平成２１年９月１９日　補足　八起数学塾

正規行列の対角化

以下複素数体上の行列について考える。

1　記号等約束事

以下 $\mathbb{C}$ で複素数体を表す。また、$\mathbb{C}^n$ を普通のやり方で $\mathbb{C}$ 上の複素計量線型空間とみなし、$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^n$ に対して $(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y})$ でそのエルミート積を表す。つまり $\boldsymbol{x} = (x_i), \boldsymbol{y} = (y_i)$ とする時 $(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y}) = \sum_i x_i \overline{y_i}$（但し $\overline{y_i}$ は y_i の共役複素数を表す。以下同様）である。
$A = (a_{ij})$ を行列とする時、${}^tA$ で転置行列を、$\bar{A}$ でその成分を共役複素数で置き換えた行列を、A^* で随伴行列を表す。つまり ${}^tA = (a_{ji}), \quad \bar{A} = (\overline{a_{ij}}), \quad A^* = {}^t\bar{A}$ である。
$\mathbb{C}^n$ の元は列ベクトルとする。また n 項列ベクトルは $(n,1)$ 型の行列と同一視する。同様に n 項行ベクトルは $(1,n)$ 型の行列と同一視する。$(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y}) = {}^t\boldsymbol{x}\bar{\boldsymbol{y}}$ に注意せよ（右辺は行列の積）。

$$(\boldsymbol{x}|A\boldsymbol{y}) = {}^t\boldsymbol{x}(\overline{A\boldsymbol{y}}) = ({}^t\boldsymbol{x}\bar{A})\bar{\boldsymbol{y}} = {}^t({}^t\bar{A}\boldsymbol{x})\bar{\boldsymbol{y}} = {}^t(A^*\boldsymbol{x})\bar{\boldsymbol{y}} = (A^*\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y})$$

が成り立つ。この他 $(A^*)^* = A, \quad (AB)^* = B^*A^*$ 等は明らかである。
また、$\oplus$ で直和を表す。

2　ユニタリ行列、エルミート行列、正規行列

A を n 次正方行列とする。
（１）ユニタリ行列
$A^* = A^{-1}$ が成り立つ時 A はユニタリ行列であると言う。
（２）エルミート行列
$A^* = A$ が成り立つ時 A はエルミート行列であると言う。
（３）正規行列
$AA^* = A^*A$ が成り立つ時 A は正規行列であると言う。
明らかにユニタリ行列とエルミート行列は正規行列である。
また次のことが成り立つ。

$$< \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n > \text{が } \mathbb{C}^n \text{の正規直交基底} \Longleftrightarrow (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n) \text{ はユニタリ行列}$$

実際

$$(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n)^*(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n) = \begin{pmatrix} {}^t\overline{\boldsymbol{e}_1} \\ {}^t\overline{\boldsymbol{e}_2} \\ \vdots \\ {}^t\overline{\boldsymbol{e}_n} \end{pmatrix} (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n) = ({}^t\overline{\boldsymbol{e}_i}\boldsymbol{e}_j) = (\overline{{}^t\boldsymbol{e}_i\overline{\boldsymbol{e}_j}}) = (\overline{(\boldsymbol{e}_i|\boldsymbol{e}_j)})$$

であるから δ_{ij} をクロネッカーのデルタとすると

$$
\begin{aligned}
& < \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n > \text{が正規直交基底} && \\
& \Longleftrightarrow (\boldsymbol{e}_i | \boldsymbol{e}_i) = \delta_{ij} && \text{(正規直交性による)} \\
& \Longleftrightarrow \overline{(\boldsymbol{e_i} | \boldsymbol{e}_i)} = \delta_{ij} && \text{(}\delta_{ij}\text{は実数)} \\
& \Longleftrightarrow (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n)^* = (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n)^{-1} && \text{(上記の式から)} \\
& \Longleftrightarrow (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n) \text{ はユニタリ行列} && \text{(ユニタリ行列の定義)}
\end{aligned}
$$

だからである。[*1]

3 正規行列の対角化

定理

行列 A はユニタリ行列によって対角化可能 $\Longleftrightarrow$ A は正規行列

証明

$(\Longrightarrow)$

A がユニタリ行列 U で対角化できたとする。$U^* = U^{-1}$ に注意せよ。また対角行列は明らかに正規であるから

$$(U^*AU)(U^*AU)^* = (U^*AU)^*(U^*AU)$$

ここで

$$
\begin{aligned}
\text{左辺} &= (U^*AU)(U^*A^*U) = U^*AA^*U \\
\text{右辺} &= (U^*A^*U)(U^*AU) = U^*A^*AU
\end{aligned}
$$

結局

$$U^*AA^*U = U^*A^*AU$$

この式の両辺に左から U を右から U^* を乗じれば

$$AA^* = A^*A$$

が分る。

$(\Longleftarrow)$

A を正規行列とすれば定義によって A と A^* は交換可能である。よって次のような部分空間の列が存在する。

$$\mathbf{0} \subsetneqq W_1 \subsetneqq W_2 \subsetneqq \cdots \subsetneqq W_{n-1} \subsetneqq W_n = \mathbb{C}^n$$

ここで $W_k (k = 1, 2, \ldots, n)$ は A 不変かつ A^* 不変である。また $\mathrm{dim} W_k = k$ であることに注意。

まず $W_1 \neq \mathbf{0}$ だから、W_1 の零でないベクトルを一つ取って固定しそれを $\boldsymbol{a}_1$ とする。そして

$$\boldsymbol{e}_1 = \frac{\boldsymbol{a}_1}{\|\boldsymbol{a}_1\|}$$

[*1] 一般的には積が非可換である場合に B が A の乗法逆元であることをいうには、AB と BA の双方が乗法単位元になることを示す必要がある。しかし行列の場合はどちらか一方が単位行列になることをいえば十分である。実際 $AB = E$ ならば B は A の逆行列である。なぜなら $AB = E$ とすれば $(\mathrm{det}A)(\mathrm{det}B) = \mathrm{det}(AB) = \mathrm{det}E = 1$ より $\mathrm{det}A \neq 0$ よって A は正則である。従って $AB = E$ の両辺に左から A^{-1} を乗じれば $B = A^{-1}$ を得る。同様にして $BA = E$ ならば B は A の逆行列である。

と置く。以下 $1 \leqq k \leqq n-1$ に対して $\boldsymbol{a}_{k+1} \in W_{k+1} - W_k$ を取って

$$\boldsymbol{b}_{k+1} = \boldsymbol{a}_{k+1} - \sum_{i=1}^{k} (\boldsymbol{a}_{k+1} | \boldsymbol{e}_i) \boldsymbol{e}_i$$
$$\boldsymbol{e}_{k+1} = \frac{\boldsymbol{b}_{k+1}}{\|\boldsymbol{b}_{k+1}\|}$$

と置く（$\boldsymbol{e}_i \in W_k$ $(1 \leqq i \leqq k)$ かつ $\boldsymbol{a}_{k+1} \notin W_k$ だから $\boldsymbol{b}_{k+1} \neq \boldsymbol{0}$ に注意)。
$1 \leqq j \leqq k$ に対して

$$\begin{aligned}
&(\boldsymbol{b}_{k+1} | \boldsymbol{e}_j) \\
&= (\boldsymbol{a}_{k+1} | \boldsymbol{e}_j) - \sum_{i=1}^{k} ((\boldsymbol{a}_{k+1} | \boldsymbol{e}_i) \boldsymbol{e}_i | \boldsymbol{e}_j) \\
&= (\boldsymbol{a}_{k+1} | \boldsymbol{e}_j) - \sum_{i=1}^{k} (\boldsymbol{a}_{k+1} | \boldsymbol{e}_i)(\boldsymbol{e}_i | \boldsymbol{e}_j) \\
&= (\boldsymbol{a}_{k+1} | \boldsymbol{e}_j) - \sum_{i=1}^{k} (\boldsymbol{a}_{k+1} | \boldsymbol{e}_i) \delta_{ij} \\
&= (\boldsymbol{a}_{k+1} | \boldsymbol{e}_j) - (\boldsymbol{a}_{k+1} | \boldsymbol{e}_j) \\
&= \boldsymbol{0}
\end{aligned}$$

以上の作り方と $\mathrm{dim} W_k = k$ に注意すれば、$1 \leqq k \leqq n$ について $< \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_k >$ が W_k の正規直交基底であることが分る（シュミットの直交化法)。$U = (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n)$ と置くと、U^*AU と U^*A^*U は共に上三角行列である。一方 $(U^*A^*U)^* = U^*AU$ なので U^*AU は下三角行列でもあるから、U^*AU は対角行列である。なお以上のような正規直交基底の存在については、別資料「三角行列」の最後の注も参考にすると良い。

系 1
正規行列 A に関して以下が成り立つ

1. A がユニタリ行列 $\Longleftrightarrow$ A の固有値の絶対値がすべて 1
2. A がエルミート行列 $\Longleftrightarrow$ A の固有値はすべて実数

証明

($\Longrightarrow$) については資料「随伴変換」４節参照。($\Longleftarrow$) のみ示す。
1. A は適当なユニタリ行列 U で対角化できる。対角行列 U^*AU の (i,i) 成分 α_i は A の固有値だから $|\alpha_i| = 1$ である。また $(U^*AU)^* = U^*A^*U$ も対角行列であり、その (i,i) 成分は $\overline{\alpha_i}$（α_i の共役複素数）である。$\alpha_i \overline{\alpha_i} = |\alpha_i| = 1$ より $E = (U^*AU)(U^*A^*U) = U^*AA^*U$ だから $AA^* = UU^* = E$。よって A はユニタリ行列である。
2. A は適当なユニタリ行列 U で対角化できる。対角行列 U^*AU の (i,i) 成分 α_i は A の固有値だから実数である。よって $U^*AU = (U^*AU)^* = U^*A^*U$ より $A = A^*$ なので A はエルミート行列である。

系 2
A が正規行列であれば、$\mathbb{C}^n$ の正規直交基底 $<\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n>$ で、各 $\boldsymbol{e}_i$ が A の固有ベクトルであるようなものが存在する。

証明

A は適当なユニタリ行列 $U = (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n)$ で対角化できる。この U^*AU が対角行列であるということは、A を $\mathbb{C}^n$ の線型変換と考えたとき、それを基底 $<\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n>$ で行列表現したものが対角行列になるということである。従ってその対角行列の (i, i) 成分を α_i とすれば、$\boldsymbol{e}_i$ を A で変換した結果が $\alpha_i \boldsymbol{e}_i$、つまり $A\boldsymbol{e}_i = \alpha_i \boldsymbol{e}_i$ が成り立つ。いうまでもなく $\boldsymbol{e}_i \neq \boldsymbol{0}$ だから、$\boldsymbol{e}_i$ は固有値 α_i に関する A の固有ベクトルである。

なお、以上の議論が分りにくければ、$U^*AU = \begin{pmatrix} \ddots & & \text{\Huge 0} \\ & \alpha_i & \\ \text{\Huge 0} & & \ddots \end{pmatrix}$ より $AU = U \begin{pmatrix} \ddots & & \text{\Huge 0} \\ & \alpha_i & \\ \text{\Huge 0} & & \ddots \end{pmatrix}$ に注意して

$A(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n) = (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n) \begin{pmatrix} \ddots & & \text{\Huge 0} \\ & \alpha_i & \\ \text{\Huge 0} & & \ddots \end{pmatrix}$ を具体的に計算して $A\boldsymbol{e}_i = \alpha_i \boldsymbol{e}_i$ としてもよい。

4　正規行列の固有空間

定理
正規行列の異なる固有値に対する固有空間は直交する。

証明

A を正規行列とし、その異なる固有値のすべてを $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m$ とし、それぞれに対する固有空間を $W_1, W_2, \ldots, W_m$ とする。前節の系 2 で述べたように、$\mathbb{C}^n$ の正規直交基底 $<\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n>$ で、各 $\boldsymbol{e}_i$ が A の固有ベクトルになっているものが存在する。各 $\boldsymbol{e}_i$ が W_j のどれかに含まれていることに注意せよ。W_j に含まれるすべての $\boldsymbol{e}_i$ たちが張る W_j の線型部分空間を W'_j と置く（もし W_j がどの $\boldsymbol{e}_i$ も含まなければ $W'_j = \{\boldsymbol{0}\}$ と置く[*2]）。$W'_1 \oplus W'_2 \oplus \ldots \oplus W'_m \subset W_1 \oplus W_2 \oplus \ldots \oplus W_m \subset \mathbb{C}^n$ であるが、$<\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n>$ は基底だから $W'_1 \oplus W'_2 \oplus \ldots \oplus W'_m = \mathbb{C}^n$ である。よってすべての $1 \leqq j \leqq m$ について $W_j = W'_j$ であり、$<\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_n>$ が正規**直交**基底であることから、$j_1 \neq j_2$ ならば $W'_{j_1} \perp W'_{j_2}$ よって $W_{j_1} \perp W_{j_2}$ である。
以上をまとめると A を正規行列とし、その固有空間のすべてを $W_1, W_2, \ldots, W_m$（重複はないものとする）とすれば、$W_1 \oplus W_2 \oplus \ldots \oplus W_m = \mathbb{C}^n$ かつ $i \neq j$ ならば $W_i \perp W_j$ となることが分った。

注意：エルミート行列の異なる固有値に対する固有空間が直交することは、もっと容易に示せる（資料「固有空間について」3 節参照）。

[*2] 結果的にそのようなことはあり得ないことが分るのではあるが...