

§6. ユニタリ行列とユニタリ変換

この節以降しばらくは、(エルミート) 内積が指定された有限次元ベクトル空間、すなわち、有限次元計量空間 V 上の線形変換に対する対角化問題に取り組む。その際、ユニタリ行列 (列ベクトルが互いに直交し、大きさが 1 の複素正方行列) が重要な役割を果たす。ここでは、ユニタリ行列およびユニタリ変換の定義と両者の間の関係を調べる。

この節では、 $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ または $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ とする。

● 6-1 : 線形変換とその行列表示

線形代数 1、2 で学んだ、線形変換とその行列表示の定義を復習しておこう。 U, V を $\mathbb{K}$ 上のベクトル空間とする。次の 2 条件を満たす写像 $T: V \rightarrow U$ を $\mathbb{K}$ -**線形写像** と呼ぶ：

(LM1) 任意の $v_1, v_2 \in V$ に対して $T(v_1 + v_2) = T(v_1) + T(v_2)$.

(LM2) 任意の $v \in V$ と任意の $t \in \mathbb{K}$ に対して $T(tv) = tT(v)$.

$U = V$ のとき、 $\mathbb{K}$ -線形写像は $\mathbb{K}$ -**線形変換** と呼ばれる。次の 2 つは簡単に確かめられる。

- $S: W \rightarrow V$ および $T: V \rightarrow U$ が $\mathbb{K}$ -線形写像ならば、合成写像 $T \circ S: W \rightarrow U$ もまた $\mathbb{K}$ -線形写像である。
- 任意の $\mathbb{K}$ -ベクトル空間 V に対して、 V 上の恒等写像 $\text{id}_V: V \rightarrow V$ は $\mathbb{K}$ -線形写像である。

例 6-1-1 行列 $A \in M_{mn}(\mathbb{K})$ が与えられると、 $\mathbb{K}$ -線形写像 $T_A: \mathbb{K}^n \rightarrow \mathbb{K}^m$ が

$$(6-1 \text{ a}) \quad T_A(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} \quad (\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n)$$

により定義される。これを行列 A から定まる $\mathbb{K}$ -線形写像と呼ぶ。

上の例とは逆に、 $\mathbb{K}$ -線形写像 $T: V \rightarrow U$ から行列を生み出すことができるが、そのためには U, V のそれぞれに基底を指定しなければならない。その方法を思い出そう。 $\mathcal{A} = "v_1, \dots, v_n"$, $\mathcal{B} = "u_1, \dots, u_m"$ をそれぞれ V, U の基底とする。このとき、各 v_j ($j = 1, \dots, n$) の T による像を $\mathcal{B}$ の一次結合で表わす：

$$T(v_j) = a_{1j}u_1 + a_{2j}u_2 + \dots + a_{mj}u_m \quad (a_{ij} \in \mathbb{K} \ (i = 1, 2, \dots, m)).$$

ここに現れる係数 a_{ij} を取り出して次のように長方形に並べることにより、 (m, n) -行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}.$$

を作ることができる。 A を V の基底 $\mathcal{A}$ と U の基底 $\mathcal{B}$ に関する T の**行列表示**と呼ぶ。 T が線形変換であるときには、 $U = V$ であるから、 U, V に同じ基底 $\mathcal{B}$ を与えて行列表示することができる。これを基底 $\mathcal{B}$ に関する T の**行列表示**と呼ぶ。

● 6-2 : 正規直交基底による基底の変換からユニタリ行列へ

n 次元ベクトル空間 V 上の $\mathbb{K}$ -線形変換 T が**対角化可能**であるとは、 $T(v_i) = \lambda_i v_i$ ($i = 1, \dots, n$) を満たす V の基底 " $v_1, \dots, v_n$ " とスカラー $\lambda_i \in \mathbb{K}$ ($i = 1, \dots, n$) が存在するとき、すなわち、 T の固有ベクトルからなる V の基底が存在するときをいう。与えられた線形変換 T に対して、そのような基底が存在するか否かを問う問題は、対角化問題と呼ばれる。この問題は、行列の言葉で書き換えると、与えられた正方行列 A に対して、 $P^{-1}AP$ が対角行

列となるような正則行列 P は存在するか? という問題になる。この P は V における基底の変換行列として与えられるが、 V に内積が与えられている状況下では、単なる基底ではなく、正規直交基底とするのが自然である。そこで、 V に2つの正規直交基底 $\mathcal{B}_1 = "v_1, \dots, v_n"$ と $\mathcal{B}_2 = "u_1, \dots, u_n"$ が与えられたとき、これらの間の基底の変換行列としてどのような性質を持つ行列が現れるのかを観察する。各 v_j を $u_1, \dots, u_n$ の一次結合で

$$v_j = p_{1j}u_1 + p_{2j}u_2 + \dots + p_{nj}u_n \quad (p_{ij} \in \mathbb{K})$$

と表わす。このとき、 $\mathcal{B}_1$ から $\mathcal{B}_2$ への基底の変換行列は

$$P := \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ p_{n1} & p_{n2} & \cdots & p_{nn} \end{pmatrix}$$

で与えられる。 $\mathcal{B}_1$ および $\mathcal{B}_2$ は V の正規直交基底なので、

$$\delta_{ij} = \langle v_i, v_j \rangle = \left\langle \sum_{k=1}^n p_{ki}u_k, \sum_{k=1}^n p_{kj}u_k \right\rangle = \sum_{k=1}^n p_{ki}\overline{p_{kj}}$$

となる。したがって、 P を $P = (\mathbf{p}_1 \cdots \mathbf{p}_n)$ のように列ベクトルで表わすと、“ $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n$ ” は $\mathbb{K}^n$ の (通常のエルミート内積に関して) 正規直交基底をなす。逆に、 P の列ベクトルが $\mathbb{K}^n$ の正規直交基底をなすとき、 V の正規直交基底 “ $u_1, \dots, u_n$ ” から

$$(v_1 \cdots v_n) = (u_1 \cdots u_n)P$$

によって V のベクトルの列 “ $v_1, \dots, v_n$ ” を作ると、これは V の正規直交基底となる。この考察を背景に、次の定義を設ける。

定義 6-2-1

- (1) $U = (\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n) \in M_n(\mathbb{C})$ が**ユニタリ行列**であるとは、 U の列ベクトル “ $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ ” が $\mathbb{C}^n$ の (通常のエルミート内積に関して) 正規直交基底をなすときをいう。
- (2) $P = (\mathbf{p}_1 \cdots \mathbf{p}_n) \in M_n(\mathbb{R})$ が**直交行列**であるとは、 P の列ベクトル “ $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_n$ ” が $\mathbb{R}^n$ の (通常の内積に関して) 正規直交基底をなすときをいう。

注意 1. $\mathbb{R} \subset \mathbb{C}$ とみなすことにより、直交行列はユニタリ行列とみなすことができる。

注意 2. 数ベクトル空間 $\mathbb{K}^n$ に属する n 個のベクトル $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ に対して n 次正方行列 A を $A = (\mathbf{a}_1 \cdots \mathbf{a}_n)$ と定める。次の6つは互いに同値である。

- ① “ $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ ” は $\mathbb{R}^n$ の基底である。
- ② “ $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ ” は $\mathbb{R}^n$ を張る。
- ③ “ $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ ” は一次独立である。
- ④ 行列 A は正則である、すなわち、逆行列を持つ。
- ⑤ $\text{rank } A = n$.
- ⑥ $|A| \neq 0$.

①と④の同値性から、ユニタリ行列および直交行列は正則であることがわかる。

以上の考察から、有限次元計量空間 V 上の $\mathbb{K}$ -線形変換 T を正規直交基底によって対角化する問題は、 T の正規直交基底に関する行列表示 A を考えたときに、 $U^{-1}AU$ が対角行列となるようなユニタリ行列 ($\mathbb{K} = \mathbb{R}$ の場合には直交行列) U が存在するか否かという問題に帰着される。

例 6-2-2 行列 $P \in M_2(\mathbb{R})$ に対して次が成り立つ。

P が直交行列 $\iff$ ある $\theta \in \mathbb{R}$ に対して

$$P = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \text{ または } P = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad \square$$

注意. $P = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$ ならば、 P が定める線形変換 $T_P : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ は原点を中心とする θ -回転移動であり、 $P = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}$ ならば T_P は原点を通る直線 $y = (\tan \frac{\theta}{2})x$ に関する線対称移動である。

例 6-2-3 $A = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \\ \frac{1+i}{2} & 0 & -\frac{1+i}{2} \\ -\frac{i}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{2} \end{pmatrix}$ はユニタリ行列である。一方、 $B = \begin{pmatrix} 0 & i & -1 \\ i & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ はユニタリ行列でない。実際、 B の第1列ベクトルと第2列ベクトルは直交していない。 $\square$

● 6-3 : ユニタリ変換

計量空間上の線形変換においては、内積を保つ線形変換が特に重要である。ユニタリ行列が定める線形変換は内積を保っており、次の補題が示すように、これによってユニタリ性が特徴付けられる。

補題 6-3-1

$U \in M_n(\mathbb{C})$ に対して、

U はユニタリ行列 $\iff U$ から定まる $\mathbb{C}$ -線形変換 T_U は $\mathbb{C}^n$ の (通常のエルミート) 内積を保つ、すなわち、任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n$ に対して

$$\langle T_U(\mathbf{x}), T_U(\mathbf{y}) \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$$

(証明)

$U = (\mathbf{u}_1 \cdots \mathbf{u}_n)$ とおき、“ $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ ” を $\mathbb{C}^n$ の標準基底とする。

“ $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ ” が $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底ならば、

$$\langle T_U(\mathbf{e}_i), T_U(\mathbf{e}_j) \rangle = \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j \rangle = \delta_{ij} = \langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle$$

となる。したがって、任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n$ に対して $\langle T_U(\mathbf{x}), T_U(\mathbf{y}) \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$ が成立する。

逆に、 T_U が内積を保つならば、次が成り立つ：

$$\langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j \rangle = \langle T_U(\mathbf{e}_i), T_U(\mathbf{e}_j) \rangle = \langle \mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j \rangle = \delta_{ij}.$$

よって、“ $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n$ ” は $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底をなす、すなわち、 U はユニタリ行列である。 $\square$

注意. 上の補題と同様に、 $P \in M_n(\mathbb{R})$ に対して、次が成り立つことがわかる：

P は直交行列 $\iff P$ から定まる $\mathbb{R}$ -線形変換 T_P は $\mathbb{R}^n$ の (通常の) 内積を保つ。

定義 6-3-2

V を $\mathbb{K}$ 上の計量空間とし、 T を V 上の $\mathbb{K}$ -線形変換とする。任意の $u, v \in V$ に対して

$$\langle T(u), T(v) \rangle = \langle u, v \rangle$$

となるとき、 $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ の場合に T を **ユニタリ変換** と呼び、 $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ の場合に **直交変換** と呼ぶ。

例 6-3-3 [補題 6-3-1] より、任意のユニタリ行列 $U \in M_n(\mathbb{C})$ に対して、 U から定まる $\mathbb{C}$ -線形変換 $T_U: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ はユニタリ変換である。□

例 6-3-4 V を $\mathbb{R}$ 上の有限次元計量空間とする。 $u \neq 0_V$ なる $u \in V$ に対して線形変換 $\tau_u: V \rightarrow V$ を

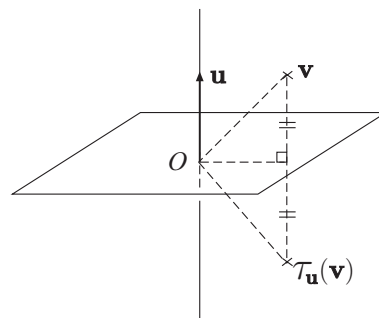
$$\tau_u(v) = v - \frac{2\langle v, u \rangle}{\langle u, u \rangle} u \quad (v \in V)$$

により定義する。 τ_u を u に関する**鏡映**と呼ぶ。 τ_u は直交変換である(証明は演習問題とする)。

鏡映と呼ぶ理由は、 τ_u が次を満たすことから来ている：

- (i) $\tau_u(u) = -u$,
- (ii) $v \in (\text{Span}\{u\})^\perp$ ならば、 $\tau_u(v) = v$.

ここで、 $\text{Span}\{u\} = \{tu \mid t \in \mathbb{R}\}$ である。(i) は u が τ_u により反対向きのベクトルに写されることを表わし、(ii) は $\text{Span}\{u\}$ の直交補空間 $(\text{Span}\{u\})^\perp$ (これは $(n-1)$ 次元の部分空間をなしている) 上では恒等写像になっているということを表わしている。したがって、 τ_u は $(n-1)$ 次元部分空間 $(\text{Span}\{u\})^\perp$ を「鏡」として、ベクトルを反転させる写像になっている。



命題 6-3-5

V を $\mathbb{C}$ 上の有限次元計量空間とする。 V 上の $\mathbb{C}$ -線形変換 T に対して

T がユニタリ変換 $\iff V$ の正規直交基底に関する T の行列表示はユニタリ行列が成り立つ。特に、有限次元計量空間上のユニタリ変換は全単射である。

(証明)

“ $u_1, \dots, u_n$ ” を V の正規直交基底とし、この基底に関する T の行列表示を $A = (a_{ij})$ とする。各 $j = 1, \dots, n$ に対して

$$T(u_j) = \sum_{k=1}^n a_{kj} u_k$$

が成り立つ。よって、

$$\langle T(u_i), T(u_j) \rangle = \left\langle \sum_{k=1}^n a_{ki} u_k, \sum_{k=1}^n a_{kj} u_k \right\rangle = \sum_{k=1}^n a_{ki} \overline{a_{kj}}$$

となる。これより、

$$\begin{aligned} T \text{ がユニタリ変換} &\iff \langle T(u_i), T(u_j) \rangle = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, \dots, n) \\ &\iff \sum_{k=1}^n a_{ki} \overline{a_{kj}} = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, \dots, n) \\ &\iff A \text{ はユニタリ行列} \end{aligned}$$

が成り立つ。 T がユニタリ変換ならば、その行列表示はユニタリ行列であるから、正則である。したがって、 T は全単射である。□

注意. 上の命題と同様に、有限次元実計量空間 V 上の $\mathbb{R}$ -線形変換 T に対して次が成り立つ：

T が直交変換 $\iff V$ の正規直交基底に関する T の行列表示は直交行列

特に、有限次元計量空間上の直交変換は全単射である。

線形代数 3 事前練習用演習問題

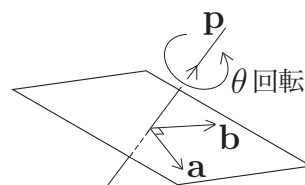
pre6-1. 次の 3 次複素正方行列 U がユニタリ行列となるような $a, b, c \in \mathbb{C}$ を求めよ。

$$U = \begin{pmatrix} a & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \\ b & 0 & -\frac{1+i}{2} \\ c & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{2} \end{pmatrix}$$

pre6-2. $\mathbf{p} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3$ とおく。 $\mathbb{R}$ -線形変換 $T: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ を直線 $L = \{ t\mathbf{p} \mid t \in \mathbb{R} \}$ を軸とする θ 回転とする。但し、回転の方向は、原点から $\mathbf{p}$ へ向かって右ネジが進むときの回転の方向と一致するものとする。

(1) $\mathbf{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}$ とおくとき、“ $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{p}$ ” は $\mathbb{R}^3$ の正規直交基底であることを示せ。

(2) T は直交変換であることを示せ。



ヒントと略解（最初は見ずに解答してください）

pre6-1. $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3 \in \mathbb{C}^3$ を $U = (\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \mathbf{u}_3)$ により定めると、

$$U \text{ がユニタリ} \iff \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j \rangle = \delta_{i,j} \ (i = 1, 2, 3)$$

であるから、与えられた行列 U がユニタリ行列であるための必要十分条件は

$$\langle \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1 \rangle = 1, \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \rangle = 0, \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_3 \rangle = 0$$

となることである。よって、連立方程式

$$\begin{cases} |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1 & \dots\dots ① \\ -ia - c = 0 & \dots\dots ② \\ a + (-1+i)b + ic = 0 & \dots\dots ③ \end{cases}$$

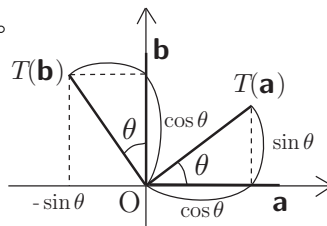
を複素数の範囲内で解けばよい。まず、②、③からなる連立一次方程式を解き、 $a = z, b = (1+i)z, c = -iz$ ($z \in \mathbb{C}$) を得る。これを①に代入して $|z|^2 = \frac{1}{4}$ を得る。したがって、 $z = \frac{e^{i\theta}}{2}$ ($\theta \in \mathbb{R}$) と表わされる。ここで、 $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ である。以上より、 U がユニタリとなるような $a, b, c \in \mathbb{C}$ は $a = \frac{1}{2}e^{i\theta}, b = \frac{1+i}{2}e^{i\theta}, c = -\frac{i}{2}e^{i\theta}$ ($\theta \in \mathbb{R}$) により与えられる。

pre6-2. (2) は [命題 6-3-5] の証明の下の注意の言い換えを用いる。

(1) 計算により、 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle = \langle \mathbf{b}, \mathbf{b} \rangle = \langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle = 1$ および $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \langle \mathbf{a}, \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{b}, \mathbf{p} \rangle = 0$ であることがわかるので、“ $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{p}$ ” は $\mathbb{R}^3$ の正規直交基底をなす。

(2) (1) の $\mathbb{R}^3$ の正規直交基底 “ $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{p}$ ” に関して

$$\begin{aligned} T(\mathbf{a}) &= (\cos \theta)\mathbf{a} + (\sin \theta)\mathbf{b}, \\ T(\mathbf{b}) &= -(\sin \theta)\mathbf{a} + (\cos \theta)\mathbf{b}, \\ T(\mathbf{p}) &= \mathbf{p} \end{aligned}$$



が成り立つ。したがって、正規直交基底 “ $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{p}$ ” に関する T の行列表示は $\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

となる。これは直交行列であるから T は直交変換である。

第6回(2025年5月19日)演習問題事前練習シート

※このシートをA4片面1枚に印刷して、授業前までに事前練習用演習問題の解答をここに書いてください。略解を参照して答え合わせをしたものを授業に持参してください。但し、このシートは提出せず、各自で保管してください。

学籍番号 _____ 氏名 _____

Q1. U, V を $\mathbb{K}$ 上のベクトル空間とする。(1) 写像 $T: V \rightarrow U$ が $\mathbb{K}$ -線形写像であるとは、どんな条件が満たされるときをいうか？(2) V 上の $\mathbb{K}$ -線形変換とは何か？定義を書け。(3) 行列 $A \in M_{mn}(\mathbb{K})$ から定まる $\mathbb{K}$ -線形写像 T_A の定義を述べよ。Q2. $T: V \rightarrow U$ を $\mathbb{K}$ -線形写像とし、 $\mathcal{A} = "v_1, \dots, v_n"$, $\mathcal{B} = "u_1, \dots, u_m"$ をそれぞれ V, U の基底とする。基底 $\mathcal{A}$ と $\mathcal{B}$ に関する T の行列表示とは何か？その定義を説明せよ。Q3. (1) $\mathbb{K}$ 上の有限次元ベクトル空間 V 上の $\mathbb{K}$ -線形変換 T に対する対角化問題とは何か、簡単に説明せよ。

(2) (1) で説明した対角化問題を、行列の言葉で書き換えると、どのような問題になるか？

Q4. (1) $U \in M_n(\mathbb{C})$ がユニタリ行列であるとはどんな条件が成立するときをいうか。(2) V を $\mathbb{C}$ 上の計量空間とし、 T を $\mathbb{C}$ -線形変換とする。(i) T がユニタリ変換であるとはどんな条件が成立するときをいうか。その条件を書け。(ii) V が有限次元であるとき、 T がユニタリ変換であることを、行列表示を用いて言い換えるとどのような条件になるか？(iii) T が $U \in M_n(\mathbb{C})$ から定まる $\mathbb{C}$ -線形変換 T_U であるとき、 T_U がユニタリ変換であることは U がどんな行列であることと同値か？

Q5. 第6回の授業で学んだ事柄について、わかりにくかったことや考えたことなどがあれば、書いてください。