ユニタリ行列と直交行列

ref: 長岡亮介 線形代数入門講義 p275～276、p279～282
ref: 行列と行列式の基礎 p204

ユニタリ行列　複素正方行列 A が次を満たすとき、A をユニタリ行列という

$$A^* = A^{-1}$$

ユニタリ行列と内積

2 つのベクトルそれぞれにユニタリ行列を左からかけても、それらの内積は変わらない

ユニタリ行列の特徴づけとしての内積不変性　n 次複素行列 A がユニタリ行列であることと、任意の $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n$ に対し、

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

が成り立つことは同値である

証明

ユニタリ行列ならば内積を保つ

随伴公式より、

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

ここで、A がユニタリ行列であることは、

$$A^*A = E$$

と言い換えられるので、これを用いると、

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

が成り立つ ■

内積を保つならばユニタリ行列

転置を用いて内積を表すと、

$$\begin{aligned} (A\boldsymbol{u}, A\boldsymbol{v}) &= {}^t(A\boldsymbol{u})\overline{(A\boldsymbol{v})} \\ (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) &= {}^t\boldsymbol{u}\overline{\boldsymbol{v}} \end{aligned}$$

これらが一致するというのが仮定なので、

$${}^t(A\boldsymbol{u})\overline{(A\boldsymbol{v})} = {}^t\boldsymbol{u}\overline{\boldsymbol{v}}$$

この関係を用いて、行列 ${}^tA\overline{A}$ の (i, j) 成分を考えると、

$$\begin{aligned} {}^t(A\boldsymbol{e}_i)\overline{(A\boldsymbol{e}_j)} &= {}^t\boldsymbol{e}_i\overline{\boldsymbol{e}_j} \\ &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

となり、これはすなわち、

$${}^tA\overline{A} = E$$

よって、両辺の複素共役をとることで、

$$A^*A = E$$

を得る

したがって、A はユニタリ行列である ■

この定理において、$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}$ の場合を考えると、ユニタリ行列とノルムに関する性質が導かれる

ユニタリ行列とノルム

ユニタリ行列を左からかけても、ベクトルのノルムは変わらない

ユニタリ行列の特徴づけとしてのノルム不変性　n 次複素行列 A がユニタリ行列であることと、任意の $\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n$ に対し、

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

が成り立つことは同値である

証明

A がユニタリ行列であることと、任意の $\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n$ に対し、

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

が成り立つことは同値であった

ここで、$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}$ とすると、

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

が成り立つことになり、ノルムの定義より、

$$\|A\boldsymbol{v}\|^2 = \|\boldsymbol{v}\|^2$$

すなわち、

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

がしたがう　■

ユニタリ行列と直交性

A が実正方行列のときは、

$$A \text{ がユニタリ行列} \iff {}^tA = A^{-1}$$

となり、このような A は直交行列と呼ばれる

直交行列　実正方行列 A が次を満たすとき、A を直交行列という

$$ {}^tA = A^{-1} $$

直交行列という名前の由来は、次のように考えられる

A を n 個の列ベクトルを横一列に並べたものとみなし、

$$ A = (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n) $$

とおくと、${}^tA = A^{-1}$、すなわち ${}^tAA = E$ は、

$$ \begin{pmatrix} {}^t\boldsymbol{a}_1 \\ {}^t\boldsymbol{a}_2 \\ \vdots \\ {}^t\boldsymbol{a}_n \end{pmatrix} (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} $$

と表される

これは、ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ が、次の性質

$$ {}^t\boldsymbol{a}_i\boldsymbol{a}_j = (\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{a}_j) = \delta_{ij} $$

を満たすことを意味する

すなわち、直交行列 A の列ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_n$ は、互いに直交する単位ベクトルである

この事実は、複素行列に対しても成立する

ユニタリ行列の列ベクトルの直交正規性　複素正方行列 A を $A = (\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_n)$ と列ベクトル分解するとき、

$$ A \text{ がユニタリ行列} \iff (\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{a}_j) = \delta_{ij} $$

すなわち、ユニタリ行列の列ベクトルは、互いに直交する単位ベクトルである

証明

A がユニタリ行列であることは、任意の $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n$ に対し、

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

が成り立つことと同値であった

ここで、$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{e}_i$, $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{e}_j$ とすると、

$$(A\boldsymbol{e}_i, A\boldsymbol{e}_j) = (\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j)$$

が成り立つことになる

左辺の $A\boldsymbol{e}_i$ について考えると、

$$\begin{aligned} A\boldsymbol{e}_i &= (\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_i, \ldots, \boldsymbol{a}_n) \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \leftarrow i \\ \\ \\ \end{matrix} \\ &= \boldsymbol{a}_i \end{aligned}$$

$A\boldsymbol{e}_j$ についても同様なので、

$$\begin{aligned} (A\boldsymbol{e}_i, A\boldsymbol{e}_j) = (\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{a}_j) &= (\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) = \delta_{ij} \\ \therefore \quad (\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{a}_j) &= \delta_{ij} \end{aligned}$$

となり、A がユニタリ行列であることは、$(\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{a}_j) = \delta_{ij}$ へと同値変形できる ■

ユニタリ行列と随伴・転置

ユニタリ行列の随伴不変性　ユニタリ行列 U の随伴行列 U^* もユニタリ行列である

証明

随伴行列を二回とると元に戻るので、

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

また、ユニタリ行列の定義より、

$$U^* = U^{-1}$$

したがって、

$$\begin{aligned}(U^*)^* &= U \\ U &= (U^*)^{-1}\end{aligned}$$

すなわち、

$$U^* = (U^*)^{-1}$$

となるので、U^* もユニタリ行列である ■

上の定理は、実行列の世界では、次の定理に対応する

直交行列の転置不変性　直交行列 Q の転置行列 ${}^tQ$ も直交行列である