

第7章 固有値と固有ベクトル

ベクトルの公理的な議論に始まる第5章の様々な議論，特に波動方程式の議論は，君たち初学者にとっては，かなり高度なものだったと思います．その章のねらいは，高校でなぜにベクトルや行列を習い，それが大学でどのような数学と結びつき，そして‘その数学’が高度な技術に裏打ちされた豊かな文明社会の^{いしずえ}礎^{てん}になっていることを嗅ぎとってもらうことにあります．線形微分方程式・重ね合わせの原理・微分演算子・固有値・固有関数など，現在我々が学んでいる線形代数の‘ベクトル’（方向の意味）は間違いなくそちらを向いています．第5章の雰囲気^{ふきわ}を味わうことにより，この章の固有値や固有ベクトルを学ぶことの意味を理解し，モチベーションを高めてほしいと思います．

§7.1 2次曲線と行列の対角化

固有値問題の導入部として何が^{ふきわ}相応しいか迷いましたが，やはり『 $+α$ 』で行ったように2次曲線の標準化（いわゆる「主軸問題」）から入っていくのがわかりやすいようです．固有値問題の真髄は，第5章で例解したように，（連立）線形微分方程式にあり，それを視野に入れて学んでいくことになります．

7.1.1 楕円・双曲線の方程式

楕円や双曲線の方程式は『 $+α$ 』の§5.3で学びました．ここではそれらを行列を用いて表しましょう．2次曲線は，軸と呼ばれるある直線に関して線対称ですが，その軸が x 軸や y 軸であるものを標準形といいます．方程式が標準形であるか，そうでないかはその行列に反映されます．

7.1.1.1 標準形の方程式

楕円や双曲線の方程式の標準形は

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1, \quad \pm \frac{x^2}{a^2} \mp \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (a, b > 0)$$

のように表されます。我々の目的のために、これらをまとめて

$$C: \alpha x^2 + \beta y^2 = 1$$

と表しましょう。これを行列を用いて書き換えると

$$C: \alpha x^2 + \beta y^2 = 1 \Leftrightarrow (x \ y) \begin{pmatrix} \alpha x \\ \beta y \end{pmatrix} = 1 \Leftrightarrow (x \ y) \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$$

のように表すことができますね。以下、これを分析しましょう。

ここに現れた行列

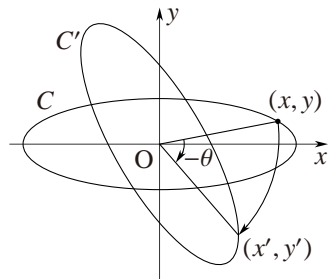
$$D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$$

は、例えば、 $\alpha = \frac{1}{3^2}$ 、 $\beta = \frac{1}{2^2}$ ならば C の方程式が「長軸」 3×2 、「短軸」 2×2 の楕円¹⁾を表すことがわかるように、曲線 C を決定づける要素のほとんど全てを含む重要な行列です。 D は、対角成分のみが 0 でないので、対角行列です。もし D が対角行列でなく、例えば $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ だとしたら、 C はどんな曲線かわかりませんね。

7.1.1.2 曲線の回転

標準形 $C: (x \ y) D \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$ に対して、その形や大きさを変えない線形変換、例えば §6.1.1.2 で学び §6.1.4.1 で例解した原点周りの回転を行い、変換後の曲線 C' の方程式がどうなるかを調べましょう。

標準形 C を原点の周りに角 $-\theta$ だけ回転して得られる曲線を C' としましょう。このと



¹⁾ 楕円の軸は 2 つありますが、軸が楕円によって切り取られる線分のうち、長いほう(短いほう)を長軸(短軸)といいます。

き， C 上の点 (x, y) に対応する C' 上の点を (x', y') とすると

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = f_{-\theta} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = R_{-\theta} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

$$R_{-\theta} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \left(c = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \text{と略記} \right)$$

ですね． (x, y) は C 上の点， (x', y') は C' 上の点ですから， C' の方程式は変数 x', y' を用いて表されます．それを得るには， C の方程式が変数 x, y で表されていることを利用して，

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = R_{-\theta}^{-1} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = R_{\theta} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$$

を C の方程式に代入すればよいわけです ($R_{\alpha}^{-1} = R_{-\alpha}$ に注意)．

そのような代入には， $C : (x \ y) D \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$ ですから， $(x \ y) = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}^T$ および定理 $(AB)^T = B^T A^T$ を $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = R_{\theta} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$ に適用して

$$\begin{aligned} (x \ y) &= \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}^T = \left(R_{\theta} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} \right)^T = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}^T R_{\theta}^T \\ &= (x' \ y') R_{\theta}^T \end{aligned}$$

が得られます．

以上の結果を標準形 $C : (x \ y) D \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$ に代入すると，変数 x', y' で表される方程式，つまり C' の方程式が得られます：

$$C' : (x' \ y') R_{\theta}^T D R_{\theta} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = 1, \quad \text{ただし} \quad D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}, \quad R_{\theta} = \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix}.$$

整理して

$$C' : (x' \ y') A \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = 1, \quad \text{ただし} \quad A = R_{\theta}^T D R_{\theta} = \begin{pmatrix} c^2 \alpha + s^2 \beta & -cs(\alpha - \beta) \\ -cs(\alpha - \beta) & s^2 \alpha + c^2 \beta \end{pmatrix}$$

となります．行列 A には非対角成分があるので，ベクトルとの積を展開すると $x'y'$ 項が現れ，方程式だけを見ても C' がどんな曲線か判別がつかなくなりますね．しかしながら，以下で学ぶ数学理論は，その判別は可能であると豪語してきます．

7.1.1.3 曲線の軸と基底の変換

曲線 C' に現れた非対角の行列 A が何であっても C' の正体を明らかにする方法を考えましょう。

まず，標準形 $C: (x \ y)D \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$ に戻って考えてみましょう．楕円や双曲線の標準形はその2つの軸が x 軸と y 軸ですね．このことは $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ を

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = x e_1 + y e_2$$

と表して，§§3.4.1 と 3.4.2 で議論したベクトルの線形結合の議論を思い出すと，確認できます．基本ベクトル e_1 の係数が x ， e_2 の係数が y ですから， e_1 方向に x 軸， e_2 方向に y 軸をとっていますね．位置ベクトル $x e_1 + y e_2$ は，もちろん， xy 座標系の点 (x, y) に対応します．正確にいうと， xy 座標系の座標が (x, y) である点に対応します．

さて， $C: (x \ y)D \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$ を角 $-\theta$ だけ回転して， $C': (x' \ y')R_\theta^T D R_\theta \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = 1$ に変換するには，関係

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = R_{-\theta} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = R_{+\theta} \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$$

を用いて， C の方程式 $(x \ y)D \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$ の x, y を x', y' で表すだけで済みました．ここが大事なところですよ．上の関係を基本ベクトルの観点から見直して， C' のもう1つの表し方を試みましょう．

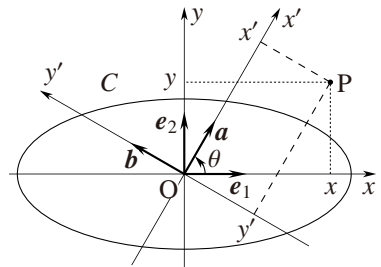
$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = R_\theta \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = R_\theta \left(x' \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + y' \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \Leftrightarrow x e_1 + y e_2 = x' R_\theta e_1 + y' R_\theta e_2$$

より， $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = R_\theta \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$ はベクトルの線形結合の形で表すことができますね．

左辺はふつうの基本ベクトルの線形結合ですが，右辺は基本ベクトルを角 θ だけ回転したベクトル $a = R_\theta e_1$ ， $b = R_\theta e_2$ の線形結合です：

$$x e_1 + y e_2 = x' a + y' b .$$

右辺の線形結合は §§3.4.2 で議論したように， a の係数が x' ， b の係数が y' です



から、ベクトル a 方向に x' 軸、 b 方向に y' 軸をとったこととなります。これを $x'y'$ 座標系ということにしましょう。この座標系は、 $|a| = 1$ 、 $|b| = 1$ 、 $a \perp b$ なので、「正規直交座標系」といわれます。（「座標系」について、よりよく理解するには §§3.6.2 斜交座標系 を読み返すとよいでしょう）。

左辺の位置ベクトル $xe_1 + ye_2$ が xy 座標系の座標 (x, y) である点 P を表すとすると、上の等式によって、同じ点 P は $x'y'$ 座標系においては座標 (x', y') で表されます。

座標軸の向きを決める基本的なベクトルは §§5.1.3.2 で議論した基底であり、基底の線形結合によって平面上の任意のベクトルはただ 1 通りに表されます（⇔ §§3.6.2）。特にベクトル $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ の基底 e_1, e_2 は標準基底といわれます。 $x'y'$ 座標系のベクトル $\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$ が基底 a, b を用いていることを示すために、記号

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}_\theta = x'a + y'b \quad (= R_\theta \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix})$$

を用いましょう。すると、 $C' : (x' \ y') R_\theta^T D R_\theta \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = 1$ は

$$C' : (x' \ y')_\theta D \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = 1$$

と表されます。‘この結果は、元の方程式 $C : (x \ y) D \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$ において、基底を標準基底 e_1, e_2 から基底 a, b にとり替えただけで得られた’ことに注意しましょう。

以上の議論から

$$\text{座標の角} - \theta \text{ 回転 } \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = R_{-\theta} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Leftrightarrow \text{基底の角} + \theta \text{ 回転 } x'a + y'b = xe_1 + ye_2$$

であることがわかります。つまり、‘回転した結果は新しい基底の座標系で元の曲線を眺めることと同じである’というわけです。実際、 $x'y'$ 座標系で見ると標準形 C のグラフは角 $-\theta$ だけ回転した曲線 C' のグラフのように見えますね。また、基底の議論をすると曲線 C' で $x'y'$ 項をもたらず非対角行列 $A = R_\theta^T D R_\theta$ が現れた理由が明らかになります。 xy 座標系の標準基底 e_1, e_2 の方向が標準形 C の軸と同じ方向であるのに対して、 $x'y'$ 座標系の基底 a, b の方向は C の軸の方向と異なるからです。

今度は、標準基底を用いて表された曲線 C' の方程式 $(x' \ y')A\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = 1$ (ただし $A = R_\theta^T DR_\theta$) に対して、(座標の回転を行う代わりに) 基底の変換を行って標準形に戻してみましょう。曲線 C' の軸は座標軸と角 $-\theta$ だけずれています。そこで、標準基底を角 $-\theta$ だけ回転して得られる基底 $R_{-\theta}e_1, R_{-\theta}e_2$ を用いることにして、軸と基底の方向が同じになるようにしてみましょう。新たな座標系を uv 座標系とすると

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = x'e_1 + y'e_2 = uR_{-\theta}e_1 + vR_{-\theta}e_2 \quad (= \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{-\theta} \text{と表す})$$

と表されます (これは変換 $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = R_\theta\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$ と同じです)。新たな基底を用いて得られる曲線を $C'_{-\theta}$ としましょう。まず、

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = R_{-\theta}(ue_1 + ve_2) = R_{-\theta}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{-\theta}$$

より、 C' の $\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}$ に $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{-\theta}$ 、 $(x' \ y')$ に $(u \ v)_{-\theta}$ を代入すると、 $R_\theta^T = R_\theta^{-1} = R_{-\theta}$ に注意して

$$C'_{-\theta} : (u \ v)_{-\theta}A\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{-\theta} = 1 \quad \Leftrightarrow \quad (u \ v)R_{-\theta}^TAR_{-\theta}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 1,$$

$$\text{よって } C'_{-\theta} : (u \ v)A'\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 1, \text{ ただし } A' = R_\theta AR_{-\theta}$$

が得られます。この表式で現れた行列 A' は、 $A = R_\theta^T DR_\theta$ より

$$\begin{aligned} A' &= R_\theta AR_{-\theta} = R_\theta(R_\theta^T DR_\theta)R_{-\theta} = (R_\theta R_\theta^T)D(R_\theta R_{-\theta}) \\ &= D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

よって、 A' が対角行列 D になるので、曲線 $C'_{-\theta}$ の方程式は $\alpha u^2 + \beta v^2 = 1$ となり、 $C'_{-\theta}$ がどんな曲線であるか特定できるようになります。

以上の議論からわかるのは、'基底の方向を曲線の軸方向にとることが曲線を特定するのに決定的である' ことです。基底の変換の方法は、曲線の方程式を意識することなく、(座標の変換を行ったつもりで) 単に基底ベクトルをとり替えればよいだけです。したがって、これは非常に有力な方法です。

7.1.2 行列の対角化

基底の変換の方法を学びました．それを未知の曲線 $C_\theta : (x \ y)A\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$ に適用し，その曲線がどんなものであるかを明らかにする一般的な方法を考えましょう．それは問題にしている行列を‘扱いやすい’対角行列に変換するもので，それが適用できる問題は「固有値問題」と呼ばれています．その方法は，真に一般的であり，我々が扱う問題より遙かに広い分野の問題に適用でき，科学・技術の最先端で応用されています．

7.1.2.1 固有値と固有ベクトル

基底をどのようにとるべきかを調べるために，まず，前の §§ で議論した曲線

$$C'_{-\theta} : (u \ v)A'\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 1 \quad (A' = D) \Leftrightarrow (u \ v)_{-\theta}A\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{-\theta} = 1,$$

$$\text{ただし} \quad \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_{-\theta} = R_{-\theta}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = uR_{-\theta}e_1 + vR_{-\theta}e_2, \quad A = R_\theta^T DR_\theta \\ = u\mathbf{a} + v\mathbf{b}$$

の行列 A' が対角行列 $D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$ になった理由を，基底 $\mathbf{a} = R_{-\theta}e_1$ ， $\mathbf{b} = R_{-\theta}e_2$ と行列 A の関連で調べましょう．

A を基底 \mathbf{a}, \mathbf{b} に掛けてみましょう． $R_\theta^T = R_\theta^{-1} = R_{-\theta}$ に注意して

$$A\mathbf{a} = (R_\theta^T DR_\theta)R_{-\theta}e_1 = R_\theta^T \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = R_{-\theta} \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha R_{-\theta} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha \mathbf{a},$$

$$\text{よって} \quad A\mathbf{a} = \alpha \mathbf{a},$$

$$A\mathbf{b} = (R_\theta^T DR_\theta)R_{-\theta}e_2 = R_\theta^T \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = R_{-\theta} \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix} = \beta R_{-\theta} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \beta \mathbf{b},$$

$$\text{よって} \quad A\mathbf{b} = \beta \mathbf{b}$$

となります．この結果は， $A\mathbf{a} \parallel \mathbf{a}$ ， $A\mathbf{b} \parallel \mathbf{b}$ で，かつ比例定数が曲線の基本的性質を表す α, β であることを意味します．

上で得られた結果は一般的な議論をする際にも重要であると考えられます． α, β は行列 A の固有値といわれ， \mathbf{a}, \mathbf{b} はそれぞれ固有値 α, β に対する A の固有ベクトルといわれます．

7.1.2.2 行列の対角化

今までの議論を活用して、未知の曲線（楕円か双曲線）

$$C : (x \ y)A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$$

の種別や形および軸を明らかにしましょう。A は非対角成分が 0 でない行列ですが、曲線 C' のときの議論で現れた非対角行列 $A = R_\theta^T D R_\theta$ の性質

$$A^T = (R_\theta^T D R_\theta)^T = R_\theta^T D^T (R_\theta^T)^T = R_\theta^T D R_\theta = A ,$$

$$\text{よって } A^T = A$$

を満たすとしましょう。この性質を満たす行列 A を 対称行列 といいます。この条件は一般の固有値問題については外され、一般には A は正方行列とされます。

以下、行列 A の固有値・固有ベクトルを調べて $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ の基底を標準基底から固有ベクトルの基底に置き換えます。先の例では、回転を表す 1 次変換を用いて新しい基底 a, b が得られましたね。ここでは、基底を変える変換に対して、回転行列の 1 性質 $R_\theta^T = R_\theta^{-1}$ については引き継ぐような線形変換 $f_P : P$ に一般化しましょう：

$$P^T = P^{-1} \Leftrightarrow P^T P = I .$$

この性質をもつ行列 P を 直交行列 といい、それを表現行列とする線形変換 f_P を 直交変換 といいます（一般の固有値問題ではこの条件も外されます）。

この変換によって任意のベクトル $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ の長さが変わらないことは

$$\left| f_P \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right|^2 = \left(P \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right)^T P \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = (x \ y) P^T P \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = (x \ y) P^{-1} P \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = (x \ y) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \left| \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right|^2 ,$$

$$\text{よって } \left| f_P \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right| = \left| \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right|$$

が成り立つことによって保証されます。基底の長さもちろん変わりません。したがって、‘直交変換は曲線の形や大きさを変えません’。

ここで、行列 A の固有値や固有ベクトルを具体的に求める方法の詳細は後回しにして、議論の全体を眺めてみましょう。標準基底 e_1, e_2 が直交変換 $f_P: P$ によって新たな基底 a, b になるとしましょう：

$$Pe_1 = a, \quad Pe_2 = b \quad (|a| = |b| = 1).$$

このとき基底の直交性が保たれることは

$$a^T b = (1 \ 0)P^T P \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0, \quad \text{よって} \quad a \perp b = 0$$

からわかります。よって、この基底は正規直交基底です。

この変換によって標準基底のベクトル $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = xe_1 + ye_2$ は新しいベクトルで表されます：

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} &= ua + vb = uPe_1 + vPe_2 = P(u e_1 + v e_2) \\ &= P \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P \quad (\text{とおく}). \end{aligned}$$

よって、未知の曲線 $C_P: (x \ y)A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$ は曲線

$$C_P: (u \ v)_P A \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P = 1, \quad \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P = P \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = ua + vb$$

に（形や大きさを変えずに）変換されます。

このとき、 P をうまく選んで基底 a, b が、行列 A の固有値 α, β に対応する、固有ベクトルになったとしましょう：

$$Aa = \alpha a, \quad Ab = \beta b.$$

すると

$$\begin{aligned} A \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P &= A(ua + vb) = u\alpha a + v\beta b = u\alpha Pe_1 + v\beta Pe_2 \\ &= P(u\alpha e_1 + v\beta e_2) \end{aligned}$$

となります。

ここで、 $\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ を満たす行列 D を求めましょう。直感的には $D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$ ですが、 $D = \begin{pmatrix} p & r \\ q & s \end{pmatrix}$ とおいて

$$D \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & r \\ q & s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad D \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p & r \\ q & s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix} = \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\text{よって} \quad p = \alpha, \quad q = r = 0, \quad s = \beta$$

より確かめられます．よって

$$A \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P = P(uDe_1 + vDe_2) = PD(u e_1 + v e_2) = PD \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix},$$

$$\text{よって } A \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P = PD \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$$

が得られます．

したがって， C_P の方程式は

$$C_P : (u \ v)_P A \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P = 1 \Leftrightarrow (u \ v)_P \left(A \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P \right) = 1 \Leftrightarrow (u \ v) P^T \left(PD \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right) = 1$$

$$\Leftrightarrow (u \ v) D \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 1 \Leftrightarrow \alpha u^2 + \beta v^2 = 1$$

と標準形になります．よって，未知の曲線 $C_?$ を特定するには，基底を行列 A の固有ベクトル a, b にとればよいことがわかります．また $C_?$ の2つの軸の方向は固有ベクトル a, b の方向であること，その2つの方向が直交することもわかりますね．

またこれらのことは，

$$A \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P = PD \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \Leftrightarrow AP \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = PD \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

において $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ は任意のベクトルなので省くことができ（☞238ページの脚注），行列を用いて

$$AP = PD \Leftrightarrow D = P^{-1}AP$$

のように表すことができます．

7.1.2.3 固有値の決定

行列 A の固有値・固有ベクトルを決定しましょう．それらを定める2つの方程式

$$Aa = \alpha a \quad (a = Pe_1, \quad |a| = 1),$$

$$Ab = \beta b \quad (b = Pe_2, \quad |b| = 1)$$

をまとめて扱うように固有値を λ ，対応する固有ベクトルを $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$ で表しましょう：

$$A \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}, \quad \text{ただし } \left| \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \right| = 1.$$

この方程式はときに（物理用語で）固有値方程式と呼ばれます．

この方程式を

$$(A - \lambda I) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

と表すと解法が見えてきます。もし、行列 $A - \lambda I$ の逆行列 $(A - \lambda I)^{-1}$ が存在するとすれば、それを方程式の両辺に左から掛けると $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \mathbf{0}$ となり、 $\left| \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \right| = 1$ に矛盾します。よって逆行列は存在せず、 $A - \lambda I$ の行列式は 0 になります：

$$\det(A - \lambda I) = |A - \lambda I| = 0.$$

これは A の固有値を決定する方程式であり、 A の特性方程式（固有方程式）といわれます。

行列 A を成分表示して固有値を求めましょう。 A は対称行列 ($A = A^T$) としていましたので、一般に $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix}$ の形です。よって、特性方程式は

$$\begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ b & d - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - (a + d)\lambda + ad - b^2 = 0$$

となります。 λ の 2 次方程式を解いて固有値

$$\lambda = \frac{1}{2}(a + d \pm \sqrt{(a - d)^2 + 4b^2}) = \alpha, \beta$$

を得ます。我々が関心のあるのは曲線 $C_?$ に xy 項がある $b \neq 0$ のときで、その場合には異なる 2 実数解があります。対称行列の固有値は実数ですね。

固有値 $\lambda = \alpha, \beta$ に対応する固有ベクトル $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$ を求めるには、固有値方程式

$$(A - \lambda I) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \mathbf{0} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} a - \lambda & b \\ b & d - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} (a - \lambda)p + bq = 0 \\ bp + (d - \lambda)q = 0 \end{cases}$$

を p, q について解きます。このとき、 $(A - \lambda I)^{-1}$ は存在しないので、方程式 $(a - \lambda)p + bq = 0$ と $bp + (d - \lambda)q = 0$ は同値です（つまり $\text{rank}(A - \lambda I) = 1$ ）。この場合は、片方の方程式から p と q の比のみが決まり、 $p : q = b : (\lambda - a)$ ($= (\lambda - d) : b$) より

$$\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = k_\lambda \begin{pmatrix} b \\ \lambda - a \end{pmatrix}, \quad k_\lambda = \pm \frac{1}{\sqrt{b^2 + (\lambda - a)^2}}$$

となります。比例定数 k_λ は $\left| \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \right| = 1$ を満たすために必要です。 λ に α, β を代入して、対応する固有ベクトル a, b が

$$\mathbf{a} = k_\alpha \begin{pmatrix} b \\ \alpha - a \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = k_\beta \begin{pmatrix} b \\ \beta - a \end{pmatrix}$$

と表されます．

ここで練習問題です．行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -2 \end{pmatrix}$ の固有値 α, β ($\alpha > \beta$) と対応する固有ベクトル \mathbf{a}, \mathbf{b} を求めなさい．ノーヒントです．

答は $\alpha = 2, \beta = -3,$

$$\mathbf{a} = \pm \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \pm \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} \quad (\text{複号同順とは限らない})$$

です． $A\mathbf{a} = 2\mathbf{a}, A\mathbf{b} = -3\mathbf{b}$ を確かめましょう．また \mathbf{a} と \mathbf{b} が直交することも確かめましょう．

固有ベクトル \mathbf{a}, \mathbf{b} は符号の不定性を除いて定まりました．今度は

$$\mathbf{a} = P\mathbf{e}_1, \quad \mathbf{b} = P\mathbf{e}_2, \quad P^T P = I$$

を用いて，基底を変換する行列 P を求めましょう．

$$P = \begin{pmatrix} p & r \\ q & s \end{pmatrix}$$

と成分表示して上式に代入すると

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} p & r \\ q & s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} p & r \\ q & s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix}$$

となるので， P の第 1 列の成分は \mathbf{a} の成分に一致し，第 2 列の成分は \mathbf{b} の成分に一致しますね．よって，基底を変換する行列 P は固有ベクトル \mathbf{a}, \mathbf{b} を並べて作られる行列であることがわかります．このことを

$$P = (\mathbf{a} \ \mathbf{b})$$

と表しましょう．なお，このとき P が直交行列であるための条件 $P^T P = I$ は， $|\mathbf{a}| = 1, |\mathbf{b}| = 1, \mathbf{a} \perp \mathbf{b}$ より自動的に満たされています．固有ベクトルに符号の不定性があっても $P^T P = I$ が満たされるのを確かめましょう．

議論で抜けていた部分がこれで補われました．今までの議論を簡単にまとめてみましょう．未知の曲線 $C_? : (x \ y)A \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1$ を調べるために，ベクトル $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = x\mathbf{e}_1 + y\mathbf{e}_2$ の基底を，標準基底 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ から，直交行列 P を用いて，行列 A の固有ベクトル $\mathbf{a} = P\mathbf{e}_1, \mathbf{b} = P\mathbf{e}_2$ で置き換えました：

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = xe_1 + ye_2 = ua + vb = P \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}.$$

固有値 $\lambda = \alpha, \beta$ は特性方程式 $|A - \lambda I| = 0$ から定まり, 固有ベクトル $p = a, b$ は固有値方程式 $(A - \lambda I)p = 0$ によって定まります. また, このとき $P = (a \ b)$ と定まります.

この変換によって, $C_?$ は

$$C_P : (u \ v)P^{-1}AP \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 1$$

に変換され, C_P に現れる行列は

$$P^{-1}AP = D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$$

と対角行列になるので, 固有値から未知の曲線 $C_?$ の種類と形状が, 固有ベクトルの方向から軸の方向がわかります.

Q1. 2 次の方程式で表される曲線

$$C_? : x^2 + 6\sqrt{3}xy - 5y^2 = 0$$

は何でしょう. ヒント: §§7.1.2.2 以下でやったことそのままです.

A1. 記憶しやすい形で解説しながら, 解答しましょう. まず, $C_?$ を行列で表します:

$$C_? : (x \ y) \begin{pmatrix} 1 & 3\sqrt{3} \\ 3\sqrt{3} & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0.$$

($A = \begin{pmatrix} 1 & 3\sqrt{3} \\ 3\sqrt{3} & -5 \end{pmatrix}$ は対称行列にします). 次に, $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} (= xe_1 + ye_2)$ の基底を標準基底から正規直交基底 $a = Pe_1, b = Pe_2$ ととり直します:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = ua + vb (= uP \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + vP \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P).$$

すると, $(a \ b) (= (Pe_1 \ Pe_2) = P(e_1 \ e_2) = PI) = P$ が成り立ち, P は直交行列です ($P^T = P^{-1}$). このとき, $C_?$ は uv 座標系の C_P に変換されます:

$$C_P : (u \ v)_P A \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P = 0 \Leftrightarrow (u \ v)P^T A P \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0.$$

($\left(\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_P\right)^T = \left(P \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}\right)^T = (u \ v)P^T$ に注意).

さて, a, b が A の固有ベクトル ($Aa = \alpha a, Ab = \beta b$) のとき,

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} (= D \text{ とおく})$$

が成り立ち, $A = \begin{pmatrix} 1 & 3\sqrt{3} \\ 3\sqrt{3} & -5 \end{pmatrix}$ は対角化されます. 具体的には, 固有値を λ , 固有ベクトルを $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$ (長さ = 1) とすると, 固有値方程式 $A\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$ より

$$\begin{pmatrix} 1 & 3\sqrt{3} \\ 3\sqrt{3} & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1-\lambda & 3\sqrt{3} \\ 3\sqrt{3} & -5-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

が成り立ちます. ここで, $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \neq \mathbf{0}$ より, 特性方程式

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 3\sqrt{3} \\ 3\sqrt{3} & -5-\lambda \end{vmatrix} = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 + 4\lambda - 32 = 0$$

が得られます. これを解いて, 固有値 $4, -8$ ($= \alpha, \beta$) が得られます. また, 固有ベクトルは, 固有値方程式 $(A - \lambda I)\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \mathbf{0}$ から得られる

$$(1-\lambda)p + 3\sqrt{3}q = 0 \quad \text{ただし} \quad \lambda = 4, -8$$

を解いて p, q の比が決まり, $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$ の長さが 1 であることから,

$$\begin{cases} \lambda = 4 = \alpha \quad \text{のとき} & \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{a} \\ \lambda = -8 = \beta \quad \text{のとき} & \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} = \mathbf{b} \end{cases}$$

とできます (p, q の相対的符号は好きに選べる). したがって,

$$P = (\mathbf{a} \ \mathbf{b}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & -1 \\ 1 & \sqrt{3} \end{pmatrix}.$$

このとき,

$$D = P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & -8 \end{pmatrix}$$

が確かめられます. このとき,

$$\begin{aligned} C_P : (u \ v) \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & -8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} &= 0 \Leftrightarrow 4u^2 - 8v^2 = 0 \\ &\Leftrightarrow u = \pm \sqrt{2}v \end{aligned}$$

ですから, C_P の正体は 2 直線 (2 次曲線の仲間と見なす) でした.

§7.2 固有値・固有ベクトルの応用例

前の § では 2 次の実数の対称行列の固有値問題を調べました．しかしながら，固有値の問題はそのような行列に限定されません．この § では行列が複素になる場合や対称でない場合について例解しましょう．

7.2.1 スピン角運動量

7.2.1.1 エルミート行列・ユニタリ行列

実対称行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$ の固有値は，§§7.1.2.3 で見たように，実数でした．固有値が（楕円の長軸や短軸など）意味をもつのは実数の場合ですから，対称行列を考えたことは必然だったわけです．また，§§7.1.2.2 で議論したように，基底を変える変換として直交行列 P ($P^{-1} = P^T$) を採用したことは，曲線の形や大きさを変えないために，必然なことでした．

§§6.1.3.4 で見たように，量子力学では複素数を使わずに理論を組み立てることは不可能であり，スピン角運動量の議論（⇨ §§6.1.3.4）では複素行列や複素ベクトルが現れます．このような場合に，対象となる行列にどんな制約を課せばよいかを議論してから，スピン角運動量の固有値問題を扱しましょう．

行・列ベクトルを含む $m \times n$ 複素行列 A の複素共役 \bar{A} が現れるので，前もって定義しておきます：

$$A = (a_{ij}) \quad \text{のとき} \quad \bar{A} = (\bar{a}_{ij}).$$

このとき，明らかに $\bar{A}^T = \overline{A^T}$ です．

さて，簡単のために 2 次の複素ベクトル $z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}$ (z_1, z_2 は複素数) などで議論します (n 次でも同じ)．まず，ノルムの正值性の条件（⇨ §§5.4.1 の内積の条件 (iv)）

$$|z|^2 = (z, z) \geq 0, \quad |z| = 0 \Leftrightarrow z = 0$$

を満たすためには

$$(z, z) = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = (\bar{z}_1 \quad \bar{z}_2) \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = |z_1|^2 + |z_2|^2$$

などと定義する必要があります．よって，複素行列 A のエルミート共役 A^\dagger (\dagger は ダガー と読む) を

$$A^\dagger = \overline{A}^T$$

と定義すると，内積は，もう 1 つの複素ベクトル $w = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix}$ を用意して，

$$(z, z) = z^\dagger z, \quad (w, z) = w^\dagger z = \overline{w_1} z_1 + \overline{w_2} z_2$$

と定めるべきことがわかります．これは条件

$$(w, z) = \overline{(z, w)}$$

と同じです．エルミート共役については， $(AB)^T = B^T A^T$ より，定理

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

が成り立ちますね．

次に，基底を変える線形変換 $f_U : U$ に対して任意の複素ベクトル z のノルムが変わらないことを要請しましょう：

$$|f_U(z)|^2 = (f_U(z), f_U(z)) = (Uz)^\dagger Uz = z^\dagger (U^\dagger U) z = z^\dagger z = |z|^2.$$

したがって，条件

$$U^\dagger U = I \Leftrightarrow U^\dagger = U^{-1}$$

が得られます．この性質を満たす行列 U をユニタリ行列といいます．

次に，対角化の対象となる複素行列 H を考察しましょう．まず，実数の場合を思い出すと，その対象は対称行列 $A (= A^T)$ で，実数ベクトル a, b に対して，

$$(b, Aa) = b^T Aa = b^T A^T a = (Ab)^T a = (Ab, a)$$

より，性質

$$(b, Aa) = (Ab, a)$$

を満たしました．複素行列 H に対しても，これに対応する性質

$$(w, Hz) = (Hw, z) \Leftrightarrow w^\dagger Hz = (Hw)^\dagger z (= w^\dagger H^\dagger z)$$

を要請すると， H の満たすべき性質は

$$H^\dagger = H$$

であることがわかります．これを満たす H はエルミート行列と呼ばれます．

上の要請が正当なことを示すために, ‘エルミート行列 H の固有値は実数’ であることを示しましょう. H の固有値 λ に対応する固有ベクトルを p とします: $Hp = \lambda p$ ($p \neq \mathbf{0}$). エルミート行列の性質 $(p, Hp) = (Hp, p)$ をうまく使います: $(cA)^\dagger = \bar{c}A^\dagger$ (c は複素数) に注意して,

$$\begin{aligned} (p, Hp) &= p^\dagger Hp = p^\dagger \lambda p = \lambda(p, p) \\ &= (Hp, p) = (Hp)^\dagger p = (\lambda p)^\dagger p = \bar{\lambda} p^\dagger p = \bar{\lambda}(p, p). \end{aligned}$$

よって, $\lambda(p, p) = \bar{\lambda}(p, p)$. $p \neq \mathbf{0}$ だから $(p, p) \neq 0$. したがって, $\lambda = \bar{\lambda}$ が成り立ち, 固有値 λ は実数です. 観測可能な量は実数ですから, 量子力学を建設した天才たちが ‘物理量はエルミート行列で表される’ と洞察したのは当然なことでした (厳密には ‘物理量はエルミート演算子で表される’).

最後に, ‘エルミート行列では, 固有値の異なる固有ベクトルは直交する’ ことを示しておきます (対称行列でも同じ). エルミート行列 H の異なる固有値 λ, μ の固有ベクトル p, q を考えます: $Hp = \lambda p, Hq = \mu q$ ($\lambda \neq \mu; p, q \neq \mathbf{0}$). 上で行った実数固有値の議論を参考にすると,

$$(q, Hp) = (Hq, p) \Leftrightarrow \lambda(q, p) = \mu(q, p) \Leftrightarrow (\lambda - \mu)(q, p) = 0.$$

$\lambda - \mu \neq 0$ だから $(q, p) = 0$. したがって, $p \perp q$. H が n 次でも同様です.

7.2.1.2 スピン行列

準備が整いました. 本題に入りましょう. §§6.1.3.4 で議論した電子のスピン角運動量 $S = (s_x, s_y, s_z)^T$:

$$s_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

の特徴を調べましょう. スピン行列 s_x, s_y, s_z はどれもエルミート行列であることにまず気づくでしょう: $s_x = s_x^\dagger, s_y = s_y^\dagger, s_z = s_z^\dagger$. したがって, それらの固有値は実験によって測定される量と見なされ, 実際,

$$s_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad s_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

からわかるように, s_z の固有値は $\pm \frac{\hbar}{2}$ です. スピン角運動量の理論によると, s_x や s_y の固有値も $\pm \frac{\hbar}{2}$ です. そのことを s_y で確かめましょう.

s_y の固有値 λ , 固有ベクトル $p (\neq \mathbf{0})$, および基底変換のユニタリ行列 U を求めましょう . 固有値方程式 $s_y p = \lambda p \Leftrightarrow (s_y - \lambda I)p = \mathbf{0}$ から出発します . まず , λ を求めるために特性方程式 $|s_y - \lambda I| = 0$ を解きます :

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Leftrightarrow \lambda^2 - \hbar^2/4 = 0.$$

これから , 固有値 $\lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$ が確かめられますね .

固有ベクトル p は , $p = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \neq \mathbf{0}$ として , 固有値方程式 $(s_y - \lambda I)p = 0$ を解きます :

$$-\lambda p - i\frac{\hbar}{2}q = 0 \quad \text{または} \quad i\frac{\hbar}{2}p - \lambda q = 0 \quad (\lambda = \pm \frac{\hbar}{2})$$

より ,

$$p = \begin{cases} p_+ = c_+ \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} & (s_y p_+ = +\frac{\hbar}{2} p_+) \\ p_- = c_- \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} & (s_y p_- = -\frac{\hbar}{2} p_-) \end{cases}$$

(c_{\pm} は 0 でない複素定数) が得られます .

s_y を対角化するユニタリ行列 U :

$$U^{-1} s_y U = D = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

は固有ベクトル p_+ , p_- を並べた行列

$$U = (p_+ \ p_-) = \begin{pmatrix} c_+ & c_- \\ ic_+ & -ic_- \end{pmatrix}$$

で (対角行列 D との比較で , p_+ , p_- の順) , ユニタリ条件 $UU^\dagger = U^\dagger U = I$ を満たします . この条件は , 容易に確かめられるように , $|c_+|^2 = |c_-|^2 = \frac{1}{2}$ のとき満たされます . ここでは , $c_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $c_- = \frac{-i}{\sqrt{2}}$ のように選び , (格好つけ) U をエルミート行列にしましょう :

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & -1 \end{pmatrix}.$$

$U^{-1} s_y U$ が正しい対角行列になるのを確かめるのは君に任せます .

7.2.2 連立漸化式・3項間漸化式

漸化式の固有値問題を扱います．そこで現れる行列は対称行列ではなく，変換行列 P については多少変更を要します．また，固有値が重解になる場合も扱います．

7.2.2.1 対称行列でない場合の対角化

§§7.1.2.3 では，行列 A が対称行列のときに，その対角化を議論しました．もし A が対称行列でないなど， A の固有ベクトル a, b が直交しない場合には変換行列 P は直交行列にできません．この §§ では，しかしながら， a, b が線形独立なときには対角化可能なことを示しましょう．以下の議論は A が n 次行列の場合にも容易に一般化できます．

行列 A が下の形で対角化できると仮定することから始めます：

$$P^{-1}AP = D, \quad D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}.$$

以下，対角化の必要十分条件は A の固有ベクトルが線形独立であることが示されます．

まず，

$$P = \begin{pmatrix} p & q \\ r & s \end{pmatrix}$$

とおくと， P^{-1} は存在すると仮定したので $ps - qr \neq 0 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix} \not\parallel \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix}$ ．つまり，2つのベクトル $\begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix}$ は線形独立です．また， $P^{-1}AP = D$ より $AP = PD$ なので

$$AP = A \begin{pmatrix} p & q \\ r & s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix} & A \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix} \end{pmatrix}, \quad PD = \begin{pmatrix} p & q \\ r & s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix} & \beta \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

を比較して，

$$A \begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix}, \quad A \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix} = \beta \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix}$$

が得られます．したがって， $\begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix}$ は A の固有ベクトルであり，またそれらは線形独立です．これが対角化に必要な条件，つまり必要条件です．

必要条件はまた十分条件でもあることを示しましょう。 $\begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix}$ は A の線形独立な固有ベクトルで、その固有値を α, β とします。このとき、 $P = \begin{pmatrix} p & q \\ r & s \end{pmatrix}$ とおくと、

$$AP = A \begin{pmatrix} p & q \\ r & s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix} & A \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix} & \beta \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix} \end{pmatrix},$$

$$PD = \begin{pmatrix} p & q \\ r & s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix} & \beta \begin{pmatrix} q \\ s \end{pmatrix} \end{pmatrix}.$$

よって、 $AP = PD$ 。また、固有ベクトルは線形独立だから P^{-1} が存在し、

$$P^{-1}AP = D, \quad D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$$

が成り立ちます。したがって、 A の対角化が可能です。

以上の議論においては、 P は、もはや基底を変換する行列という意味づけを失い、‘固有ベクトルを並べた行列’ という側面だけが残りました。

なお、 A が n 次行列の場合にも同様の議論ができます。変換行列 P は列ベクトル $p_i (i = 1, 2, \dots, n)$ を並べた $P = (p_1 \ p_2 \ \dots \ p_n)$ とします。行列 A が

$$P^{-1}AP = D, \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

のように対角化できると仮定します。 P^{-1} が存在すると仮定したので、 P は正則、つまり n 個の列ベクトルの組 $\{p_i\}$ は線形独立であることが必要です。また、

$$AP = PD \Leftrightarrow (Ap_1 \ Ap_2 \ \dots \ Ap_n) = (\lambda_1 p_1 \ \lambda_2 p_2 \ \dots \ \lambda_n p_n)$$

より、 p_1, p_2, \dots, p_n は固有ベクトルです。したがって、対角化可能条件は固有ベクトル p_1, p_2, \dots, p_n が線形独立であることです。

7.2.2.2 漸化式の練習問題

漸化式は $\mathbb{R} + \alpha \mathbb{R}$ の §11.3 で議論されています。定数係数の 2 項間連立漸化式

$$\begin{cases} p_{n+1} = ap_n + bq_n & (n = 1, 2, \dots) \\ q_{n+1} = cp_n + dq_n & (p_1, q_1 \text{ は与えられた定数}) \end{cases}$$

を考えましょう。

$x_n = \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$, $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ とおくと, この漸化式は

$$x_{n+1} = Ax_n$$

のように表されます. したがって, 解は, 等比数列を解く要領で,

$$x_n = A^{n-1}x_1 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}^{n-1} \begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \end{pmatrix}$$

となりますね. したがって, A^{n-1} が計算できればこの解は完成します.

それについては, 先の議論で示されたように, A の固有値 α, β およびその線形独立な固有ベクトル a, b があれば, 変換行列 $P = (a \ b)$ を用いて A を対角行列 $D = P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$ に変換できます. すると, $A = PDP^{-1}$ より,

$$\begin{aligned} A^{n-1} &= (PDP^{-1})^{n-1} = (PDP^{-1})(PDP^{-1})\cdots(PDP^{-1}) \\ &= PD^{n-1}P^{-1} = P \begin{pmatrix} \alpha^{n-1} & 0 \\ 0 & \beta^{n-1} \end{pmatrix} P^{-1} \end{aligned}$$

のように計算されます.

それでは連立漸化式の練習問題です. 問: 次の定数係数 2 項間連立漸化式

$$\begin{cases} p_{n+1} = 2p_n - q_n \\ q_{n+1} = -3p_n + 4q_n \end{cases} \quad (n = 1, 2, \dots)$$

を解きなさい. ただし, p_1, q_1 は与えられた定数です.

解答: $x_n = \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$, $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 4 \end{pmatrix}$ とおくと, 漸化式は $x_{n+1} = Ax_n$ と表され, 解は

$$x_n = A^{n-1}x_1 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 4 \end{pmatrix}^{n-1} \begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \end{pmatrix}$$

の形です. A^{n-1} を計算するために, A の固有値 λ と固有ベクトル $p = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \neq \mathbf{0}$ を求めます. 固有値方程式

$$Ap = \lambda p \Leftrightarrow (A - \lambda I)p = \mathbf{0} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 2 - \lambda & -1 \\ -3 & 4 - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

より, 特性方程式 $\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 2 - \lambda & -1 \\ -3 & 4 - \lambda \end{vmatrix} = 0$ が導かれます (なぜかな?). よって, $\lambda^2 - 6\lambda + 5 = 0$ だから $\lambda = 5, 1$ です. $\lambda = 5$ のとき, 固有値方程式

(の1行目) $(2-5)p-1q=0$ より, $\mathbf{p} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix}$. $\lambda=1$ のとき, $(2-1)p-1q=0$ より, $\mathbf{p} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. したがって, $P = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -3 & 1 \end{pmatrix}$ とおけて, $P^{-1} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}$ を得ます. これから $D = P^{-1}AP = \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ が確かめられ,

$$A^{n-1} = (PDP^{-1})^{n-1} = PD^{n-1}P^{-1} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 5^{n-1} + 3 & -5^{n-1} + 1 \\ -3 \cdot 5^{n-1} + 3 & 3 \cdot 5^{n-1} + 1 \end{pmatrix}$$

が得られます. これを $\begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} = A^{n-1} \begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \end{pmatrix}$ に代入して整理すると最終的な解(略)になります.

3項間漸化式(☞『 α 』の§§11.3.3.4)についても同様の議論ができます. 定数係数の隣接3項間漸化式 $p_{n+2} = ap_{n+1} + bp_n$ ($n=1, 2, \dots$) を考えます. これを連立漸化式にするのは簡単で, 単に恒等式 $p_{n+1} = p_{n+1}$ を付け加えるだけで済みます: $\mathbf{x}_n = \begin{pmatrix} p_{n+1} \\ p_n \end{pmatrix}$, $A = \begin{pmatrix} a & b \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ とおくと,

$$\begin{cases} p_{n+2} = ap_{n+1} + bp_n \\ p_{n+1} = p_{n+1} \end{cases} \Leftrightarrow \mathbf{x}_{n+1} = A\mathbf{x}_n$$

が得られるので, 連立漸化式の形になりますね.

それでは練習問題です. 問: 漸化式 $p_{n+2} = 3p_{n+1} + 4p_n$ ($n=0, 1, 2, \dots$) を解きなさい. ただし, p_0, p_1 は与えられた定数とします.

略解: $\mathbf{x}_{n+1} = A\mathbf{x}_n$ ($\mathbf{x}_n = \begin{pmatrix} p_{n+1} \\ p_n \end{pmatrix}$, $A = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$) としますと, $\mathbf{x}_n = A^n \mathbf{x}_0$ より, p_n ($n \geq 2$) は p_0, p_1 で表されます. 特性方程式 $\begin{vmatrix} 3-\lambda & 4 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0$ を解いて固有値 $\lambda = 4, -1$ を得ます. したがって, $\lambda = 4$ の固有ベクトル $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$ は $(3-4)p+4q=0$ より, $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \end{pmatrix}$. 同様に, $\lambda = -1$ の固有ベクトルは $(3+1)p+4q=0$ より, $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. よって, $P = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ とすると, $P^{-1}AP = D = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. したがって, $A = PDP^{-1}$ より

$$A^n = PD^nP^{-1} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 4^{n+1} + (-1)^n & 4^{n+1} - 4(-1)^n \\ 4^n - (-1)^n & 4^n + 4(-1)^n \end{pmatrix}.$$

したがって, $\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ p_n \end{pmatrix} = A^n \begin{pmatrix} p_1 \\ p_0 \end{pmatrix}$ より, $p_n = \frac{1}{5} \{p_1(4^n - (-1)^n) + p_0(4^n + 4(-1)^n)\}$. ($n=1, 2$ などとして, 検算しましょう).

7.2.2.3 固有値が重解の場合の2次行列の n 乗

例として、連立漸化式

$$\begin{cases} p_{n+1} = 4p_n - 2q_n & (n = 0, 1, 2, \dots) \\ q_{n+1} = 2p_n & (p_0, q_0 \text{ は与えられた定数}) \end{cases}$$

を考えましょう。例によって、 $x_n = \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$, $A = \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$ とおくと、この漸化式は $x_{n+1} = Ax_n$ と表され、解は $x_n = A^n x_0$ です。

固有値方程式は $(A - \lambda I)p = \begin{pmatrix} 4-\lambda & -2 \\ 2 & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \mathbf{0}$ ($p = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \neq \mathbf{0}$) で、それより得られる特性方程式 $\begin{vmatrix} 4-\lambda & -2 \\ 2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0$ を解くと、重解の固有値 $\lambda = 2$ が得られます。このとき、固有ベクトル $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$ については、固有値方程式より $(4-2)p - 2q = 0$ だから、 $\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ のみです。したがって、固有ベクトルを並べて得られる変換行列 P は存在せず、 A の対角化はできません。

解 $x_n = A^n x_0$ を求めるには A^n が計算できればよいので、対角化によらない方法を考えましょう。ここでは、特性方程式にケーリー・ハミルトンの定理 (⇨ §6.1.3.5) の応用を求める方法を紹介し (別な方法が §6.1.3.5 に載っています)。

行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ の固有値を $\lambda = \alpha, \beta$ としましょう。その特性方程式は

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a-\lambda & b \\ c & d-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - (a+d)\lambda + (ad-bc) = 0$$

ですね。ところで、この方程式の λ を形式的に行列 A で置き換えたのがケーリー・ハミルトンの定理

$$A^2 - (a+d)A + (ad-bc)I = O$$

でしたね (定数項には I をつける)。さて、固有値 $\lambda = \alpha, \beta$ は特性方程式の解: $(\lambda-\alpha)(\lambda-\beta) = 0$ ですから、解と係数の関係によって、 $a+d = \alpha+\beta$, $ad-bc = \alpha\beta$ が成り立ちます。したがって、ケーリー・ハミルトンの定理は、固有値を用いて、

$$A^2 - (\alpha+\beta)A + \alpha\beta I = O$$

と表すことができます。これは

$$\begin{aligned} A(A - \beta I) &= \alpha(A - \beta I) \\ \Leftrightarrow A(A - \alpha I) &= \beta(A - \alpha I) \end{aligned}$$

のようにも表されます．すると， $(A - \beta I)$ は固有値 α の固有ベクトルのような性質をもち，また $(A - \alpha I)$ は固有値 β の固有ベクトルのような性質をもちますね．したがって，上の等式に A を何回も掛けていくと，

$$\begin{cases} A^k(A - \beta I) = \alpha^k(A - \beta I) \\ A^k(A - \alpha I) = \beta^k(A - \alpha I) \end{cases}$$

が得られます． $\alpha \neq \beta$ のときは， $k = n$ とおいて，辺々引き算をすると A^n を与える公式が得られます：

$$(\alpha - \beta)A^n = \alpha^n(A - \beta I) - \beta^n(A - \alpha I).$$

さて， $\alpha = \beta$ のときはどうでしょうか． $A^k(A - \beta I) = \alpha^k(A - \beta I)$ はその場合

$$A^{k+1} - \alpha A^k = \alpha^k A - \alpha^{k+1} I$$

ですが， $\alpha \neq 0$ として，両辺を α^{k+1} で割ると，

$$\left(\frac{A}{\alpha}\right)^{k+1} - \left(\frac{A}{\alpha}\right)^k = \left(\frac{A}{\alpha}\right) - I$$

が得られます．これは数列でいうと階差 ($\Leftrightarrow \text{§11.1.3.4}$) に当たり，

$$\sum_{k=1}^{n-1} \left(\left(\frac{A}{\alpha}\right)^{k+1} - \left(\frac{A}{\alpha}\right)^k \right) = \left(\frac{A}{\alpha}\right)^n - \frac{A}{\alpha}$$

に注意して，

$$\left(\frac{A}{\alpha}\right)^n - \frac{A}{\alpha} = (n-1) \left(\frac{A}{\alpha} - I\right),$$

したがって， $\alpha = \beta \neq 0$ のときの公式

$$A^n = n\alpha^{n-1}A - (n-1)\alpha^n I$$

が得られます．

この公式を問題となった連立漸化式の場合 $A = \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$ ($\alpha = \beta = 2$) に当てはめると，

$$A^n = \begin{pmatrix} (n+1)2^n & -n2^n \\ n2^n & -(n-1)2^n \end{pmatrix}$$

となります ($n = 1$ として検算する)．これを $\begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} = A^n \begin{pmatrix} p_0 \\ q_0 \end{pmatrix}$ に代入すれば最終的な答が得られます．

A が 2 次の行列の場合は，固有値が重解ならば， A を対角化することはできません．しかしながら，3 次以上の場合には対角化が可能な場合もあります．後の §7.2.3.2 でそのような例を学びましょう．