

線形代数 II 第 8 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。今回は実対称行列・エルミート行列と呼ばれる特別な行列の対角化について学ぶ。今回学ぶこれらの行列の特徴は簡単に書くと以下のようにまとめられる。

- 全ての固有値は実数である。
- 必ず対角化可能である。
- 全ての固有空間が直交する。

ちなみに、量子力学においては物理量はエルミート行列 (演算子) で表され、その固有値が観測値であるとされる (上に述べたことから特に実数値である)。また、実対称行列の対角化は実二次形式の分類 (標準形の存在) に応用される。後者の話は補足プリントでも解説するので興味のある方はご覧いただきたい*1。

8.1 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必ず対角化され、その固有値は全て実数であるという事実を一般的に証明する。ひとまず本節では一般論を解説し、具体的な計算は次の節で述べることにするので、途中で計算例が見たくなった方は次の節にも適宜飛びながら読んでいただきたい。既に学んだものもあるが、まず初めに用語をまとめて思い出しておこう。

定義 8.1

n 次正方行列 A に対し、

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

とする。これを A の随伴行列 (**adjoint matrix**) と呼ぶ。

例 1. $A = \begin{pmatrix} 1+i & 2i \\ -4 & 3i \end{pmatrix}$ のとき、 $A^* = \begin{pmatrix} 1-i & -4 \\ -2i & -3i \end{pmatrix}$ である。

以下は随伴行列の基本的な性質である。

命題 8.2

n 次正方行列 A に対し、以下が成立する。

- (1) $(A^*)^* = A$.
- (2) A の各成分が実数のとき、 $A^* = {}^tA$.
- (3) 任意の n 次正方行列 B に対し、 $(AB)^* = B^*A^*$.
- (4) 任意の $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{K}^n$ に対し、 $(A\mathbf{v}, \mathbf{w})_{\mathbb{K}} = (\mathbf{v}, A^*\mathbf{w})_{\mathbb{K}}$.

証明. (1), (2), (3) は転置と複素共役の性質から容易に証明できるので省略する。(4) は以下の計算からわ

* e-mail: hoya@shibaura-it.ac.jp

*1 講義が順調に進めば本講義の最後の方の回で講義時間内にも扱うかもしれません。

かる。

$$(Av, w)_{\mathbb{K}} = {}^t(\overline{Av})w = {}^t\overline{v}{}^tAw = {}^t\overline{v}A^*w = (v, A^*w)_{\mathbb{K}}.$$

□

定義 8.3

- (1) $A^*A = I_n$ となるとき, A をユニタリ行列 (**unitary matrix**) 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 (**orthogonal matrix**) 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 (**Hermitian matrix**) という.
- (4) ${}^tA = A$ となるとき, A を対称行列 (**symmetric matrix**) 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. • $A = \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} & -i/\sqrt{6} & i/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{3} \\ 0 & 2/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$ 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.

この講義だけの用語

以下実行列の場合と複素行列の場合を場合分けせずに書くために, 以下のような用語を準備する. これはこの講義だけで用いる用語である.

- \mathbb{K} -ユニタリ行列 := $\begin{cases} \text{ユニタリ行列} & \mathbb{K} = \mathbb{C} \text{ のとき,} \\ \text{実直交行列} & \mathbb{K} = \mathbb{R} \text{ のとき.} \end{cases}$
- \mathbb{K} -エルミート行列 := $\begin{cases} \text{エルミート行列} & \mathbb{K} = \mathbb{C} \text{ のとき,} \\ \text{実対称行列} & \mathbb{K} = \mathbb{R} \text{ のとき.} \end{cases}$

定理 8.4

A を n 次 \mathbb{K} -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 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 $V_A(\lambda), V_A(\lambda')$ とすると, \mathbb{K}^n において $V_A(\lambda)$ と $V_A(\lambda')$ は直交する. すなわち, 任意の $v \in V_A(\lambda), v' \in V_A(\lambda')$ に対して, $(v, v')_{\mathbb{K}} = 0$.

証明.

(1) λ を A の固有値とする. このとき固有値 λ の A の固有ベクトル $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^n$ をとる. なお, A が実対称行列であっても, この時点ではまだ λ が実数であるかどうかはわからないので \mathbb{R}^n 内に固有ベクトルを持つとは限らないため, \mathbb{C}^n から固有ベクトルを選んでいることに注意する. このとき,

$$\begin{aligned}\overline{\lambda}(\mathbf{v}, \mathbf{v})_{\mathbb{C}} &= (\lambda\mathbf{v}, \mathbf{v})_{\mathbb{C}} \\ &= (A\mathbf{v}, \mathbf{v})_{\mathbb{C}} \\ &= (\mathbf{v}, A\mathbf{v})_{\mathbb{C}} \quad (\text{命題 8.2(4) と } A^* = A \text{ より}) \\ &= (\mathbf{v}, \lambda\mathbf{v})_{\mathbb{C}} \\ &= \lambda(\mathbf{v}, \mathbf{v})_{\mathbb{C}}\end{aligned}$$

となる. いま, $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$ より, 命題 7.2 (4) から $(\mathbf{v}, \mathbf{v})_{\mathbb{C}} \neq 0$ なので, 上の式より $\overline{\lambda} = \lambda$, すなわち, λ は実数である.

(2) 任意の $\mathbf{v} \in V_A(\lambda), \mathbf{v}' \in V_A(\lambda')$ に対して,

$$\begin{aligned}\lambda(\mathbf{v}, \mathbf{v}')_{\mathbb{K}} &= (\lambda\mathbf{v}, \mathbf{v}')_{\mathbb{K}} \quad ((1) \text{ より } \lambda \text{ は実数であることに注意}) \\ &= (A\mathbf{v}, \mathbf{v}')_{\mathbb{K}} \\ &= (\mathbf{v}, A\mathbf{v}')_{\mathbb{K}} \quad (\text{命題 8.2(4) と } A^* = A \text{ より}) \\ &= (\mathbf{v}, \lambda'\mathbf{v}')_{\mathbb{K}} \\ &= \lambda'(\mathbf{v}, \mathbf{v}')_{\mathbb{K}}.\end{aligned}$$

よって, $(\lambda - \lambda')(\mathbf{v}, \mathbf{v}')_{\mathbb{K}} = 0$ となるが, 仮定より $\lambda - \lambda' \neq 0$ なので, このとき $(\mathbf{v}, \mathbf{v}')_{\mathbb{K}} = 0$ である. \square

定理 8.4 (2) で \mathbb{K} -エルミート行列の固有空間は互いに直交することが分かったが, さらに固有ベクトルからなる正規直交基底が存在するということが示せる. 命題 7.5 で学んだ正規直交基底と \mathbb{K} -ユニタリ行列との関係をふまえると, これは \mathbb{K} -ユニタリ行列によって \mathbb{K} -エルミート行列が対角化されるということに他ならない (定理 2.3, 系 4.6 も参照せよ). 定理の形で述べておこう. なお, 証明は三角化可能性を示した定理 6.2 の証明と完全に平行している. 両者を比べながら読んでいただきたい.

定理 8.5

A を n 次 \mathbb{K} -エルミート行列とする. このとき, 以下が成立する.

- (1) A は対角化可能である.
- (2) A はある \mathbb{K} -ユニタリ行列 U を用いて対角化できる. つまり, ある n 次 \mathbb{K} -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.

証明. 行列のサイズ n に関する数学的帰納法で (1), (2) を同時に示す. $n = 1$ のとき, $A = (a)$ という形なので (1), (2) は自明である.

次に任意の n 次 \mathbb{K} -エルミート行列に対して (1), (2) が成立すると仮定して, $n + 1$ 次 \mathbb{K} -エルミート行列 A に対する (1), (2) を示す. A の固有方程式 $\Phi_A(t) = 0$ は未知数 t に関する $n + 1$ 次方程式なので, 必ずある複素数解 λ を持つ (代数学の基本定理). このとき λ は A の固有値なので, 定理 8.4 (1) よりこれは実数である. これより, A は \mathbb{K}^{n+1} において*2固有値 λ の固有ベクトルを持つので, そのうち大きさが 1 のものをもって (適当にスカラー倍で大きさを調整する), \mathbf{u}_1 とおく (つまり, $A\mathbf{u}_1 = \lambda\mathbf{u}_1, \|\mathbf{u}_1\| = 1$). このとき定理 7.8 より, ある n 個の \mathbb{K}^{n+1} の元 $\mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_{n+1}$ が存在して, $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_{n+1}\}$ は \mathbb{K}^{n+1} の正規直交基底となる ($\mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_{n+1} \in \mathbb{K}^{n+1}$ は A の固有ベクトルとは限らない). すると, 命題 7.5 より,

$$U_1 = (\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \cdots \ \mathbf{u}_{n+1})$$

は \mathbb{K} -ユニタリ行列である. 行列の積の定義より, $\mathbf{u}_1 = U_1\mathbf{e}_1$ なので, 両辺に左から $U_1^{-1} = U_1^*$ を掛けて

*2 A が実行列で λ が実数のとき, 具体的な解法を考えると $(\lambda I_{n+1} - A)\mathbf{x} = \mathbf{0}$ の解は \mathbb{R}^{n+1} の中で見つけられることがわかる.

$\mathbf{e}_1 = U_1^{-1}\mathbf{u}_1$ となることに注意すると,

$$\begin{aligned} U_1^{-1}AU_1 &= (U_1^{-1}A\mathbf{u}_1 \ U_1^{-1}A\mathbf{u}_2 \ \cdots \ U_1^{-1}A\mathbf{u}_{n+1}) \\ &= (\lambda U_1^{-1}\mathbf{u}_1 \ U_1^{-1}A\mathbf{u}_2 \ \cdots \ U_1^{-1}A\mathbf{u}_{n+1}) \quad (\mathbf{u}_1 \text{は } A \text{ の固有値 } \lambda \text{ の固有ベクトルなので}) \\ &= (\lambda \mathbf{e}_1 \ U_1^{-1}A\mathbf{u}_2 \ \cdots \ U_1^{-1}A\mathbf{u}_{n+1}) \\ &= \left(\begin{array}{c|ccc} \lambda & a_2 & \cdots & a_{n+1} \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{array} \right) \end{aligned}$$

という形になる. ここで, $A^* = A, U_1^* = U_1^{-1}$ なので, 命題 8.2 (1), (3) より,

$$(U_1^{-1}AU_1)^* = U_1^*A^*(U_1^{-1})^* = U_1^*A^*(U_1^*)^* = U_1^{-1}AU_1 \quad (8.1)$$

となるため, $U_1^{-1}AU_1$ も \mathbb{K} -エルミート行列である. これより,

$$\left(\begin{array}{c|ccc} \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ \hline \bar{a}_2 & & & \\ \vdots & & & \\ \bar{a}_{n+1} & & & \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|ccc} \lambda & a_2 & \cdots & a_{n+1} \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{array} \right)$$

となるので (λ は実数なので $\bar{\lambda} = \lambda$ であることに注意),

- $a_2 = \cdots = a_{n+1} = 0$
- $A_2^* = A_2$, すなわち, A_2 は n 次 \mathbb{K} -エルミート行列

となることがわかる. ここで, 帰納法の仮定と定理 8.4 (1) より, ある n 次 \mathbb{K} -ユニタリ行列 U_2 と実数 $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{R}$ が存在して,

$$U_2^{-1}A_2U_2 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$$

となる. いま,

$$U := U_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

とすると, U は $n+1$ 次 \mathbb{K} -ユニタリ行列である*3. これを用いると,

*3 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$ が \mathbb{K} -ユニタリ行列であることと, 一般に \mathbb{K} -ユニタリ行列の積が \mathbb{K} -ユニタリ行列であることからわかる. 後者の

主張は以下のようにわかる: U_1, U_2 を \mathbb{K} -ユニタリ行列とすると, 命題 8.2 (3) を用いて,

$$(U_1U_2)^*U_1U_2 = U_2^*U_1^*U_1U_2 = U_2^*I_nU_2 = U_2^*U_2 = I_n.$$

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

となる。これにより、 $n+1$ 次 \mathbb{K} -エルミート行列 A に対しても (1), (2) の全てが確かめられた。 \square

\mathbb{K} -エルミート行列のスペクトル分解 (やや発展. 興味のある方向け.)

定理 8.5 より、 n 次 \mathbb{K} -エルミート行列 A はある n 次 \mathbb{K} -ユニタリ行列 U によって対角化される。ここで、

$$U = (\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n) \quad U^*AU = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$$

と書くと、

$$\begin{aligned}
A &= U \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} U^* \\
&= (\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {}^t\overline{\mathbf{u}}_1 \\ \vdots \\ {}^t\overline{\mathbf{u}}_n \end{pmatrix} \\
&= (\lambda_1 \mathbf{u}_1 \cdots \lambda_n \mathbf{u}_n) \begin{pmatrix} {}^t\overline{\mathbf{u}}_1 \\ \vdots \\ {}^t\overline{\mathbf{u}}_n \end{pmatrix} = \lambda_1 \mathbf{u}_1 {}^t\overline{\mathbf{u}}_1 + \lambda_2 \mathbf{u}_2 {}^t\overline{\mathbf{u}}_2 + \cdots + \lambda_n \mathbf{u}_n {}^t\overline{\mathbf{u}}_n \tag{8.2}
\end{aligned}$$

となる。ここで、命題 7.5 より $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$ は正規直交基底なので、各 $i = 1, \dots, n$ に対し、

$$P_i := \mathbf{u}_i {}^t\overline{\mathbf{u}}_i$$

とすると、これは命題 7.7 で扱った P_i , すなわち射影を与える行列である。ここで、 A の固有値を μ_1, \dots, μ_k (ただし、 $i \neq j$ のとき $\mu_i \neq \mu_j$) とし、各 μ_i に対して、

$$P_{\mu_i} := \sum_{j: \lambda_j = \mu_i} P_j$$

とすると、(8.2) より、

$$A = \mu_1 P_{\mu_1} + \mu_2 P_{\mu_2} + \cdots + \mu_k P_{\mu_k}$$

と書ける (すなわち, この表示は (8.2) の右辺を係数 λ_i が同じものをひとまとめにして書いたものである). これを \mathbb{K} -エルミート行列 A のスペクトル分解 (spectral decomposition) と言い, 各 P_{μ_i} を固有空間 $V_A(\mu_i)$ への射影子 (projection) と言う. 命題 7.7 より, 以下の性質は容易に導かれる.

- (1) 全ての i に対し, $P_{\mu_i}^2 = P_{\mu_i}$ かつ $P_{\mu_i}^* = P_{\mu_i}$.
- (2) 任意の $i \neq j$ に対し, $P_{\mu_i} P_{\mu_j} = O$.
- (3) 任意の $\mathbf{v} \in \mathbb{K}^n$ に対し, $P_{\mu_i} \mathbf{v} \in V_A(\mu_i)$.
- (4) $I_n = P_{\mu_1} + P_{\mu_2} + \cdots + P_{\mu_k}$.

スペクトル分解は, 「ベクトルに A を掛ける」という操作を, 「 A の固有空間への射影 + それぞれの固有空間において対応する固有値倍」というステップに分けてとらえたような表示と言える.

8.2 \mathbb{K} -エルミート行列の \mathbb{K} -ユニタリ行列を用いた対角化を求める手順

本節では \mathbb{K} -エルミート行列の対角化を与える \mathbb{K} -ユニタリ行列を見つける具体的な方法を解説する. ここでグラム・シュミットの直交化法が活躍する. まず, n 次正方行列 A がある正則行列 P 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 (系 2.4). さらに, 命題 7.5 より, \mathbb{K}^n の n 個のベクトル $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ に関して,

$$U = (\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n) \text{ が } \mathbb{K}\text{-ユニタリ行列} \Leftrightarrow \{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\} \text{ が } \mathbb{K}^n \text{ の正規直交基底}$$

という対応があったことを思い出すと, \mathbb{K} -エルミート行列 A を対角化する \mathbb{K} -ユニタリ行列 U を得るということは, 結局

$$A \text{ の固有ベクトルのみを使って } \mathbb{K}^n \text{ の正規直交基底を作る}$$

ということに他ならない. このためには, 対角化にあたって

各固有空間 $V_A(\lambda_i)$ から選ぶ固有ベクトル $\mathbf{u}_{i_1}, \dots, \mathbf{u}_{i_k} \in V_A(\lambda_i)$ が互いに直交し, 大きさが 1 であるように選べば良い

ということがわかる. 実際, このように選んでおけば, 異なる固有空間から選んだ 2 つの固有ベクトルが直交することは定理 8.4 (2) から自動的に従うためである. 実際にはいきなり直交するベクトルを見つけるのは難しいので,

まず固有空間からいつもの方法で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, 大まかには「初めに準備したベクトルの組の元を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) という事は起こらないということに注意しよう (命題 2.2 参照).

以上をまとめると以下ようになる.

ℝ-エルミート行列 A を対角化する ℝ-ユニタリ行列 U を求める手順

- (1) A の固有方程式 $\Phi_A(t) = 0$ の解を重複度込みで求める. この解を λ_1 (重複度 m_1), \dots , λ_k (重複度 m_k) とする (ただし, $i \neq j$ のとき $\lambda_i \neq \lambda_j$ とする).
- (2) 各 λ_i ($i = 1, \dots, k$) に対して, 連立一次方程式 $(\lambda_i I_n - A)\mathbf{x} = \mathbf{0}$ を解く. このとき, A は対角化可能であるから解の自由度は m_i となるので, この解の全体はある $\mathbf{p}_1^{(i)}, \dots, \mathbf{p}_{m_i}^{(i)} \in \mathbb{K}^n$ を用いて,

$$V_A(\lambda_i) = \{c_1 \mathbf{p}_1^{(i)} + \dots + c_{m_i} \mathbf{p}_{m_i}^{(i)} \mid c_1, \dots, c_{m_i} \in \mathbb{K}\}$$

と書ける. ここで, $\{\mathbf{p}_1^{(i)}, \dots, \mathbf{p}_{m_i}^{(i)}\}$ にグラム・シュミットの直交化法を適用して, 互いに直交する大きさ 1 の元からなるベクトルの組 $\{\mathbf{u}_1^{(i)}, \dots, \mathbf{u}_{m_i}^{(i)}\}$ を得る. こうして得られる $\mathbf{u}_k^{(i)}$ らを並べて n 次正方行列

$$U = \underbrace{(\mathbf{u}_1^{(1)} \dots \mathbf{u}_{m_1}^{(1)})}_{m_1 \text{個}} \underbrace{(\mathbf{u}_1^{(2)} \dots \mathbf{u}_{m_2}^{(2)})}_{m_2 \text{個}} \dots \underbrace{(\mathbf{u}_1^{(k)} \dots \mathbf{u}_{m_k}^{(k)})}_{m_k \text{個}}$$

を作ればこれが求める ℝ-ユニタリ行列 U である. ここで, $m_1 + m_2 + \dots + m_k = n$ であることに注意する. このとき,

$$U^{-1}AU = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & & \ddots & & \dots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_k \end{pmatrix} \quad (\lambda_1 \text{が } m_1 \text{個}, \lambda_2 \text{が } m_2 \text{個}, \dots, \lambda_k \text{が } m_k \text{個})$$

となる.

上の手順は簡単に言えば, 今まで n 次正方行列 A を対角化する正則行列 P を見つけるときに行っていた手順にグラム・シュミットの直交化法を挟み込んだだけのものである. 最後にいくつか例を見てみよう.

例 3. $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ 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, その解の全体は,

$$V_A(2) = \left\{ c \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \mid c \in \mathbb{R} \right\}$$

となる. よって, 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ことは、このベクトルの大きさを1にすることなので、

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

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、その解の全体は、

$$V_A(2 + \sqrt{2}) = \left\{ c \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \mid c \in \mathbb{R} \right\}$$

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ことは、このベクトルの大きさを1にすることなので、

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

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

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

を解くと、その解の全体は、

$$V_A(2 - \sqrt{2}) = \left\{ c \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \mid c \in \mathbb{R} \right\}$$

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ことは、このベクトルの大きさを1にすることなので、

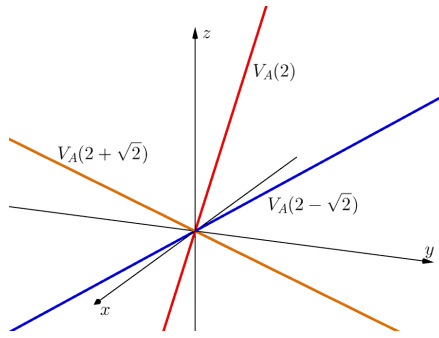
$$\mathbf{u}_3 := \frac{1}{\sqrt{1^2 + (\sqrt{2})^2 + 1^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$$

が取るべきベクトルであることがわかる。以上より、

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

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 \mathbb{R} -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 \mathbb{R} -ユニタリ行列が得られるということになる。

なお、 A のスペクトル分解も計算してみると、

$$\begin{aligned} A &= 2 \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} + (2 + \sqrt{2}) \begin{pmatrix} 1/2 \\ -1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & -1/\sqrt{2} & 1/2 \end{pmatrix} + (2 - \sqrt{2}) \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/\sqrt{2} & 1/2 \end{pmatrix} \\ &= 2 \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} + (2 + \sqrt{2}) \begin{pmatrix} 1/4 & -1/2\sqrt{2} & 1/4 \\ -1/2\sqrt{2} & 1/2 & -1/2\sqrt{2} \\ 1/4 & -1/2\sqrt{2} & 1/4 \end{pmatrix} + (2 - \sqrt{2}) \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2\sqrt{2} & 1/4 \\ 1/2\sqrt{2} & 1/2 & 1/2\sqrt{2} \\ 1/4 & 1/2\sqrt{2} & 1/4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる。

例 4. $A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 4 \\ 4 & 1 & 4 \\ 4 & 4 & 1 \end{pmatrix}$ 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、

$$\begin{aligned} \Phi_A(t) &= \left| \begin{pmatrix} t-1 & -4 & -4 \\ -4 & t-1 & -4 \\ -4 & -4 & t-1 \end{pmatrix} \right| \\ &= \left| \begin{pmatrix} t+3 & -4 & -4 \\ -t-3 & t-1 & -4 \\ 0 & -4 & t-1 \end{pmatrix} \right| \quad (\text{第 1 列に第 2 列の } -1 \text{ 倍を加えた}) \\ &= \left| \begin{pmatrix} t+3 & -4 & -4 \\ 0 & t-5 & -8 \\ 0 & -4 & t-1 \end{pmatrix} \right| \quad (\text{第 2 行に第 1 行を加えた}) \\ &= (t+3) \left| \begin{pmatrix} t-5 & -8 \\ -4 & t-1 \end{pmatrix} \right| \quad (\text{第 1 列目に関して余因子展開}) \\ &= (t+3)((t-5)(t-1) - (-8) \cdot (-4)) = (t+3)(t^2 - 6t - 27) = (t+3)^2(t-9) \end{aligned}$$

となるので、 A の固有値は -3 (重複度 2), 9 (重複度 1) 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、その解の全体は、

$$V_A(-3) = \left\{ c_1 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \mid c_1, c_2 \in \mathbb{R} \right\}$$

となる。これより、2つの元からなる固有値 -3 の固有ベクトルの組で一次独立なもの 1 つとして

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

が取れる. $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ 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,

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

$$\mathbf{u}'_2 := \mathbf{v}_2 - \frac{(\mathbf{u}'_1, \mathbf{v}_2)_{\mathbb{R}}}{(\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_1)_{\mathbb{R}}} \mathbf{u}'_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 \\ -1/2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

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

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

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

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 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

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

を解くと, その解の全体は,

$$V_A(9) = \left\{ c \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \mid c \in \mathbb{R} \right\}$$

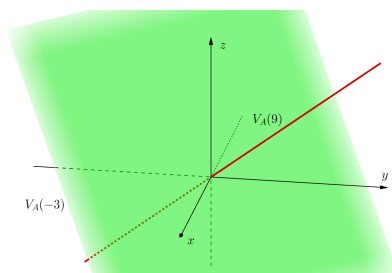
となるので, 固有値 9 に対する固有ベクトルの 1 つとして, $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ が取れる. これに対してグラム・シュミットの直交化法を適用するということは, このベクトルの大きさを 1 にするということになるので,

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

が取るべきベクトルであることがわかる. 以上より,

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

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.



なお, A のスペクトル分解も計算してみると,

$$\begin{aligned} A &= -3 \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} - 3 \begin{pmatrix} -1/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1/\sqrt{6} & -1/\sqrt{6} & 2/\sqrt{6} \end{pmatrix} + 9 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \\ &= -3 \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ -1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - 3 \begin{pmatrix} 1/6 & 1/6 & -1/3 \\ 1/6 & 1/6 & -1/3 \\ -1/3 & -1/3 & 2/3 \end{pmatrix} + 9 \begin{pmatrix} 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{pmatrix} \\ &= -3 \begin{pmatrix} 2/3 & -1/3 & -1/3 \\ -1/3 & 2/3 & -1/3 \\ -1/3 & -1/3 & 2/3 \end{pmatrix} + 9 \begin{pmatrix} 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる.

例 5. $A = \begin{pmatrix} 0 & -i & i \\ i & 0 & -1 \\ -i & -1 & 0 \end{pmatrix}$ 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 (重複度 1) 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, その解の全体は,

$$V_A(-1) = \left\{ c_1 \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} -i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \mid c_1, c_2 \in \mathbb{C} \right\}$$

となる. これより, 2つの元からなる固有値 -1 の固有ベクトルの組で一次独立なもの1つとして,

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

が取れる. $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ 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,

$$\begin{aligned} \mathbf{u}'_1 &:= \mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{u}'_2 &:= \mathbf{v}_2 - \frac{(\mathbf{u}'_1, \mathbf{v}_2)_{\mathbb{C}}}{(\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_1)_{\mathbb{C}}} \mathbf{u}'_1 = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{-1}{2} \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i/2 \\ 1/2 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

とし, $\mathbf{u}'_1, \mathbf{u}'_2$ 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,

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

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、その解の全体は、

$$V_A(2) = \left\{ c \begin{pmatrix} i \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \mid c \in \mathbb{C} \right\}$$

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ことは、個のベクトルの大きさを 1 にするということになるので、

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

が取るべきベクトルであることがわかる。以上より、

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

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。

なお、 A のスペクトル分解も計算してみると、

$$\begin{aligned} A &= - \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} & 2/\sqrt{6} \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} i/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i/\sqrt{3} & -1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \\ &= - \begin{pmatrix} 1/2 & i/2 & 0 \\ -i/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1/6 & -i/6 & -i/3 \\ i/6 & 1/6 & 1/3 \\ i/3 & 1/3 & 2/3 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 1/3 & -i/3 & i/3 \\ i/3 & 1/3 & -1/3 \\ -i/3 & -1/3 & 1/3 \end{pmatrix} \\ &= - \begin{pmatrix} 2/3 & i/3 & -i/3 \\ -i/3 & 2/3 & 1/3 \\ i/3 & 1/3 & 2/3 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 1/3 & -i/3 & i/3 \\ i/3 & 1/3 & -1/3 \\ -i/3 & -1/3 & 1/3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる。