エルミート行列と対称行列

ref: 長岡亮介 線形代数入門講義 p275〜276

エルミート行列　複素正方行列 A が次を満たすとき、A をエルミート行列という

$$A^* = A$$

A が実正方行列のときは、

$$A \text{ がエルミート行列} \iff {}^tA = A$$

となり、このような A は対称行列、あるいは実対称行列と呼ばれる

エルミート行列の固有値

ref: 長岡亮介 線形代数入門講義 p282〜283

ref: 行列と行列式の基礎 p201、p203

行列の成分が実数であっても、特性方程式の根は一般には実数とは限らない

つまり、固有値は一般には複素数であるが、エルミート行列については次が成り立つ

エルミート行列の固有値の実数性　エルミート行列の固有値はすべて実数である

証明

エルミート行列 A の固有ベクトルを $\boldsymbol{v}$ とし、その固有値を $\alpha \in \mathbb{C}^n$ とすると、

$$A\boldsymbol{v} = \alpha\boldsymbol{v}$$

より、次が成り立つ

$$\begin{aligned}(A\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) &= (\alpha\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) \\ &= \alpha(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v})\end{aligned}$$

一方、随伴公式から、次のようにも書ける

$$(A\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{v}, A^*\boldsymbol{v})$$

A がエルミート行列であることから、$A^* = A$ なので、

$$\begin{aligned}(A\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) &= (\boldsymbol{v}, A\boldsymbol{v}) \\ &= (\boldsymbol{v}, \alpha\boldsymbol{v})\end{aligned}$$

内積の共役線形性に注意して、

$$(A\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) = \overline{\alpha}(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v})$$

ここまでで得られた $(A\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v})$ の 2 通りの表現をまとめると、

$$\alpha(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) = \overline{\alpha}(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v})$$

移項して、

$$(\alpha - \overline{\alpha})(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) = 0$$

ここで、$\boldsymbol{v}$ は固有ベクトルなので、$\boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0}$ である

よって、$(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}) \neq 0$ で両辺を割ることができ、次を得る

$$\alpha = \overline{\alpha}$$

すなわち、α は実数である ■

エルミート行列では、固有値が実数であることがうまく活きて、次の性質も成り立つ

エルミート行列の固有値の直交性　エルミート行列の相異なる固有値を持つ固有ベクトルは直交する

すなわち、エルミート行列 A の固有ベクトル $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$ がそれぞれ固有値 α, $\beta \in \mathbb{R}^n$ を持つとし、$\alpha \neq \beta$ ならば、

$$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = 0$$

が成り立つ

証明

固有値と固有ベクトルの定義より、

$$A\boldsymbol{u} = \alpha\boldsymbol{u}$$
$$A\boldsymbol{v} = \beta\boldsymbol{v}$$

が成り立つ

一方、随伴公式より、

$$(A\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{u}, A^*\boldsymbol{v})$$

であるが、A はエルミート行列なので、$A^* = A$ が成り立つ

$$(A\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{u}, A\boldsymbol{v})$$

先ほどの固有値と固有ベクトルの関係を代入して、

$$(\alpha\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{u}, \beta\boldsymbol{v})$$

ここで、α, β は実数なので、内積の共役線形性を考慮しても、

$$\alpha(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \beta(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$$

として、スカラーをそのまま外に出すことができる

よって、

$$(\alpha - \beta)(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = 0$$

であるが、$\alpha \neq \beta$ なので、$(\alpha - \beta) \neq 0$ で両辺を割ることができ、

$$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = 0$$

を得る ■

エルミート行列の対角化に向けた考察

H を n 次エルミート行列とすると、その固有値は n 個の実数として $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ とおける
そして、α_i に属する固有ベクトル $\boldsymbol{v}_i$ をとると、$\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n$ はどの 2 つも互いに直交する

そこで、それぞれを次のように正規化する

$$\boldsymbol{u}_i = \frac{\boldsymbol{v}_i}{\|\boldsymbol{v}_i\|} \quad (i = 1, \ldots, n)$$

すると、$\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ は互いに直交する単位ベクトルであるので、

$$U = (\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n)$$

とおけば、U はユニタリ行列となる

$\boldsymbol{u}_i$ は H の各固有ベクトル $\boldsymbol{v}_i$ をスカラー倍したものなので、

$$H\boldsymbol{u}_i = \alpha_i \boldsymbol{u}_i$$

という関係が成り立つ
つまり、U の列ベクトル $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ はそれぞれ H の固有値 $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ に属する固有ベクトルである

さらに、ユニタリ行列はその定義から明らかに正則行列であるので、対角化行列の列ベクトルと固有ベクトルの対応を振り返ると、

> エルミート行列はユニタリ行列を用いて対角化できる

という「予感」がしてくる

まだ「予感」としかいえないのは、エルミート行列の固有値 $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ が重複している可能性があるからである