## ユニタリー行列による三角化と対角化

正方行列 $A$ がある三角行列 $T$ と相似なとき, $A$ は**三角化可能**であるという. $T$ の対角成分を $\alpha_1,\dots,\alpha_n$ とすれば固有多項式は $F_T(x)=(x-\alpha_1)\cdots(x-\alpha_n)$ だから $\alpha_1,\dots,\alpha_n$ は $T$ の固有値であり, これと相似な $A$ の固有値でもある **[EV8]**. (前の注意を証明するのは難しいが, 次の定理はそれよりは容易に示せる.)

**定理 6.5(行列の三角化)** $n$ 次正方行列 $A$ は三角化可能, 即ち, ある正則行列 $P$ により $P^{-1}AP=\begin{bmatrix}\alpha_1 & & * \\ & \ddots & \\ & & \alpha_n\end{bmatrix}$ と上三角行列にできる. さらに, $P$ としてユニタリー行列を取ることができる. また, $A$ の固有値 $\alpha_1,\alpha_2,\dots,\alpha_n$ は任意の順序, 特に相異なる固有値ごとに, 重複度と同じ個数だけ並ぶ様にできる.
また, $A$ が実行列で固有値が全て実数のときは $P$ として直交行列を取ることができる.

**証明** $n$ に関する帰納法で示す. $n=1$, $A=[\alpha]$ のときは成立 $(P=[1])$. $(n-1)$ 次行列まで定理が成り立つと仮定. $A$ の固有値を任意に取って $\alpha_1$ とし, $\alpha_1$ に対する固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1$ を正規化して $\boldsymbol{u}_1$ とする. $\boldsymbol{u}_1$ を延長して正規直交基底 $\boldsymbol{u}_1,\dots,\boldsymbol{u}_n$ を作れば (定理 5.6 (シュミットの直交化法)) $U=[\boldsymbol{u}_1\cdots\boldsymbol{u}_n]$ はユニタリー行列 (定理 5.9). このとき,

$$AU=[A\boldsymbol{u}_1\,A\boldsymbol{u}_2\cdots A\boldsymbol{u}_n]=[\alpha_1\boldsymbol{u}_1\,A\boldsymbol{u}_2\cdots A\boldsymbol{u}_n]=[\boldsymbol{u}_1\cdots\boldsymbol{u}_n]\left[\begin{array}{c|c}\alpha_1 & * \\ \hline \mathbf{0} & A_1\end{array}\right]=U\begin{bmatrix}\alpha_1 & * \\ \mathbf{0} & A_1\end{bmatrix}.\ \therefore\ U^{-1}AU=\begin{bmatrix}\alpha_1 & * \\ \mathbf{0} & A_1\end{bmatrix}.$$

帰納法の仮定により $A_1$ には $U_1^{-1}A_1U_1=\begin{bmatrix}\alpha_2 & & * \\ & \ddots & \\ & & \alpha_n\end{bmatrix}$ となる $(n-1)$ 次ユニタリー行列 $U_1$ がある.

$$Q:=\begin{bmatrix}1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U_1\end{bmatrix}\quad とおけば\quad Q^*Q=\begin{bmatrix}1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U_1^*\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U_1^*U_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & E_{n-1}\end{bmatrix}=E_n$$

より $Q$ はユニタリー行列. $P=UQ$ とおけばユニタリー行列の積である $P$ もユニタリー行列であり,

$$P^{-1}AP=(UQ)^{-1}A(UQ)=Q^{-1}(U^{-1}AU)Q=\begin{bmatrix}1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U_1^{-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1 & * \\ \mathbf{0} & A_1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha_1 & * \\ \mathbf{0} & U_1^{-1}A_1U_1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha_1 & & & * \\ & \alpha_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \alpha_n\end{bmatrix}$$

より定理が示された. $A$ が実行列のとき, $\alpha_1$ が実数ならば, $(A-\alpha_1E)\boldsymbol{x}=\mathbf{0}$ の解である $\boldsymbol{p}_1$, $\boldsymbol{u}_1$ も実ベクトルに取れるので, $U$ は実ユニタリー行列＝直交行列とできる. $\alpha_2,\dots,\alpha_n$ も実数なら, 帰納的に $Q,P$ も直交行列に取れる.

**[ユニタリー行列による対角化]** 内積空間では基底は正規直交基底を用いるが, その間の変換行列はユニタリー行列になる. そこで正方行列 $A$ がユニタリー行列で対角化される為の条件を考える. $A$ があるユニタリー行列

$$U=[\boldsymbol{u}_1\,\boldsymbol{u}_2\cdots\boldsymbol{u}_n]\quad により\qquad U^{-1}AU=\begin{bmatrix}\alpha_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \alpha_n\end{bmatrix}=:D$$

と対角化されたとする. $U$ はユニタリー行列なので $U^*U=E$ より $U^{-1}=U^*$ だから,

$$D^*=(U^{-1}AU)^*=(U^*AU)^*=U^*A^*U^{**}=U^*A^*U=U^{-1}A^*U.$$

従って, 左右より $U,U^{-1}$ を掛けて $A^*=UD^*U^{-1}=UD^*U^*$. $D$, $D^*$ は対角行列なので可換, 即ち,

$$DD^*=\begin{bmatrix}\alpha_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \alpha_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\overline{\alpha_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \overline{\alpha_n}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha_1\overline{\alpha_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \alpha_n\overline{\alpha_n}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\overline{\alpha_1}\alpha_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \overline{\alpha_n}\alpha_n\end{bmatrix}=D^*D$$

$A=UDU^{-1}=UDU^*$ より

$$AA^*=(UDU^*)(UD^*U^*)=UD(U^*U)D^*U^*=UD^*DU^*=(UD^*U^*)(UDU^*)=A^*A.$$

即ち, $\qquad A$ がユニタリー行列で対角化できる $\Longrightarrow AA^*=A^*A$.

$AA^*=A^*A$ のとき, $A$ を **正規行列** という. 実はこの逆が成り立つことが示せる.

**定理 6.8 (正規行列の対角化)** 正方行列 $A$ について次は同値:

(1) $A$ は正規行列. $(A^*A=AA^*.)$ (2) $A$ はユニタリー行列で対角化される.
(3) $A$ をユニタリー行列 $U$ で三角化すると対角行列になっている.

**証明** (3)⇒(2) は明らか. (2)⇒(1) はすでに示した. (1)⇒(3) を示す.
$AA^*=A^*A$ とし, $A$ を三角化するユニタリー行列 $U$ をとる (定理 6.5). このとき, 三角行列 $B=U^{-1}AU$ は対角行列, を示す.
$B=U^{-1}AU=\begin{bmatrix}\alpha_1 & & b_{ij} \\ & \ddots & \\ O & & \alpha_n\end{bmatrix}$ とすると, $B=U^{-1}AU=U^*AU$, $B^*=U^*A^*U$ より, $BB^*=U^*AA^*U=U^*A^*AU=B^*B$.
$B^*B=BB^*$ を成分で表すと,

$$B^*B=\begin{bmatrix}\overline{\alpha_1} & & & \\ \overline{b_{12}} & \overline{\alpha_2} & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ \overline{b_{1n}} & \cdots & \overline{b_{n-1\,n}} & \overline{\alpha_n}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1 & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ & \alpha_2 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & b_{n-1\,n} \\ & & & \alpha_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha_1 & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ & \alpha_2 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & b_{n-1\,n} \\ & & & \alpha_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\overline{\alpha_1} & & & \\ \overline{b_{12}} & \overline{\alpha_2} & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ \overline{b_{1n}} & \cdots & \overline{b_{n-1\,n}} & \overline{\alpha_n}\end{bmatrix}=BB^*$$

両辺の対角成分 $(B^*B)_{ii}$, $(BB^*)_{ii}$ を $(1,1)$ 成分から順に比較する.
$i=1$ のとき: 左辺 $=(B^*B)_{11}=\overline{\alpha_1}\alpha_1=|\alpha_1|^2$, 右辺 $=(BB^*)_{11}=\overline{\alpha_1}\alpha_1+\overline{b_{12}}b_{12}+\cdots+\overline{b_{1n}}b_{1n}=|\alpha_1|^2+\sum_{j=2}^n|b_{1j}|^2$

$\Rightarrow \sum_{j=2}^n |b_{1j}|^2=0.\ \therefore\ |b_{1j}|^2=0\ (j=2,\dots,n)\ \therefore\ b_{12}=b_{13}=\cdots=b_{1n}=0.$

$i=2$ のとき: $b_{12}=0$ より　左辺$=(B^*B)_{22}=|b_{12}|^2+|\alpha_2|^2=|\alpha_2|^2$,　右辺$=(BB^*)_{22}=|\alpha_2|^2+\sum_{j=3}^n|b_{2j}|^2$

$\Rightarrow \sum_{j=3}^n |b_{2j}|^2=0,\ \therefore\ |b_{2j}|^2=0\ \ (j=3,\dots,n)\ \therefore\ b_{23}=b_{24}=\cdots=b_{2n}=0.$

以下帰納的に $k<i$ で $b_{kj}=0\ (k<j\leqq n)$ と仮定すると, $j=i$ のとき $b_{ki}=0\ (k<i)$ より

左辺$=(B^*B)_{ii}=\sum_{k<i}|b_{ki}|^2+|\alpha_i|^2=|\alpha_i|^2$.　右辺 $=|\alpha_i|^2+\sum_{j>i}|b_{ij}|^2$.

$\Rightarrow \sum_{j>i}|b_{ij}|^2=0.\qquad \therefore\ |b_{ij}|^2=0\ \ (j=i{+}1,\dots,n)\quad \therefore\ b_{i\,i+1}=b_{i\,i+2}=\cdots=b_{i\,n}=0.$

よって帰納的に $b_{ij}=0\ (i<j)$ が示された. $b_{ij}=0\ (i>j)$ だったので $b_{ij}=0\ (i\neq j)$ より $B$ は対角行列.

**[正規行列の例と性質]** 次の行列は ( ) 内に示すその定義により 正規行列 $(AA^*{=}A^*A)$ であることが分かる.
(1) エルミート行列 $H\ (H^*{=}H)$.　(2) ユニタリー行列 $U\ (U^*U{=}E{=}UU^*)$.　(3) 歪エルミート行列 $S\ (S^*{=}-S)$.
これらの実行列版である実対称行列, 直交行列, 実交代行列も正規行列であり, これらの定数倍も正規行列になる.
従って, 前定理 6.8 によりこれら全てはユニタリー行列で対角化できる.

以下, 内積 $(\cdot,\cdot)$ は $\mathbb{C}^n$ の標準内積とする.

**定理 6.9 (正規行列の固有値と固有ベクトル)**

(1) 正規行列 $A$ の固有値 $\alpha$ と固有ベクトル $\boldsymbol{p}\ (A\boldsymbol{p}=\alpha\boldsymbol{p})$ について　$A^*\boldsymbol{p}=\bar{\alpha}\boldsymbol{p}$.

(2) 正規行列 $A$ の相異なる固有値 $\beta_1,\beta_2$ に対する固有ベクトル $\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2$ は直交する.

**証明** (1): $AA^*=A^*A$ より $(A^*\boldsymbol{p},A^*\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{p},AA^*\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{p},A^*A\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{p},A^*\alpha\boldsymbol{p})=\alpha(\boldsymbol{p},A^*\boldsymbol{p})$ に注意すると,

$$\|A^*\boldsymbol{p}-\bar{\alpha}\boldsymbol{p}\|^2=(A^*\boldsymbol{p},A^*\boldsymbol{p})-(\bar{\alpha}\boldsymbol{p},A^*\boldsymbol{p})-(A^*\boldsymbol{p},\bar{\alpha}\boldsymbol{p})+(\bar{\alpha}\boldsymbol{p},\bar{\alpha}\boldsymbol{p})$$
$$=\alpha(\boldsymbol{p},A^*\boldsymbol{p})-\alpha(\boldsymbol{p},A^*\boldsymbol{p})-\bar{\alpha}(\boldsymbol{p},A\boldsymbol{p})+\alpha\bar{\alpha}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=0.\quad \therefore\ A^*\boldsymbol{p}=\bar{\alpha}\boldsymbol{p}.$$

(2): (定理 6,8 より出るが, 別証明を与える.)　$\beta_1(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2)=(\bar{\beta}_1\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2)=(A^*\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2)=(\boldsymbol{p}_1,A\boldsymbol{p}_2)=(\boldsymbol{p}_1,\beta_2\boldsymbol{p}_2)=\beta_2(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2)$.
$\beta_1\neq\beta_2$ より $(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2)=0$. よって $\boldsymbol{p}_1$ と $\boldsymbol{p}_2$ は直交する.

**定理 6.10 (エルミート行列, ユニタリー行列の固有値)** 次の正規行列の固有値について次が成り立つ:

(1) エルミート行列 $H$ の固有値 $\alpha$ は全て実数. $(\alpha\in\mathbb{R}.)$

(2) ユニタリー行列 $U$ の固有値 $\alpha$ は全て絶対値 1 の複素数. $(|\alpha|=1.)$

(3) 歪エルミート行列 $H$ の固有値 $\alpha$ は全て純虚数, 又は 0. $(\alpha\in i\mathbb{R}.)$

**証明** (1): $H\boldsymbol{p}=\alpha\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{p}\neq\boldsymbol{0}$ とすると $\bar{\alpha}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=(\alpha\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=(H\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{p},H^*\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{p},H\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{p},\alpha\boldsymbol{p})=\alpha(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})$.
$(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=\|\boldsymbol{p}\|^2\neq0$ より $\bar{\alpha}=\alpha$. よって $\alpha$ は実数.

(2): $U\boldsymbol{p}=\alpha\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{p}\neq\boldsymbol{0}$ とすると $|\alpha|^2(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=\alpha\bar{\alpha}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=(\alpha\boldsymbol{p},\alpha\boldsymbol{p})=(U\boldsymbol{p},U\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})$. $(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})\neq0$ より $|\alpha|^2=1$.

(3): $S\boldsymbol{p}=\alpha\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{p}\neq\boldsymbol{0}$ とすると $\bar{\alpha}(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=(\alpha\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=(S\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{p},S^*\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{p},-S\boldsymbol{p})=-(\boldsymbol{p},\alpha\boldsymbol{p})=-\alpha(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})$.
$(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p})=\|\boldsymbol{p}\|^2\neq0$ より $\bar{\alpha}=-\alpha$. よって $\alpha$ は純虚数又は 0.

**系 6.11** 実対称行列の固有値は全て実数.

**定理 6.12 (実対称行列の直交行列による対角化)** 実正方行列 $A$ について次は同値:

(1) $A$ は実対称行列.　$\Longleftrightarrow$　(2) $A$ は直交行列により対角化できる.

**証明** (1)⇒(2): 実対称行列はエルミート行列だからその固有値はすべて実数である. 従って, 直交行列により三角化出来る (定理 6.5). 実対称行列は正規行列で, 直交行列はユニタリー行列だから三角化すると対角化されている (定理 6.8).
(2)⇒(1): $A$ が直交行列 $U$ により $U^{-1}AU=D$ が対角行列になったとすると $A=UDU^{-1}=UD\,{}^tU$, ${}^tD=D$ より

$${}^tA={}^t(UD{}^tU)={}^{tt}U\,{}^tD\,{}^tU=UD{}^tU=A.$$

**注** 内積空間 $V$ 上の一次変換 $f:V\to V$ は正規直交基底に関する表現行列がユニタリー行列, エルミート行列のときユニタリー変換, エルミート変換というが, 正規直交基底をうまくとるとそれらの表現行列は対角行列になる.

**[三角化の応用, 行列の多項式]** 一般に, $x$ の多項式 $f(x)=a_mx^m+\cdots+a_1x+a_0$ と正方行列 $A$ に対し, ($x$ に $A$ を代入した) 正方行列 $f(A)$ を, $f(A)=a_mA^m+\cdots+a_1A+a_0E$ と定める. $A$ を正則行列 $P$ により三角化して $T=P^{-1}AP$ (上三角行列) とすると, $T^2=P^{-1}APP^{-1}AP=P^{-1}A^2P,\dots,\ T^k=P^{-1}A^kP$ より, $f(T)=a_mT^m+\cdots+a_0E=P^{-1}(a_mA^m+\cdots+a_0E)P=P^{-1}f(A)P,\ \ f(A)=Pf(T)P^{-1}$. 上三角行列の和, スカラー倍, 積はまた上三角行列で, その $(i,i)$ 成分も $T$ の $(i,i)$ 成分の和, スカラー倍, 積になるので, 次が成り立つ.

**定理 6.6 (フロベニウス (Frobenius) の定理)** $f(x)$ を $x$ の多項式, $n$ 次正方行列 $A$ の固有値を $\alpha_1,\dots,\alpha_n$ とするとき, 行列 $f(A)$ の固有値は $f(\alpha_1),\dots,f(\alpha_n)$ である.

**定理 6.7 (ケーリー-ハミルトン (Cayley-Hamilton) の定理)** 正方行列 $A$ の固有多項式 $F_A(x)$ に対し, $F_A(A)=O$.
($\because$) $F_A(T)=F_T(T)=(T-\alpha_1E)\cdots(T-\alpha_nE)$ の右辺第 $i$ 項は $(i,i)$ 成分が 0 の上三角行列で, 右辺の積を順に計算すると $k$ 項目迄の積は $k$ 列目迄 $\boldsymbol{0}$ になり最後に $O$ になる.