるので，固有値 2 に対する固有ベクトルの 1 つとして，$\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ が取れる．これに対して，グラム・シュミットの直交化法を適用するというのは大きさを 1 にするということになるので，

$$\boldsymbol{u}_1 := \frac{1}{\sqrt{(-1)^2 + 0^2 + 1^2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

が取るべきベクトルであることがわかる．

次に固有値 $2+\sqrt{2}$ の固有ベクトルを求める．x_1, x_2, x_3 に関する連立一次方程式

$$((2+\sqrt{2})I_3 - A)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & \sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を解くと，

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = c\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (c \text{ は任意パラメータ})$$

となるので，固有値 $2+\sqrt{2}$ に対する固有ベクトルの 1 つとして，$\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$ が取れる．これに対して，グラム・シュミットの直交化法を適用するというのは大きさを 1 にするということになるので，

$$\boldsymbol{u}_2 := \frac{1}{\sqrt{1^2 + (-\sqrt{2})^2 + 1^2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

が取るべきベクトルであることがわかる．

次に固有値 $2-\sqrt{2}$ の固有ベクトルを求める．x_1, x_2, x_3 に関する連立一次方程式

$$((2-\sqrt{2})I_3 - A_1)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & -\sqrt{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を解くと,

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (c \text{ は任意パラメータ})$$

となるので，$2-\sqrt{2}$ に対する固有ベクトルの 1 つとして，$\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$ が取れる．これに対して，グラム・シュミットの直交化法を適用するというのは大きさを 1 にするということになるので,

$$\boldsymbol{u}_3 \coloneqq \frac{1}{\sqrt{1^2+(\sqrt{2})^2+1^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

が取るべきベクトルであることがわかる．以上より,

$$U \coloneqq (\boldsymbol{u}_1\ \boldsymbol{u}_2\ \boldsymbol{u}_3) = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 1/2 & 1/2 \\ 0 & -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

とすると，U は実直交行列で $U^{-1}AU = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2+\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 2-\sqrt{2} \end{pmatrix}$ となる．

ここでの計算からもわかるように,『グラム・シュミットの直交化法を使う』とは言いながら重複度が 1 の固有値の固有空間に関しては選んでくるベクトルはただ 1 つなので，ただ大きさを 1 に調整すれば良いということになる．特にこの例のように n 次実対称行列/エルミート行列 A が相異なる n 個の固有値を持つ場合には，各固有空間から大きさ 1 のベクトルを選んでくれば自動的に実直交行列/ユニタリ行列が得られるということになる．

例 2. $A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 4 \\ 4 & 1 & 4 \\ 4 & 4 & 1 \end{pmatrix}$ とすると，A は実対称行列である．A を対角化する実直交行列 U を求めてみよう．A の固有多項式は,

$$\begin{aligned} \Phi_A(t) &= \left| \begin{pmatrix} t-1 & -4 & -4 \\ -4 & t-1 & -4 \\ -4 & -4 & t-1 \end{pmatrix} \right| \\ &= (t-1)^3 + (-64) + (-64) - 16(t-1) - 16(t-1) - 16(t-1) \\ &= t^3 - 3t^2 - 45t - 81 = (t+3)^2(t-9) \end{aligned}$$

となるので，A の固有値は -3(重複度 2), 9 である．

固有値 -3 に対する固有ベクトルを求める．x_1, x_2, x_3 に関する連立一次方程式

$$(-3I_3 - A)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4 & -4 & -4 \\ -4 & -4 & -4 \\ -4 & -4 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を解くと,

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (c_1, c_2 \text{は任意パラメータ})$$

となるので，固有値 -3 の固有ベクトルの組で一次独立なものの 1 つとして $\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ が取

れる．$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$ を $\mathbb{R}^3$ の内積を用いてグラム・シュミットの直交化法により直交化する．まず，

$$\boldsymbol{u}_1' \coloneqq \boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

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

とし，$\boldsymbol{u}_1', \boldsymbol{u}_2'$ の大きさをそれぞれ 1 にすればよく，

$$\boldsymbol{u}_1 \coloneqq \frac{1}{\sqrt{(-1)^2 + 1^2 + 0^2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{u}_2 \coloneqq \frac{1}{\sqrt{(-1/2)^2 + (-1/2)^2 + 1^2}}\begin{pmatrix} -1/2 \\ -1/2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix}$$

が取るべきベクトルの組であることがわかる．

次に固有値 9 の固有ベクトルを求める．x_1, x_2, x_3 に関する連立一次方程式

$$(9I_3 - A_2)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 & -4 & -4 \\ -4 & 8 & -4 \\ -4 & -4 & 8 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を解くと，

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = c\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (c \text{ は任意パラメータ})$$

となるので，固有値 9 に対する固有ベクトルの 1 つとして，$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ が取れる．これに対して，グラム・シュミットの直交化法を適用するというのは大きさを 1 にするということになるので，

$$\boldsymbol{u}_3 \coloneqq \frac{1}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

が取るべきベクトルであることがわかる．以上より，

$$U \coloneqq (\boldsymbol{u}_1\ \boldsymbol{u}_2\ \boldsymbol{u}_3) = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 0 & 2/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

とすると，U は直交行列で $U^{-1}AU = \begin{pmatrix} -3 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{pmatrix}$ となる．

例 3. $A \coloneqq \begin{pmatrix} 0 & -i & i \\ i & 0 & -1 \\ -i & -1 & 0 \end{pmatrix}$ とすると，A はエルミート行列である．A を対角化するユニタリ行列 U を求めてみよう．A の固有多項式は，

$$\begin{aligned} \Phi_A(t) &= \left| \begin{pmatrix} t & i & -i \\ -i & t & 1 \\ i & 1 & t \end{pmatrix} \right| \\ &= t^3 + (-1) + (-1) - t - t - t = (t+1)^2(t-2) \end{aligned}$$

となるので，A の固有値は -1(重複度 2), 2 である．

固有値 -1 に対する固有ベクトルを求める．x_1, x_2, x_3 に関する連立一次方程式

$$(-I_3 - A)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & i & -i \\ -i & -1 & 1 \\ i & 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を解くと，

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = c_1\begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2\begin{pmatrix} -i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (c_1, c_2 \text{は任意パラメータ})$$

となるので，固有値 -1 の固有ベクトルの組で一次独立なものの 1 つとして，$\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ が取れる．$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$ を $\mathbb{C}^3$ のエルミート内積を用いてグラム・シュミットの直交化法により直交化する．まず，

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

とし，$\boldsymbol{u}'_1, \boldsymbol{u}'_2$ のエルミート内積に関する大きさをそれぞれ 1 にすればよく，

$$\boldsymbol{u}_1 \coloneqq \frac{1}{\sqrt{(-i)i + 1^2 + 0^2}}\begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix},$$
$$\boldsymbol{u}_2 \coloneqq \frac{1}{\sqrt{(i/2)(-i/2) + (1/2)^2 + 1^2}}\begin{pmatrix} -i/2 \\ 1/2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix}$$

が取るべきベクトルの組であることがわかる．

次に固有値 2 に対する固有ベクトルを求める．x_1, x_2, x_3 に関する連立一次方程式

$$(2I_3 - A)\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & i & -i \\ -i & 2 & 1 \\ i & 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を解くと，

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = c\begin{pmatrix} i \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (c \text{ は任意パラメータ})$$

となるので，固有値 2 に対する固有ベクトルの 1 つとして，$\begin{pmatrix} i \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$ が取れる．これに対して，グラム・シュミットの直交化法を適用するというのはエルミート内積に関する大きさを 1 にするということになるので，

$$\boldsymbol{u}_3 \coloneqq \frac{1}{\sqrt{(-i)i + (-1)^2 + 1^2}}\begin{pmatrix} i \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

が取るべきベクトルであることがわかる．以上より，

$$U \coloneqq (\boldsymbol{u}_1\ \boldsymbol{u}_2\ \boldsymbol{u}_3) = \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{6} & i/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \\ 0 & 2/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

とすると，U はユニタリ行列で $U^{-1}AU = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$ となる．