直交行列 A を対角化するユニタリ行列を求めよ。

$$A = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \tag{1}$$

…………………………………………………………………………………………

次の手順で求めた。

1. 固有値を求める
2. 固有ベクトルを求める
3. 固有空間の次元を確認し、対角化可能か判断する
4. それぞれの固有空間の正規直交基底をとる (シュミットの直交化法)
5. 基底を並べて行列 (ユニタリ行列) をつくる

ここでの内積は複素数における内積 (複素内積、エルミート内積) である。つまり、$x_i, y_i \in \mathbb{C}$ に対し、$\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ と $\boldsymbol{y} = (y_1, \ldots, y_n)$ の内積を $\sum_{i=1}^{\infty} x_i \overline{y_i}$ とする。($\overline{y_i}$ は y_i の共役複素数)

ここでは $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ の内積を $(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{y})$ と書いた。

…………………………………………………………………………………………

固有方程式 $|A - \lambda E| = 0$ を計算し固有値 λ を求める。

$$|A - \lambda E| = 0 \tag{2}$$

$$(\lambda^2 - \lambda + 1)^2 = 0 \tag{3}$$

$$\lambda = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{2} i \tag{4}$$

固有値は $\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} i = \exp\left(\frac{\pi}{3} i\right)$ と $\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} i = \exp\left(-\frac{\pi}{3} i\right)$ で、それぞれ重複度は 2 である。

固有値 $\exp\left(\frac{\pi}{3} i\right)$ の固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ を求める。

$$\left(A - \exp\left(\frac{\pi}{3} i\right) E\right) \boldsymbol{x} = 0 \tag{5}$$

$$\boldsymbol{x} = k_1 \boldsymbol{v_1} + k_2 \boldsymbol{v_2} \tag{6}$$

$$\boldsymbol{v_1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \exp\left(-\frac{2\pi}{3} i\right) \\ \exp\left(-\frac{\pi}{3} i\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v_2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \exp\left(\frac{2\pi}{3} i\right) \\ \exp\left(-\frac{2\pi}{3} i\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \tag{7}$$

同様に固有値 $\exp\left(-\frac{\pi}{3} i\right)$ の固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ を求める。

$$\left(A - \exp\left(-\frac{\pi}{3} i\right) E\right) \boldsymbol{x} = 0 \tag{8}$$

$$\boldsymbol{x} = k_3 \boldsymbol{v_3} + k_4 \boldsymbol{v_4} \tag{9}$$

$$\boldsymbol{v_3} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \exp\left(\frac{2\pi}{3} i\right) \\ \exp\left(\frac{\pi}{3} i\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v_4} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \exp\left(-\frac{2\pi}{3} i\right) \\ \exp\left(\frac{2\pi}{3} i\right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \tag{10}$$

$P=(\boldsymbol{v_1},\boldsymbol{v_2},\boldsymbol{v_3},\boldsymbol{v_4})$ と置くと $P^{-1}AP$ で対角化可能である。

2 つの固有空間は直交しているが、$\boldsymbol{v_1},\boldsymbol{v_2}$ の組と $\boldsymbol{v_3},\boldsymbol{v_4}$ の組は直交していない。それぞれの組にシュミットの直交化法を用いて基底を取り直す。内積は複素数におけるエルミート内積であり、内積 $(\boldsymbol{v_1}\cdot\boldsymbol{v_2})$ は $\boldsymbol{v_1}$ と $\overline{\boldsymbol{v_2}}$(成分が共役複素数) の成分ごとの積で求められる。

$\boldsymbol{v_1}$ の大きさは $\sqrt{(\boldsymbol{v_1}\cdot\boldsymbol{v_1})}=\sqrt{3}$ であるので、基底 $\boldsymbol{e_1}$ は $\boldsymbol{e_1}=\frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{v_1}$ である。$\boldsymbol{e_1}$ を利用し $\boldsymbol{v_2}$ を正規直交化する。

$$(\boldsymbol{v_2}\cdot\boldsymbol{e_1})=-i \tag{11}$$
$$\boldsymbol{v_2'}=\boldsymbol{v_2}-(\boldsymbol{v_2}\cdot\boldsymbol{e_1})\boldsymbol{e_1} \tag{12}$$
$$\sqrt{(\boldsymbol{v_2'}\cdot\boldsymbol{v_2'})}=\sqrt{2} \tag{13}$$
$$\boldsymbol{e_2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{v_2'} \tag{14}$$

正規直交基底として次のような $\boldsymbol{e_1},\boldsymbol{e_2}$ を得る。

$$\boldsymbol{e_1}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}\\0\\\frac{1}{\sqrt{3}}\exp\left(\frac{-2\pi}{3}i\right)\\\frac{1}{\sqrt{3}}\exp\left(\frac{-\pi}{3}i\right)\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{e_2}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}i\\\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{6}}i\\-\frac{1}{\sqrt{6}}\end{pmatrix} \tag{15}$$

同様に $\boldsymbol{v_3},\boldsymbol{v_4}$ を正規直交基底 $\boldsymbol{e_3},\boldsymbol{e_4}$ を求める。$\sqrt{(\boldsymbol{v_3}\cdot\boldsymbol{v_3})}=\sqrt{3}$ より $\boldsymbol{e_3}=\frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{v_3}$ とおく。

$$(\boldsymbol{v_4}\cdot\boldsymbol{e_3})=i \tag{16}$$
$$\boldsymbol{v_4'}=\boldsymbol{v_4}-(\boldsymbol{v_4}\cdot\boldsymbol{e_3})\boldsymbol{e_3} \tag{17}$$
$$\sqrt{(\boldsymbol{v_4'}\cdot\boldsymbol{v_4'})}=\sqrt{2} \tag{18}$$
$$\boldsymbol{e_4}=\frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{v_4'} \tag{19}$$

これより t 次のような $\boldsymbol{e_3},\boldsymbol{e_4}$ を得る。

$$\boldsymbol{e_3}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}\\0\\\frac{1}{\sqrt{3}}\exp\left(\frac{2\pi}{3}i\right)\\\frac{1}{\sqrt{3}}\exp\left(\frac{\pi}{3}i\right)\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{e_4}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{6}}i\\\frac{1}{\sqrt{2}}\\-\frac{1}{\sqrt{6}}i\\\frac{1}{\sqrt{6}}\end{pmatrix} \tag{20}$$

$e_1,\ldots,e_4$ を並べた行列 U がユニタリ行列となる。

$$U=(\boldsymbol{e_1},\boldsymbol{e_2},\boldsymbol{e_3},\boldsymbol{e_4})=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}}i & \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}i\\0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{3}}\exp\left(\frac{-2\pi}{3}i\right) & \frac{1}{\sqrt{6}}i & \frac{1}{\sqrt{3}}\exp\left(\frac{2\pi}{3}i\right) & -\frac{1}{\sqrt{6}}i\\\frac{1}{\sqrt{3}}\exp\left(\frac{-\pi}{3}i\right) & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\exp\left(\frac{\pi}{3}i\right) & \frac{1}{\sqrt{6}}\end{pmatrix} \tag{21}$$

$$U^*U=UU^*=E \tag{22}$$

$$U^*AU=\begin{pmatrix}\exp\left(\frac{\pi}{3}i\right) & 0 & 0 & 0\\0 & \exp\left(\frac{\pi}{3}i\right) & 0 & 0\\0 & 0 & \exp\left(-\frac{\pi}{3}i\right) & 0\\0 & 0 & 0 & \exp\left(-\frac{\pi}{3}i\right)\end{pmatrix} \tag{23}$$

行列の計算確認は次のサイトを利用し計算した。

Matrix calculator　`https://matrixcalc.org/ja/`

SageMathCell　`https://sagecell.sagemath.org/`

以下のコードは SageMath で実行した。

```
A=Matrix([[1,-1,-1,-1],[1,1,1,-1],[1,-1,1,1],[1,1,-1,1]])*1/2
print("A=")
print(A)
print("A*At=")
print(A*A.transpose())
print("Aの行列式:", A.det())
print("固有多項式:", A.fcp())
print("固有値:", A.eigenvalues())
print("固有値と固有ベクトル:", A.eigenvectors_right())

print("——固有空間の基底——")
#ベクトル
v1=vector([1,0,exp(-2*pi*I/3),exp(-pi*I/3)])
v2=vector([0,1,exp(2*pi*I/3),exp(-2*pi*I/3)])
v3=vector([1,0,exp(2*pi*I/3),exp(pi*I/3)])
v4=vector([0,1,exp(-2*pi*I/3),exp(2*pi*I/3)])
print("v1=", v1)
print("v2=", v2)
print("v3=", v3)
print("v4=", v4)
#内積
print("基底同士の内積-複素内積-エルミート内積")
print("v1,v1 :", expand(v1.inner_product(v1.conjugate())))
print("v1,v2 :", expand(v1.inner_product(v2.conjugate())))
print("v1,v3 :", expand(v1.inner_product(v3.conjugate())))
print("v1,v4 :", expand(v1.inner_product(v4.conjugate())))
print("—")
print("v2,v1 :", expand(v2.inner_product(v1.conjugate())))
print("v2,v2 :", expand(v2.inner_product(v2.conjugate())))
print("v2,v3 :", expand(v2.inner_product(v3.conjugate())))
print("v2,v4 :", expand(v2.inner_product(v4.conjugate())))
print("—")
print("v3,v1 :", expand(v3.inner_product(v1.conjugate())))
print("v3,v2 :", expand(v3.inner_product(v2.conjugate())))
print("v3,v3 :", expand(v3.inner_product(v3.conjugate())))
print("v3,v4 :", expand(v3.inner_product(v4.conjugate())))
print("—")
print("v4,v1 :", expand(v4.inner_product(v1.conjugate())))
print("v4,v2 :", expand(v4.inner_product(v2.conjugate())))
print("v4,v3 :", expand(v4.inner_product(v3.conjugate())))
print("v4,v4 :", expand(v4.inner_product(v4.conjugate())))
```

```
print("---")

#対角化
P=Matrix([v1,v2,v3,v4]).transpose()
print("==対角化 P^{-1}AP ==")
print(expand(P.inverse()*A*P))
print("=====")

# 以下、直交基底の計算
e1=v1/sqrt(3)
v2a=v2-v2.inner_product(e1.conjugate())*e1
print("v2とe1の内積", expand(v2.inner_product(e1.conjugate())))
print("v2'の大きさ", expand(v2a.inner_product(v2a.conjugate())))
e2=v2a/sqrt(2)
print("e1 = ", e1)
print("e2 = ", e2)

e3=v3/sqrt(3)
v4a=v4-v4.inner_product(e3.conjugate())*e3
print("v4とe3の内積", expand(v4.inner_product(e3.conjugate())))
print("v4'の大きさ", expand(v4a.inner_product(v4a.conjugate())))
e4=v4a/sqrt(2)
print("e3 = ", e3)
print("e4 = ", e4)

U=Matrix([e1,e2,e3,e4]).transpose()
print("-ユニタリ行列U-")
print(expand(U))
print("---ユニタリ行列の確認 UU^*--")
print(expand(U*U.transpose().conjugate()))
print("---ユニタリ行列の確認 U^*U---")
print(expand(U.transpose().conjugate()*U))
print("---ユニタリ行列Uを使った対角化---")
print(expand(U.transpose().conjugate()*A*U))
```