

## 対角化

実対称行列、エルミート行列、正規行列の対角化と正方行列での特異値分解に触れています。

行列は大文字のローマ文字、スカラーは小文字のローマ文字がギリシャ文字、ベクトル ( $n \times 1$  行列) は太字にしています。

正方行列を相似変換によって対角行列にすることを対角化 (diagonalization) と言います。ここでは、実対称行列、エルミート行列、正規行列の対角化を扱います。

相似変換で対角行列にできるための条件を先に求めておきます。 $n \times n$  行列  $A$  が対角行列  $D$  と相似なら  $n$  個の線形独立な固有ベクトルを持つことを示します。 $P$  を正則行列として、 $A$  と  $D$  は相似変換によって

$$D = P^{-1}AP$$

なっているとします。 $D$  は対角行列なので

$$\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \dots$$

としたベクトル ( $n \times 1$  行列) は固有ベクトルで、明らかに線形独立です。 $A$  の固有ベクトルは  $\mathbf{g}_i = P\mathbf{e}_i$  で与えられ、

$$\alpha_1\mathbf{g}_1 + \alpha_2\mathbf{g}_2 + \dots + \alpha_n\mathbf{g}_n = 0$$

としたとき

$$0 = P^{-1}(\alpha_1\mathbf{g}_1 + \alpha_2\mathbf{g}_2 + \dots + \alpha_n\mathbf{g}_n) = \alpha_1P^{-1}\mathbf{g}_1 + \dots + \alpha_nP^{-1}\mathbf{g}_n = \alpha_1\mathbf{e}_1 + \dots + \alpha_n\mathbf{e}_n$$

$\mathbf{e}_i$  は線形独立なので  $\alpha_i = 0$  となり、 $\mathbf{g}_i$  は線形独立と分かります。というわけで、 $A$  を対角行列に相似変換できるなら、 $A$  は線形独立な  $n$  個の固有ベクトルを持ちます。

これを逆から言うと、 $A$  が  $n$  個の線形独立な固有ベクトルを持つなら、 $A$  は対角行列と相似となります。これも成立します。 $n$  個の線形独立な固有ベクトルを  $\mathbf{x}_i$  とします。 $\mathbf{x}_i$  から

$$X = (\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \dots \ \mathbf{x}_n) = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nn} \end{pmatrix}$$

として、 $n \times n$  行列を作ります。 $\mathbf{x}_i$  の成分は  $(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{ni})$  としています。 $AX$  は積の規則から

$$AX = A(\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \dots \ \mathbf{x}_n) = (A\mathbf{x}_1 \ A\mathbf{x}_2 \ \dots \ A\mathbf{x}_n)$$

$x_i$  は固有ベクトルなので固有値を  $\lambda_i$  として

$$AX = (\lambda_1 x_1 \ \lambda_2 x_2 \ \cdots \ \lambda_n x_n)$$

これは

$$AX = (\lambda_1 x_1 \ \lambda_2 x_2 \ \cdots \ \lambda_n x_n) = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n) \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} = XD$$

$D$  は  $\lambda_i$  を対角成分とする対角行列です。よって、 $X^{-1}AX = D$  となり、 $A$  が  $n$  個の線形独立な固有ベクトルを持つとき、相似変換で対角行列にきます。そして、その対角行列は  $A$  の固有値を対角成分に持ちます。

行列が  $n$  個の異なる固有値を持つなら、対応する  $n$  個の固有ベクトルは線形独立です。このため、 $n \times n$  行列が相似変換で対角化できるかは、 $n$  個の固有値が全て異なっているかどうかで判断できます。入門的な物理で対角化がどうこう言っている話はこれさえ覚えておけば大体どうにかなります。

このことを使うと、対角化できる行列と交換する行列は対角化できることが分かります。対角化できる  $n \times n$  行列を  $A$  とし、その  $n$  個の異なる固有値を  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ )、対応する  $n$  個の線形独立な固有ベクトルを  $x_i$  とします。 $A$  と交換できる  $n \times n$  行列を  $B$  とします。

まず、 $x_i$  は  $B$  の固有ベクトルにもなっていることを示します。 $A, B$  は交換するので

$$Ax_i = \lambda_i x_i$$

$$BAx_i = \lambda_i Bx_i$$

$$A(Bx_i) = \lambda_i (Bx_i)$$

これから、 $Bx_i \neq 0$  は  $A$  の固有値  $\lambda_i$  に対応する固有ベクトルです。しかし、 $\lambda_i$  は全て異なるとしているので、 $Ax_i = \lambda_i x_i$  となる  $x_i$  は 1 個です ( $\lambda_1$  となる固有ベクトルは  $x_1$  だけ)。このため、 $x_i$  と  $Bx_i$  は同じ、もしくは定数倍です。よって、 $\alpha_i$  をスカラーとして  $Bx_i = \alpha_i x_i$  となり、 $x_i$  は  $B$  の固有ベクトルとなります。

このように、 $B$  は  $A$  と同じ線形独立な固有ベクトルを持ちます。よって、 $B$  は対角化できます。

実対称行列、エルミート行列、正規行列での対角化を求めます。

実対称行列 (実数による対称行列) から見ていきます。実数なので複素共役「\*」では  $S^* = S$ 、対称なので転置「 $t$ 」では  $S^t = S$  です。対角化すると固有値が成分になるので、固有値の性質から求めます。 $S$  を  $n \times n$  実対称行列、 $z$  を  $S$  の複素数の固有値として

$$B = (zI - S)(z^*I - S) = |z|^2 I + S^2 - zIS - z^*SI = |z|^2 I + S^2 - (z + z^*)SI$$

となる実数の行列  $B$  を作ります。 $I$  は単位行列です。 $\alpha, \beta$  を実数として  $z = \alpha + i\beta$  とすれば

$$(\alpha^2 + \beta^2)I + S^2 - 2\alpha SI = (\alpha I - S)^2 + \beta^2 I$$

$z$  は  $S$  の固有値なので  $(S - zI)x = 0$  ( $x \neq 0$ ) から  $\det[S - zI] = 0$  となり、 $B$  は正則行列ではない実数の行列です。正則では逆行列があるので  $M\mathbf{y} = 0$  となるのは  $\mathbf{y} = 0$  ですが、正則行列でないなら  $M\mathbf{y} = 0$  となる  $\mathbf{y} \neq 0$  が存在します。そうすると、 $B$  は実数の行列なので、 $B\mathbf{y} = 0$  となる実数のベクトル  $\mathbf{y} \neq 0$  があり

$$0 = \mathbf{y}^t B \mathbf{y} = \mathbf{y}^t (\alpha I - S)^2 \mathbf{y} + \beta^2 I \mathbf{y}^t \mathbf{y} = \mathbf{y}^t (\alpha I - S) (\alpha I - S) \mathbf{y} + \beta^2 \mathbf{y}^t \mathbf{y} = \mathbf{y}^t (\alpha I - S)^t (\alpha I - S) \mathbf{y} + \beta^2 \mathbf{y}^t \mathbf{y}$$

$S$  は対称行列で、 $\alpha I - S$  は対称行列の対角成分しか変更しないことから  $(\alpha I - S)^t = (\alpha I - S)$  です。最右辺の  $\mathbf{y}^t \mathbf{y}$  は  $\mathbf{y}$  の大きさなので、 $\beta^2 \mathbf{y}^t \mathbf{y} \geq 0$  です。 $\mathbf{y}' = (\alpha I - S) \mathbf{y}$  とすれば

$$\mathbf{y}^t (\alpha I - S)^t (\alpha I - S) \mathbf{y} = \mathbf{y}^t \mathbf{y}'$$

$\mathbf{y}^t \mathbf{y}'$  は  $\mathbf{y}'$  の大きさなので  $\mathbf{y}^t \mathbf{y}' > 0$  です。よって、 $\mathbf{y} \neq 0$  から  $\beta = 0$  が要求され、 $S$  の固有値は実数  $\alpha$  となります。また、 $S$  の固有ベクトルを複素ベクトル  $v + iw$  ( $v, w$  は実ベクトル) としたとき

$$S(v + iw) = \alpha(v + iw)$$

となるので

$$Sv = \alpha v, Sw = \alpha w$$

よって、 $S$  の固有ベクトルは実ベクトルです。

エルミート共役を使えばもっと簡単に示せます。 $x, y$  を複素ベクトルとし、複素数なので内積はエルミート共役「 $\dagger$ 」によって  $x^\dagger y = (x^t)^* y$  とします。実対称行列のエルミート共役は  $S^\dagger = (S^t)^* = S^* = S$  です。そうすると

$$x^\dagger Sx = x^\dagger S^\dagger x = (Sx)^\dagger x$$

となっているので複素数  $z$  によって  $Sx = zx$  とすれば、

$$x^\dagger Sx = zx^\dagger x, (Sx)^\dagger x = z^* x^\dagger x$$

よって、 $z = z^*$  から固有値は実数です。

固有ベクトルを見ます。 $x_1, x_2$  を固有値  $\alpha_1, \alpha_2$  の固有ベクトルとします。これらは

$$x_2^t Sx_1 = \alpha_1 x_2^t x_1$$

左辺の転置は

$$(x_2^t Sx_1)^t = x_1^t S^t x_2 = x_1^t Sx_2 = \alpha_2 x_1^t x_2$$

右辺の転置は

$$(\alpha_1 x_2^t x_1)^t = \alpha_1 x_1^t x_2$$

となって、 $\alpha_2 x_1^t x_2 = \alpha_1 x_1^t x_2$  です。同様に

$$\mathbf{x}_1^t S \mathbf{x}_2 = \alpha_2 \mathbf{x}_1^t \mathbf{x}_2, (\mathbf{x}_1^t S \mathbf{x}_2)^t = \mathbf{x}_2^t S \mathbf{x}_1 = \alpha_1 \mathbf{x}_2^t \mathbf{x}_1, (\alpha_2 \mathbf{x}_1^t \mathbf{x}_2)^t = \alpha_2 \mathbf{x}_2^t \mathbf{x}_1$$

から、 $\alpha_1 \mathbf{x}_2^t \mathbf{x}_1 = \alpha_2 \mathbf{x}_2^t \mathbf{x}_1$  です。しかし、 $\alpha_1 \neq \alpha_2$  から  $\mathbf{x}_2^t \mathbf{x}_1 = 0, \mathbf{x}_1^t \mathbf{x}_2 = 0$  となります。これは  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  が直交することを表します。よって、実対称行列の異なる固有値の固有ベクトルはお互いに直交します。

実対称行列は対角化できることは Schur 分解からすぐ分かります。Schur 分解は、ユニタリー行列  $U$  と上三角行列  $T$  によって行列  $M$  は  $M = UTU^\dagger$  と書けることです。今は実数に制限されているので、Schur 分解のユニタリー行列  $U$  は直交行列  $R$  になり、 $S = RTR^t$  です。この転置は

$$S = RTR^t$$

$$S^t = (RTR^t)^t$$

$$S = RT^t R^t$$

上三角行列の転置は上三角行列にならないので、非対角成分は 0 の必要があります。よって、 $T$  は対角行列  $D$  になります。対角化できるので  $n \times n$  実対称行列は  $n$  個の線形独立な固有ベクトルを持ち、それらは直交しているので直交基底を作れます。

最初に示したように、 $D$  の対角成分は  $S$  の固有値、 $R$  の列は  $S$  の固有ベクトルで構成されます。実際にそうになっていることを確かめます。 $\mathbf{x}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) を  $S$  の固有値  $\alpha_i$  に対応する固有ベクトルとして

$$D = \text{diag}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$$

$$R = (\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \cdots \ \mathbf{x}_n), (R^t R)_{ij} = \mathbf{x}_i^t \mathbf{x}_j = \delta_{ij}$$

$\text{diag}$  は対角成分が  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$  であることを表しています。 $\delta_{ij}$  はクロネッカーデルタです。これらから

$$\begin{aligned} R^t S R &= R^t S (\mathbf{x}_1 \ \mathbf{x}_2 \ \cdots \ \mathbf{x}_n) = R^t (S \mathbf{x}_1 \ S \mathbf{x}_2 \ \cdots \ S \mathbf{x}_n) \\ &= R^t (\alpha_1 \mathbf{x}_1 \ \alpha_2 \mathbf{x}_2 \ \cdots \ \alpha_n \mathbf{x}_n) \\ &= (\alpha_1 R^t \mathbf{x}_1 \ \alpha_2 R^t \mathbf{x}_2 \ \cdots \ \alpha_n R^t \mathbf{x}_n) \end{aligned}$$

$\mathbf{x}_i$  は実対称行列の固有ベクトルなので直交し

$$R^t \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^t \\ \mathbf{x}_2^t \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n^t \end{pmatrix} \mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \mathbf{e}_1, R^t \mathbf{x}_2 = \mathbf{e}_2, \dots, R^t \mathbf{x}_n = \mathbf{e}_n$$

よって

$$R^t S R = (\alpha_1 \mathbf{e}_1 \ \alpha_2 \mathbf{e}_2 \ \cdots \ \alpha_n \mathbf{e}_n) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \alpha_n \end{pmatrix}$$

となり、対角成分が固有値の対角行列となります。

今度は  $n \times n$  エルミート行列を見ます (量子力学の「エルミート演算子」の捕捉で  $3 \times 3$  行列の場合を具体的に示している)。エルミート行列  $H$  の固有値は実数になることから示します。固有値を  $\lambda$ 、固有ベクトルを  $x$  として

$$Hx = \lambda x$$

$$x^\dagger Hx = \lambda x^\dagger x$$

一方で、エルミート共役を取った場合は

$$(Hx)^\dagger = (\lambda x)^\dagger$$

$$x^\dagger H = \lambda^* x^\dagger \quad (H^\dagger = H)$$

$$x^\dagger Hx = \lambda^* x^\dagger x$$

これらから  $\lambda = \lambda^*$  となり、固有値は実数です。

$H$  の異なる固有値を  $\lambda_1, \lambda_2$  とし、それぞれの固有ベクトルを  $x_1, x_2$  とすれば

$$x_2^\dagger (Hx_1) = \lambda_1 x_2^\dagger x_1, \quad (x_2^\dagger H)x_1 = \lambda_2 x_2^\dagger x_1$$

これらは等しいので、 $x_2^\dagger x_1 = 0$  として異なる固有値の固有ベクトルは直交します。このように実対称行列と同じ性質になるのは、実対称行列はエルミート行列だからです。

Schur 分解からエルミート行列は対角化できるのが分かります。 $H$  の Schur 分解は

$$T = U^{-1} H U = U^\dagger H U$$

このエルミート共役は

$$T^\dagger = (U^\dagger H U)^\dagger = U^\dagger H^\dagger U = U^\dagger H U = T$$

上三角行列の転置は上三角行列ではないので、対角行列となります。よって、エルミート行列はユニタリー行列による相似変換で対角化され、その対角成分は固有値です。対角化されるので、 $n \times n$  エルミート行列は  $n$  個の線形独立な固有ベクトルを持って、それらから直交基底を作れます。

最後に正規行列 (normal matrix) を見ます。正規行列  $N$  はエルミート共役「 $\dagger$ 」に対して  $NN^\dagger = N^\dagger N$  となる行列です。エルミート行列は  $HH^\dagger = H^\dagger H$ 、ユニタリー行列は  $UU^\dagger = UU^{-1} = U^{-1}U = U^\dagger U$  となるので、正規行列です。

正規行列の固有値の性質と固有ベクトルが直交することを求めます。正規行列  $N$  の固有値を  $\lambda_1, \lambda_2$ 、固有ベクトルを  $x_1, x_2$  とします。  $B$  を正規行列とすれば

$$(Bx_1)^\dagger(Bx_1) = x_1^\dagger B^\dagger Bx_1 = x_1^\dagger BB^\dagger x_1 = (B^\dagger x_1)^\dagger B^\dagger x_1$$

$Nx_1 = \lambda_1 x_1$  から  $(\lambda_1 I - N)x_1$  としたとき

$$\begin{aligned} (\lambda_1 I - N)(\lambda_1 I - N)^\dagger &= (\lambda_1 I - N)(\lambda_1^* I - N^\dagger) = \lambda_1 \lambda_1^* I + NN^\dagger - \lambda_1^* N - \lambda_1 N^\dagger \\ &= \lambda_1^* \lambda_1 I + N^\dagger N - \lambda_1^* N - \lambda_1 N^\dagger \\ &= (\lambda_1^* I - N^\dagger)(\lambda_1 I - N) \end{aligned}$$

となるので、 $\lambda_1 I - N$  は正規行列です。 $\lambda_1 I - N$  を  $B$  とすると  $Bx_1 = 0$  から

$$0 = (Bx_1)^\dagger(Bx_1) = (B^\dagger x_1)^\dagger B^\dagger x_1$$

よって、

$$B^\dagger x_1 = (\lambda_1 I - N)^\dagger x_1 = 0$$

となるので

$$N^\dagger x_1 = \lambda_1^* x_1$$

このように、正規行列のエルミート共役は同じ固有ベクトルを持ち、固有値は複素共役です。エルミート行列と同じように、 $x_2^\dagger N x_1 = \lambda_1 x_2^\dagger x_1$  のエルミート共役を取って

$$(x_2^\dagger N x_1)^\dagger = x_1^\dagger N^\dagger x_2 = \lambda_2^* x_1^\dagger x_2 \Leftrightarrow (x_2^\dagger N x_1)^\dagger = (\lambda_1 x_2^\dagger x_1)^\dagger = \lambda_1^* x_1^\dagger x_2$$

$\lambda_2^* x_1^\dagger x_2 = \lambda_1^* x_1^\dagger x_2$  から  $x_1^\dagger x_2 = 0$  となり、異なる固有値の固有ベクトルは直交します。

正規行列の対角化も Schur 分解から分かります。 $N$  の Schur 分解は  $N = UTU^\dagger$  です。上三角行列  $T$  の対角成分は  $N$  の固有値  $\lambda_i$  なので

$$T = \begin{pmatrix} \lambda_1 & t_{12} & t_{13} & \cdots & t_{1n} \\ 0 & \lambda_2 & t_{23} & \cdots & t_{2n} \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \cdots & t_{3n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}, T^\dagger = \begin{pmatrix} \lambda_1^* & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ t_{12}^* & \lambda_2^* & 0 & \cdots & 0 \\ t_{13}^* & t_{23}^* & \ddots & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ t_{1n}^* & t_{2n}^* & \cdots & \cdots & \lambda_n^* \end{pmatrix}$$

$T^\dagger T$  と  $TT^\dagger$  の  $(1,1)$  成分を求めると

$$(T^\dagger T)_{11} = \sum_{k=1}^n (T^\dagger)_{1k} (T)_{k1} = \lambda_1^* \lambda_1 = |\lambda_1|^2$$

$$(TT^\dagger)_{11} = \sum_{k=1}^n (T)_{1k} (T^\dagger)_{k1} = |\lambda_1|^2 + |t_{12}|^2 + \cdots + |t_{1n}|^2$$

$N$  は正規行列なので

$$T^\dagger T = (U^\dagger N U)^\dagger U^\dagger N U = U^\dagger N^\dagger U U^\dagger N U = U^\dagger N^\dagger N U = U^\dagger N N^\dagger U = U^\dagger N U U^\dagger N^\dagger U = T T^\dagger$$

よって、 $|t_{12}|^2 + \cdots + |t_{1n}|^2 = 0$  で、 $|t_{1i}|$  は正なので

$$t_{12} = t_{13} = \cdots = t_{1n} = 0$$

となります。(2, 2) 成分でも

$$(T^\dagger T)_{22} = \sum_{k=1}^n (T^\dagger)_{2k} (T)_{k2} = |t_{12}|^2 + |\lambda_2|^2 = |\lambda_2|^2$$

$$(TT^\dagger)_{22} = \sum_{k=1}^n (T)_{2k} (T^\dagger)_{k2} = |\lambda_2|^2 + |t_{23}|^2 + \cdots + |t_{2n}|^2$$

となるので、 $t_{23} = t_{24} = \cdots = t_{2n} = 0$  です。これが  $(n-1, n-1)$  成分まで続くので、上三角行列の成分  $t_{ij}$  は全て 0 になり、対角成分が固有値の対角行列になります。よって、正規行列はユニタリー行列で対角化されます。

まとめると

- 実対称行列
  - 固有値は実数。
  - 固有ベクトルによる直交基底が存在する。
  - 直交行列によって対角化される。
- エルミート行列
  - 固有値は実数。
  - 固有ベクトルによる直交基底が存在する。
  - ユニタリー行列によって対角化される。
- 正規行列
  - 固有ベクトルによる直交基底が存在する。
  - ユニタリー行列によって対角化される。

このような対角化に関する性質はスペクトル定理 (spectral theorem) と呼ばれたりもします。

ついでに、対角行列に変換する相似変換でない方法として、正方行列の特異値分解に触れておきます。簡単にするために  $n \times n$  正則行列  $M$  とします。 $M^\dagger M$  はエルミート行列なので、ユニタリー行列  $U$  によって

$$M^\dagger M = UDU^\dagger$$

と書けます。 $D$  は対角行列です。エルミート行列からの対角行列なので成分は実数です。 $M^\dagger M$  の固有値を  $\lambda$ 、固有ベクトルを  $\boldsymbol{x}$  とします。 $M^\dagger M$  は正則行列なので固有値は 0 にならず ( $M$  が正則なら  $M^\dagger$  も正則で、正則行列同士の積は正則)

$$\lambda \boldsymbol{x}^\dagger \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^\dagger M^\dagger M \boldsymbol{x} = (M \boldsymbol{x})^\dagger M \boldsymbol{x} \Rightarrow \lambda |\boldsymbol{x}|^2 = |M \boldsymbol{x}|^2$$

右辺は正なので  $\lambda$  も正と分かります。正とはっきりさせるために  $M^\dagger M$  の固有値を  $\sigma_i^2$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) とします。対応する固有ベクトルを  $\boldsymbol{x}_i$  として

$$(M \boldsymbol{x}_i)^\dagger M \boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{x}_i^\dagger M^\dagger M \boldsymbol{x}_j = \sigma_j^2 \boldsymbol{x}_i^\dagger \boldsymbol{x}_j = \sigma_j^2 \delta_{ij}$$

エルミート行列の固有ベクトルなので、正規直交基底になっているとします。 $\boldsymbol{y}_i = M \boldsymbol{x}_i / \sigma_i$  ( $\sigma_i > 0$ ) とすれば

$$\boldsymbol{y}_i^\dagger \boldsymbol{y}_i = 1, \boldsymbol{y}_i^\dagger \boldsymbol{y}_j = 0 \quad (i \neq j)$$

となり、別の正規直交基底  $\boldsymbol{y}_i$  が作れます ( $M$  が正則行列でないと  $\sigma_i$  は 0 にもなれますが、 $\lambda \neq 0$  での固有ベクトルの組を拡張して基底にすることで同じ手順ができる)。2 個の正規直交基底によって、ユニタリー行列は 2 個作れて

$$V = (\boldsymbol{x}_1 \ \boldsymbol{x}_2 \ \cdots \ \boldsymbol{x}_n), \quad U = (\boldsymbol{y}_1 \ \boldsymbol{y}_2 \ \cdots \ \boldsymbol{y}_n)$$

$MV$  は  $\sigma_i$  を対角成分に持つ対角行列  $\Sigma$  によって

$$MV = (M \boldsymbol{x}_1 \ M \boldsymbol{x}_2 \ \cdots \ M \boldsymbol{x}_n) = (\boldsymbol{y}_1 \ \boldsymbol{y}_2 \ \cdots \ \boldsymbol{y}_n) \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n \end{pmatrix} = U \Sigma$$

というわけで、 $n \times n$  正則行列  $M$  は

$$M = U \Sigma V^\dagger$$

となり、2 個の別のユニタリー行列によって対角行列にできます ( $M$  をこれらの積に分解できる)。これが  $n \times n$  正則行列 (正則でなくても同じになる) での特異値分解 (singular value decomposition) です。 $M^\dagger M$  の固有値の平方根  $\sigma_i$  を  $M$  の特異値 (singular value) と呼んでいます。