エルミート行列の対角化について

エルミート行列の対角化を直交行列の対角化のヤコビ法を利用して求める。

今以下のようなユニタリ行列を考える。

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & e^{i\alpha} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & e^{-i\alpha} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \tag{1}$$

この行列は$(\mathbf{U})_{ii}$ 成分と$(\mathbf{U})_{jj}$ 成分以外の対角成分が 1 のユニタリ行列である。一般の複素行列$\mathbf{A}$にこの行列$\mathbf{U}$を右から、$\mathbf{U}$の随伴行列$\mathbf{U}^\dagger$を左から掛けると以下のようになる。

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i}e^{i\alpha} & a_{1j}e^{-i\alpha} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1}e^{-i\alpha} & \cdots & a_{ii} & a_{ij}e^{-2i\alpha} & \cdots & a_{in}e^{-i\alpha} \\ a_{j1}e^{i\alpha} & \cdots & a_{ji}e^{2i\alpha} & a_{jj} & \cdots & a_{jn}e^{i\alpha} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{ni}e^{i\alpha} & a_{nj}e^{-i\alpha} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

行列$\mathbf{A}$がエルミート行列のとき、非対角成分は$a_{ij} = a_{ji}^* = re^{i\theta}$と書けるので、計算後は以下のようになる。ここに$a_{ji}^*$は$a_{ji}$の複素共役である。

$$(\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U})_{ij} = (\mathbf{U}^\dagger\mathbf{A}\mathbf{U})_{ji}^* = re^{i(\theta-2\alpha)} \tag{2}$$

ここで、$\alpha = \theta/2$とおくと、(2)式の非対角成分を実数化して、$a_{ij}e^{-2i\alpha} = a_{ji}e^{2i\alpha} = r$とすることができる。その際対角成分$a_{ii}$と$a_{jj}$は元々実数なので、今度は以下の直交行列$\mathbf{P}$で非対角成分を 0 にすることができる。

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cos\beta & -\sin\beta & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \sin\beta & \cos\beta & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

この操作を非対角成分の絶対値の大きいものから順に繰り返して行くと、非対角成分を 0 に近づけて行くことができる。