行列の固有値問題

岡部 洋一

2004 年 10 月 19 日

一般の行列の固有値問題、また、物理や工学でよく現われる Hermite 行列、Unitary 行列、対称行列、直交行列の固有値問題について、知っていると便利な知識を並べておく。

起草: 2000 年 4 月 1 日

"http://dir.itc.u-tokyo.ac.jp/~okabe/ja/docs/index.shtml"
岡部の Web に公開の文書

1 ベクトル空間の基本

ベクトルとは N 個の複素数の組をまとめたものである。通常は複素数を N 行、縦に並べて配置する。これを縦ベクトルと呼び、$\mathbf{a}$ とゴシックで表すことが多い。上から i 番目の数を、ベクトルの第 i 成分と呼ぶ。N 個の複素数を横に並べたものも利用する。これを横ベクトルと呼ぶ。横ベクトルは特に表現法が決まっていないが、縦ベクトルとの関連が多いので、関連する縦ベクトルの右肩に何らかの記号を付して記載することが多い。本稿では縦ベクトルと関連の付け難い横ベクトルを記載することが多いことから、量子力学の世界で Dirac が導入した bracket と呼ばれる記述法を利用する。この方法によると、縦ベクトルは $|a\rangle$、横ベクトルは $\langle a|$ などと表わす。

横ベクトル $\langle x|$ と縦ベクトル $|y\rangle$ の内積を次のように定義する。

$$\langle x|\, y\rangle = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i \tag{1}$$

ここで、左辺は $\langle\ |\ \rangle$ と丁度括弧がバランスしている。この括弧は bracket と呼ばれるが、Dirac はそれを文字って、bracket と名付け、前半の横ベクトルを bra、後半の縦ベクトルを ket と名付けた。本稿では混乱しないように、一々、横ベクトル、縦ベクトルと表現する。一般に bracket 表示では括弧がバランスすると、全体が単なる数、つまりスカラ量になる。

i 番目の成分だけが 1 で、他がすべて 0 なる縦ベクトルを単位ベクトルと呼び $|i\rangle$ と表現する。同様に、$\langle i|$ は横ベクトルの単位ベクトルである。この表現を利用すると、$|x\rangle$ の第 i 成分を次のように現わすことができる。

$$x_i = \langle i|\, x\rangle \tag{2}$$

今後、第 i 成分はすべてこの形で示す。

内積とは、縦ベクトルの成分を線形的に組み合わせてスカラー量を作る作業と理解することもできる。その際の重みが x_i である。このように重み付け加算を N 組用意すると、縦ベクトルから

別の縦ベクトルを作り出すことができる。つまり、重み付け係数を $N \times N$ 個、用意することになる。この係数を $N \times N$ の行と列に並べたものを、行列と呼ぶ。また、行列は通常 A のように大文字で示すことが多いが、本稿では bracket 表示法の一般的な表現である $\widehat{A}$ のように表現する。こうすることで、ベクトルにも行列にも大文字小文字を自由に使える。それどころか、文章を記載することすら可能である。

行列による線形変換の結果は、通常 $A\mathbf{x}$ のように書くが、ここでは $\widehat{A}\,|x\rangle$ と表現する。この結果は縦ベクトルであるが、その 第 i 成分は $\langle i|\,\widehat{A}\,|x\rangle$ と書く。括弧がバランスしていることから、この結果はスカラー量である。

$$\langle i|\,\widehat{A}\,|x\rangle = \sum_{j=1}^{N} A_{ij} x_j \tag{3}$$

$|x\rangle$ として単位ベクトル $|j\rangle$ を代入すると、j 成分のみ 1、つまり $x_i = \delta ij$ であるから、上記から次の式が得られる。

$$\langle i|\,\widehat{A}\,|j\rangle = \sum_{k=1}^{N} A_{ik}\delta_{kj} = A_{ij} \tag{4}$$

つまり、$\widehat{A}$ の ij 成分は $\langle i|\,\widehat{A}\,|j\rangle$ と書ける。今後はこの表現を使う。

この表現を使うと、式 3 は次のように記載することもできる。

$$\langle i|\,\widehat{A}\,|x\rangle = \sum_{j=1}^{N} \langle i|\,\widehat{A}\,|j\rangle\,\langle j|\,x\rangle \tag{5}$$

あるいは、さらに簡略化して、

$$\widehat{A}\,|x\rangle = \sum_{j=1}^{N} \widehat{A}\,|j\rangle\,\langle j|\,x\rangle \tag{6}$$

ここで $\widehat{A}\,|j\rangle$ は、行列 $\widehat{A}$ の第 j 列の成分を示す。

2　縦固有ベクトルと横固有ベクトル

以下に示すように、実対称行列では、固有値は実数、その固有値に対応する固有縦ベクトルと固有横ベクトルは互いに転置の関係になる。また、Hermite 行列では、固有値は実数、その固有値に対応する固有縦ベクトルと固有横ベクトルは互いに転置で複素共役の関係になる。つまり、固有縦ベクトルを $|a\rangle$ とするとき、固有横ベクトルは、実対称行列の場合 $|a\rangle^T$、Hermite 行列の場合、$|a\rangle^\dagger$ と書ける。しかし、一般の行列では、固有横ベクトルが固有縦ベクトルの簡単な形で表わされることは極めて少ない。

固有値問題とは

$$\widehat{A}\,|a\rangle = a\,|a\rangle \tag{7}$$

または

$$\langle a|\,\widehat{A} = \langle a|\,a \tag{8}$$

を満す a および $|a\rangle$ または $\langle a|$ を求めることである。ただし、$\langle a|\,a$ は $a\,\langle a|$ と同じ意味である。

まず、$|a\rangle$ を求めてみよう。通常、上記の問題は、右辺を移項し

$$(\widehat{A} - a\widehat{I})\,|a\rangle = |0\rangle \tag{9}$$

からスタートする。ゼロベクトル以外の縦ベクトル解が得られるためには、左辺の ( ) 内の行列のランクは行列の次数 n より低くなれればいけない。このため、

$$|\,\widehat{A} - a\widehat{I}\,| = 0 \tag{10}$$

が成立するはずである。これから固有値 a が求まる。

一般に、固有値の方程式は n 次の方程式になるので、得られる固有値の総数は行列の次数 n となる。ただし、重根はありうる。固有値一つ一つに対し、式 9 の ( ) 内の行列のランクが n より少ないことから、ゼロベクトルでない固有縦ベクトル $|a\rangle$ が必ず得られる。

また同様にして、ゼロベクトルでない固有横ベクトル $\langle a|$ を求めることができる。

[例 1] 例えば、$\widehat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}$ の場合、固有値は $a = 1, -1$ の二つになる。$a = a_1 = 1$ に対しては $\widehat{A} - a_1\widehat{I} = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 1/2 & -1 \end{pmatrix}$ より、$\langle a_1| = \alpha\,(\,1/2 \quad 1\,)$ と $|a_1\rangle = \dfrac{1}{\alpha}\begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \end{pmatrix}$ が得られる。$a = a_2 = -1$ に対しては $\widehat{A} - a_2\widehat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1/2 & 1 \end{pmatrix}$ より、$\langle a_2| = \beta\,(\,1/2 \quad -1\,)$ と $|a_2\rangle = \dfrac{1}{\beta}\begin{pmatrix} 1 \\ -1/2 \end{pmatrix}$ が得られる。

なお、係数は正規性が成立するように調整してある。また、これらのベクトルの間に直交条件が成立していることは容易に確かめられよう。ここで注意して欲しいのは、$\langle a_1|$ と $|a_1\rangle$ の間には単なる転置とか共役のような簡単な関係が成立していないことである。また、$|a_1\rangle$ と $|a_2\rangle$ の間にも特別な関係は成立しない。成立するのは、異なる固有値に属する固有縦ベクトルと固有横ベクトルの直交関係だけなのである。このように、一般の行列の解ベクトルは、固有縦ベクトルと固有横ベクトルを別途求める必要がある。

$\widehat{A}$ が対称行列の場合は式 7 を転置してみると $\widehat{A}^T = \widehat{A}$ であるから

$$|a\rangle^T\,\widehat{A} = |a\rangle^T\,a \tag{11}$$

となる。これを、式 8 と比較してみると、$|a\rangle^T$ が固有横ベクトル $\langle a|$ として利用できる、つまり

$$\langle a| = |a\rangle^T \tag{12}$$

としてよいことがわかる。

同様に Hermite 行列の場合は、式 7 の転置複素共役をとることにより、$\widehat{A}^\dagger = \widehat{A}$ であるから

$$|a\rangle^\dagger\,\widehat{A} = |a\rangle^\dagger\,a^* \tag{13}$$

となる。これを、式 8 と比較してみると、$a = a^*$ で、かつ $|a\rangle^\dagger$ が固有横ベクトル $\langle a|$ として利用できる、つまり

$$\langle a| = |a\rangle^\dagger \tag{14}$$

としてよいことが導かれる。

さらに Unitary 行列の場合は、式 7 の転置複素共役をとり、左右を入れ換えると、

$$|a\rangle^\dagger\,a* = |a\rangle^\dagger\,\widehat{A}^\dagger \tag{15}$$

これに右から $\widehat{A}$ を掛け、$\widehat{A}^\dagger\widehat{A} = \widehat{I}$ を利用すると

$$|a\rangle^\dagger\,\widehat{A} = |a\rangle^\dagger\,(1/a^*) \tag{16}$$

となる。これを、式 8 と比較してみると、$a = 1/a^*$ で、かつ $|a\rangle^\dagger$ が固有横ベクトル $\langle a|$ として利用できる、つまり

$$\langle a| = |a\rangle^\dagger \tag{17}$$

としてよいことが導かれる。

例に示したように、一般の行列では、$|a\rangle$ と $\langle a|$ は特別な数的関係を持たないが、直交性は成立する。これを、一般的に証明することができる。今、固有値に番号を付け、$a_1, a_2, \ldots, a_n$ とするとき、それぞれの固有縦ベクトルを $|a_1\rangle, \ldots$、固有横ベクトルを $\langle a_1|, \ldots$ としよう。

$$\widehat{A}\,|a_i\rangle = a_i\,|a_i\rangle \qquad\qquad \langle a_i|\,\widehat{A} = \langle a_i|\,a_i \tag{18}$$

$$\widehat{A}\,|a_j\rangle = a_j\,|a_j\rangle \qquad\qquad \langle a_j|\,\widehat{A} = \langle a_j|\,a_j \tag{19}$$

式 18 の右式に右から $|a_j\rangle$ を掛けた式と、式 19 の左式に左から $\langle a_i|$ を掛けた式を比較すると、左辺はまったく等しいから、右辺同士が等しくなる。

$$a_i\,\langle a_i|\,a_j\rangle = a_j\,\langle a_i|\,a_j\rangle \tag{20}$$

したがって、移項すると $a_i \neq a_j$ のとき、つまり $i \neq j$ のとき、次式が成立することがわかる。

$$\langle a_i|\,a_j\rangle \qquad\qquad \text{for } i \neq j \tag{21}$$

これは直交条件である。残る一つの内積 $\langle a_i|\,a_i\rangle$ は、ベクトルの独立性から、当然 0 でないので、これを正規化すれば正規直交条件が成立する。

もう一つ以後の作業に便利な式を誘導しておこう。正規直交性より

$$\begin{pmatrix} \langle a_1| \\ \langle a_2| \\ \cdots \\ \langle a_n| \end{pmatrix} (\,|a_1\rangle\,|a_2\rangle \ldots |a_n\rangle\,) = \widehat{I} \tag{22}$$

であるから、左辺の左の行列と右の行列は互いに逆行列の関係にある。つまり、

$$\widehat{P} = (\,|a_1\rangle\,|a_2\rangle \ldots |a_n\rangle\,) \tag{23}$$

とすると、

$$\widehat{P}^{-1} = \begin{pmatrix} \langle a_1| \\ \langle a_2| \\ \cdots \\ \langle a_n| \end{pmatrix} \tag{24}$$

と書ける。

$$\widehat{P}^{-1}\widehat{P} = \widehat{P}\widehat{P}^{-1} = \widehat{I} \tag{25}$$

であるから、左辺の左右の行列を入れ替えても良い。つまり、

$$\sum_i |a_i\rangle\,\langle a_i| = \widehat{I} \tag{26}$$

という関係が得られる。この関係は完備性と呼ばれる。

この関係を行列 $\widehat{A}$ の右側に挿入すると

$$\widehat{A} = \sum_i \widehat{A} \left| a_i \right\rangle \left\langle a_i \right| = \sum_i \left| a_i \right\rangle a_i \left\langle a_i \right| \tag{27}$$

と表現できる。つまり、固有値と固有ベクトルが与えられている場合、それから逆に行列を生成できる。

[例 2] 固有値と固有ベクトルが勝手に与えられている場合、それを解に持つような行列を作ってみよう。$a_1 = 1$、$a_2 = 0$ とし、$\left| a_1 \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$、$\left| a_2 \right\rangle = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ としてみよう。$\left\langle a_1 \middle| a_2 \right\rangle = 0$ より $\left\langle a_1 \right| = \alpha \left(4 \quad -3 \right)$、正規化を考えると $\alpha = -1/2$ となる。同様に $\left\langle a_2 \right| = \beta \left(2 \quad -1 \right)$、正規化を考えると $\beta = 1/2$ となる。これらを固有解とする行列は式 27 で表現できるから、

$$\widehat{A} = 1 \begin{pmatrix} -2 & 3/2 \\ -4 & 3 \end{pmatrix} + 0 \begin{pmatrix} 3 & -3/2 \\ 4 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 3/2 \\ -4 & 3 \end{pmatrix} \tag{28}$$

が得られる。同様に、$\left\langle a_1 \right|$ と $\left| a_1 \right\rangle$ が自由に与えられているときの行列も簡単に求めることができる。

また、

- 固有値が実数、固有ベクトルが互いに転置の関係にあると対称行列
- 固有値が ± 1、固有ベクトルが互いに転置の関係にあると直交行列
- 固有値が実数、固有ベクトルが互いに転置複素共役の関係にあると Hermite 行列
- 固有値が長さ 1 の複素数、固有ベクトルが互いに転置複素共役の関係にあると Unitary 行列

になることが簡単に証明できる。

3 縮退

多重根の固有値がある場合はちょっとやっかいである。エルミート行列の縮退のように直交した二つの固有ベクトルを選びだすことができる場合もあれば、Jordan 形式にしかできないものもある。例を見てみよう。

[例 3] $\widehat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$ とすると、固有値は $a = 0, \varepsilon$ となる。ここで ε は意識的に縮退を解くように対角成分に入れた小さな量である。$a = a_1 = 0$ の固有ベクトルは $\left\langle a_1 \right| = \left(1 \quad 0 \right)$、$\left| a_1 \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ となる。一方、$a = a_2 = \varepsilon$ の固有ベクトルは $\left\langle a_2 \right| = \left(0 \quad 1 \right)$、$\left| a_2 \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ となる。これらは確かに正規直交系を組んでいる。$\varepsilon \to 0$ とすると、固有値は 0 に縮退するが、固有ベクトルは何ら変わらない。

[例 4] $\widehat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1+\varepsilon \end{pmatrix}$ とすると、固有値は $a = 1, 1+\varepsilon$ となる。$a = a_1 = 1$ の固有ベクトルは $\left\langle a_1 \right| = \left(1 \quad -1/\varepsilon \right)$、$\left| a_1 \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ となる。一方、$a = a_2 = 1+\varepsilon$ の固有ベクトルは $\left\langle a_2 \right| = \left(0 \quad 1 \right)$、

$|a_2\rangle = \begin{pmatrix} 1/\varepsilon \\ 1 \end{pmatrix}$ となる。これらは確かに正規直交系を組んでいる。$\varepsilon \to 0$ とすると、固有値は共に 1 に縮退するが、固有ベクトルは長さを調整すれば、$\langle a_1| \to \langle a_2|$、$|a_1\rangle \to |a_2\rangle$ と同一になってしまう。さらに、正規性を確保しようとすると、二つのベクトルが発散してしまう。発散してしまうベクトルの発散を抑えるように調整すると、今度はもう一つのベクトルが発散してしまう。$\varepsilon \to 0$ の場合には、$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ に独立な縦ベクトル $|a_2'\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ を用意し、$\widehat{P} = \begin{pmatrix} |a_1\rangle & |a_2'\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & a \\ 0 & b \end{pmatrix}$ とし、これの逆行列、$\widehat{P}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -a/b \\ 0 & 1/b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle a_1'| \\ \langle a_2| \end{pmatrix}$ を作成し、これらを使って $\widehat{A}$ を対角化してみよう。

$$\widehat{P}^{-1}\widehat{A}\widehat{P} = \begin{pmatrix} 1 & -a/b \\ 0 & 1/b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & a \\ 0 & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -a/b \\ 0 & 1/b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & a+b \\ 0 & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & b \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{29}$$

と、Jordan 型となる。なお、通常、$b = 1$ と選ばれる。

例 3 の場合は始末がつけやすいが、例 4 の場合は固有ベクトルの数が一個減ってしまったり、固有ベクトルが発散してしまうため、かなりやっかいである。

一般に、縮退した固有値 a に対する変換用縦ベクトルを求めるには、固有ベクトル $|a\rangle$ を一つ求め、それから $(\widehat{A} - a\widehat{I})\,|a'\rangle = |a\rangle$ の関係を利用して、次から次へ縦ベクトルを求めていく。この際、$|a'\rangle$ に条件が課せられることもあるし、$|a\rangle$ に条件が課せられることもある。この手続きで縮退度に対応するだけの縦ベクトルが求まる。例 3 のような場合も同様な手続きで差しつかえないが、一般に複数の自由度が残るはずである。

4　Hermite 行列と Unitary 行列

「執筆中」

5　連続空間と行列の関係

連続空間上の線形微分方程式と行列とは深い関係がある。それは、両者共、固有値問題が存在することからも容易に想像されよう。

連続空間として、簡単のために、$-L/2 \le x \le L/2$ の一次元の有限長区間を考えよう。これを Δx ごとの N 個の区間に区分する。$N = L/\Delta x$ であるとともに、$N \to \infty$ によって、連続空間にすることができる。これにより、左端の番号を N_{min}、右端を N_{max} としよう。$N_{max} - N_{min} = N - 1$ である。

N が奇数のときは、例えば左右対称に、$N_{min} = -(N-1)/2$、$N_{max} = (N-1)/2$ とする。第 i 番目の区間の中心の座標は $i\Delta x$ となる。また、N が偶数の場合には、全区間を半分ずらして設定し、$N_{min} = -N/2 + 1$、$N_{max} = N/2$ とすることにより、番号 i を整数とすることができる。もちろん、これ以外の定義も可である。

この空間上で、関数 $f(x)$ が定義されているものとする。上記各区間の中心点 $x_i = \Delta x\, i$ でのこの関数の値 $f(\Delta x\, i)$ を N 個の要素とするベクトルを定義してみよう。このベクトルを $|f\rangle$ と表わす。

また、この空間で、i 番の一区間のみ値が 1 で、それ以外では 0 となる関数に対応するベクト

ルは、いわゆる単位ベクトルであるが、これを $|i\rangle$ と表わそう。$\langle i|\, f\rangle$ が各中心点における関数の値である。

次に、この連続空間での線形微分方程式を考えてみよう。d/dx は微分のそもそもの定義を利用して、

$$\frac{df(x_i)}{dx} \rightarrow \langle i|\,\widehat{D}\,|f\rangle = \frac{\langle i+1|\, f\rangle - \langle i|\, f\rangle}{\Delta x} \tag{30}$$

ここで、$\widehat{D}$ とは、一階微分に対応する行列を意味する。

あるいは、これを一つ左にずらして計算したもの、あるいはこれらの平均である

$$\frac{df(x_i)}{dx} \rightarrow \langle i|\,\widehat{D}\,|f\rangle = \frac{\langle i+1|\, f\rangle - \langle i-1|\, f\rangle}{2\Delta x} \tag{31}$$

と考えればよい。いずれの定義でも $\Delta x \rightarrow 0$ では d/dx に一致する。

これらはいずれも行列で表現できる。例えば、この最後の定義を採用すると、d/dx は次のような行列で表現できる。これは、$\langle i|\,\widehat{D}\,|f\rangle = \sum_j \langle i|\,\widehat{D}\,|j\rangle\, \langle j|\, f\rangle$ と展開し、辺々を比較してみればよい。

$$\frac{1}{2\Delta x}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & -1 \\ -1 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \tag{32}$$

なお、ここでは周期型境界条件を採用した。つまり、$(N-1)/2$ 番の一番右端の区間のさらに右には、一番左端の $-(N-1)/2$ 番の区間が繋がっており、全体でループを構成しているという境界条件である。この結果、行列の右上に -1、左下に 1 が現われている。$L \rightarrow \infty$ とすると、この影響は無視できるようになる。

二階の微分は一階微分と一つ左の一階微分の差を Δx で割ればよい。

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \rightarrow \frac{\langle i+1|\, x\rangle + \langle i-1|\, x\rangle - 2\,\langle i|\, x\rangle}{\Delta x^2} \tag{33}$$

これも行列で表現することができる。

$$\frac{1}{\Delta x^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & -2 \end{pmatrix} \tag{34}$$

この行列を $\widehat{D^2}$ と記載しよう。

例えば、波動方程式や量子力学でよく現われる次の微分方程式を解くことを考えよう。

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = af \tag{35}$$

この方程式は $-L/2 \leq x \leq L/2$ の有限の領域 (例えば周期型境界条件) で解くと、勝手な a では解けず、ある定まった値の a に対してだけ、解を持つことが知られている。その a のことは固有値、また、そのときの解は固有解と呼ばれる。

このことは、この方程式を行列化してみると一層理解できる。左辺は $\widehat{D^2}$ の行列に変換できるので、次のような問題に変換できる。

$$\widehat{D^2}\,|f\rangle = a\,|f\rangle \tag{36}$$

あるいは、成分に分けて記載すると、

$$\frac{1}{\Delta x^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f_{-(N-1)/2} \\ f_{-(N-1)/2+1} \\ f_{-(N-1)/2+2} \\ \cdots \\ f_{(N-1)/2} \end{pmatrix} = a\begin{pmatrix} f_{-(N-1)/2} \\ f_{-(N-1)/2+1} \\ f_{-(N-1)/2+2} \\ \cdots \\ f_{(N-1)/2} \end{pmatrix} \tag{37}$$

つまり、正に行列の固有値問題になっていることが理解できよう。a は言うまでもなく固有値であり、そのときの非零の解 $|f\rangle$ が固有ベクトル (微分方程式の場合には固有解) である。N が偶数のときには、f のサフィクスが異なるが、以後の結論は変らない。

式 35 を解くには、$f(x) = \exp(sx)$ の形を試行解として解くのがよいことが知られているが、式 37 でも同様で、$< i|f >= \exp(\alpha i)wl$ の形の試行解を利用すると簡単に解ける。これを上式に代入し、各行を $< i|f >= \exp(\alpha i)wl$ で割ると、$N_{max} - N_{min} = N - 1$ を利用して、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta x^2}\left[\exp(\alpha(N-1)) - 2 + \exp(\alpha)\right] &= a \\ \frac{1}{2\Delta x^2}\left[\exp(-\alpha) - 2 + \exp(\alpha)\right] &= a \\ \frac{1}{2\Delta x^2}\left[\exp(-\alpha) - 2 + \exp(\alpha)\right] &= a \\ &\cdots \\ \frac{1}{2\Delta x^2}\left[\exp(-\alpha) - 2 + \exp(-\alpha(N-1))\right] &= a \end{aligned} \tag{38}$$

が得られる。

ここで面白いのは、最初と最後の式を除いて、すべて同じ式になることである。したがって、全部で三式になってしまう。また最初の式と中間の式は

$$\exp(\alpha N) = 1 \tag{39}$$

とすると完全に一致してしまう。この条件が成立するときには、最後の式も中間の式と一致する。つまり、上の沢山の式は、この条件と中間の式にまとめられることがわかる。条件式を満すには、$\alpha = 0$ であればよいが、それ以外にも

$$\alpha N = i2\pi I \qquad\qquad N_{min} \le I \le N_{max} \tag{40}$$

の場合に成立する。右辺の i は複素単位であるが、サフィックスの i と区別して欲しい。これ以外の I でももちろんよいが、実はこの範囲の I が作る複素数と一致してしまうので、この範囲に限定した。なお、N 偶数のときには、$-N/2 + 1 \le I \le N/2$ とする。

これで、固有値問題が解けたことになるのであるが、ピンと来ないかも知れないので、まとめておく。

$$\begin{aligned} &\text{固有値：}\ a_I = \frac{1}{\Delta x^2}\cos\frac{2\pi I}{N} \\ &\text{固有ベクトル：} < i|I >= \frac{1}{\sqrt{N}}\exp\left(i\frac{2\pi I i}{N}\right) \\ &\text{ただし}\ N_{min} \le I \le N_{max} \end{aligned} \tag{41}$$

ただし、固有ベクトルの式で、exp のすぐ後の i のみ複素単位、その他の i は場所の i である。さらに、固有ベクトルは正規化定数 $1/\sqrt{N}$ が掛けてある。言うまでもないことであろうが、この固有解は N 個存在する。

このように、線形微分方程式と行列が、無数の共通点を持つことが、線形性という言葉だけでなく、まったく本質的に同じ概念としてまとめられることが明らかになったであろう。

6 停留値問題

次式の極値を求める問題を、行列の停留値問題という。

$$\langle f|\,\widehat{A}\,|f\rangle \tag{42}$$

この値は $|f\rangle$ の絶対値を小さくすれば、いくらでも小さくできるので、

$$\langle\, f|\, f\rangle \tag{43}$$

の値を一定という条件での極値である。あるいは、同じことを

$$\frac{\langle f|\,\widehat{A}\,|f\rangle}{\langle\, f|\, f\rangle} \tag{44}$$

の停留値を求めると言う表現をとることもある。

条件付きの極値問題を解くには、前半の表現に対し、Lagrange の方法を利用するのが一般的である。これは

$$I = \langle f|\,\widehat{A}\,|f\rangle - \lambda\,\langle\, f|\, f\rangle \tag{45}$$

として、f を微小変更したとき δI が変化しない条件を求めればよい。

$$\delta I = \langle \delta f|\,\widehat{A}\,|f\rangle - \lambda\,\langle \delta f|\, f\rangle + \langle f|\,\widehat{A}\,|\delta f\rangle - \lambda\,\langle\, f|\,\delta f\rangle \tag{46}$$

この式から直ちに、次の二式が誘導できる。

$$\widehat{A}\,|f\rangle - \lambda\,|f\rangle = 0 \tag{47}$$

$$\langle f|\,\widehat{A} - \lambda\,\langle f| = 0 \tag{48}$$

これらを見ると、λ を固有値とする縦固有値問題と横固有値問題になっているのが、見てとれよう。つまり停留値問題の答は、固有値問題の答と一致する。

三次元の行列では、この作業の結果 $ax^2 + by^2 + cz^2$ のような式が得られる。これは座標軸の方に軸を持つ楕円体である。もし $a > b > c > 0$ であったとすると、x 軸方向に長く、z 軸方向に扁平な楕円体となる。$(\,\pm 1 \quad 0 \quad 0\,)$ は最大値を与え、$(\,0 \quad 0 \quad \pm 1\,)$ は最小値を与える。$(\,0 \quad \pm 1 \quad 0\,)$ は原点から見るとやはり垂直な面を構成しているが、前者よりは小さく、後者よりは大きい、つまり最大とか最小といった極ではない。こうした点を停留といい、二次元の楕円では発生しない状態である。本節でなぜ停留値問題といって極値問題といわなかったかが理解できよう。

7 変分法

力学の世界でよく用いられる方法の一つとして、変分法というのがある。これは質点の軌跡 $x(t)$ をいろいろ変化し、その軌跡で与えられるある関数 L の積分を計算する。すると、この積分の極値を与える軌跡が実際の運動の際の軌跡となるというものである。

$$I = \int_{t_0}^{t_f} dt\ L(\dot{x}(t), x(t)) \tag{49}$$

この積分を経路積分という。この被積分関数 L を Lagrangian と呼び、軌道を表わす $x(t)$ だけでなく、その時間微分 $\dot{x}(t)$ の関数にもなっている。なお、以後 $x(t)$ などは、式の簡略化のために単に x などと記載する。

自由度が一つの運動の場合、T を運動エネルギー、U を位置エネルギーとして L は次のように定義される。

$$L = T(\dot{x}, x) - U(x) \tag{50}$$

例えば、重力下の質点の場合、$T = m\dot{x}^2/2$、$U = mgh$ である。

変分法を式で書くと、軌道を色々変えることを $x(t) + \delta x(t)$ で表し、

$$\delta I = \int_{t_0}^{t_f} dt\ L(\dot{x} + \delta\dot{x}, x + \delta x) - \int_{t_0}^{t_f} dt\ L(\dot{x}, x) \tag{51}$$

を計算し、$\delta x(t)$ に対し $\delta I = 0$ となるための $x(t)$ を求める極値問題を解こうというものである。この計算の結果、運動方程式に対応する Lagrange 方程式と呼ばれる微分方程式が得られるというのが変分法の骨子である。

変分法では、変化させるのは関数であって単純な変数ではないので、ちょっとやっかいな仕事である。本書に興味のある人は、すでに変分法の原理を読んで、さらにその取り扱いの複雑さに困っていると思われるので、通常の変分法の原理は後へ回すことにして、ここでは、別の方法で同じ結果を示そうと思う。時間を離散化することにより、関数を有限変数に置き換えることにより、同じ結果を誘導しよう。

連続時間を考える代わりに、$t = t_0$ から $t = t_f$ を N 等分する。$t_N = t_f$ である。また、軌道は $t = t_i (i = 0, \ldots, N)$ において、$x = x_i$ をとるという形で表現する。こうすることにより、変分法を $N - 1$ 個の独立変数 x_i の極値問題とすることができるのである。もちろん、I は x_i の線形な関数ではないので、行列的扱いはできないが、(時間) 空間の離散化ということで、本書でまとめて述べることにした。

ここで $\dot{x}_i = (x_{i+1} - x_i)/\Delta t$ と近似すると、$L((x_{i+1} - x_i)/\Delta t, x)$ とできる。これらを用いると経路積分は次のように定義でき、確かに N 個の x_i の関数となる。

$$I = \sum \Delta t\ L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t}, x_i\right) \tag{52}$$

したがって、この停留値問題の答は $\delta x_0 = \delta x_N$ の条件で、$\partial I/\partial x_i$ をすべて 0 とすることで求められる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial (I/\Delta t)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\cdots + L\left(\frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta t}, x_{i-1}\right) + L\left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t}, x_i\right) + \cdots\right] \\
&= \frac{1}{\Delta t}\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right|_{x = x_{i-1}} - \frac{1}{\Delta t}\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right|_{x = x_i} + \left.\frac{\partial L}{\partial x}\right|_{x = x_i} = 0
\end{aligned} \tag{53}$$

ここで $\Delta t \to 0$ とし、全体の符号反転すると、Lagrange 方程式と呼ばれる微分方程式が得られる。

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \tag{54}$$

さらに L に $T - U$ を代入すると、簡単に運動方程式に対応する微分方程式が得られる。

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \tag{55}$$

実際に重力下の質点の $T=m\dot{x}^2/2$ と $U=mgx$ を代入すると

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial T}{\partial x}-\frac{\partial U}{\partial x}=\frac{d(m\dot{x})}{dt}-mg=0 \tag{56}$$

となり、Newton の運動方程式と一致する式が得られる。

なお、変分法の結果を使うことが本当に便利なのは、運動を極座標などで表した場合である。単振子の軌道は xy 座標で表わすより θ を使う方が楽であるが、そうすると運動方程式が立てにくい。しかし、変分法により得られた Lagrange 方程式を用いると、簡単に運動方程式が得られる。$T=ma^2\dot{\theta}^2/2$、$U=-mg\cos\theta$ であるから、

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}}\right)-\frac{\partial T}{\partial x}-\frac{\partial U}{\partial x}=\frac{d(ma^2\dot{\theta})}{dt}-mg\sin\theta=0 \tag{57}$$

また、自由度が増えても、同じようにして運動方程式が得られる。例えば、単振子の先にさらに単振子のついたような二重振子の問題などは、$\partial T/\partial x$ も現われ、この方法によると圧倒的に簡単に運動方程式が得らえる。

さて、力学では変分法そのものを使うかというと、それは極めて稀である。大部分の問題では、変分法により導かれた Lagrange 方程式そのものを利用することが多い。しかし、経路積分の変分法による考え方は量子力学でも利用されるなど、この概念を知っていることは決して無駄ではない。

最後に、どの書籍にも出ている、連続系のままでの Langrange 方程式を誘導を示しておこう。まず L の変動を計算する。

$$L(\dot{x}+\delta\dot{x},x+\delta x)=L(\dot{x},x)+\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\delta\dot{x}+\frac{\partial L}{\partial x}\delta x \tag{58}$$

したがって

$$\delta I=\int_{t_0}^{t_f}dt\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\delta\dot{x}+\frac{\partial L}{\partial x}\delta x\right) \tag{59}$$

ここで最初の項に対して、$\delta\dot{x}$ の時間による積分が δx であることを利用して部分積分を適用する。

$$\delta I=\left.\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\delta x\right|_{t_0}^{t_f}+\int_{t_0}^{t_f}dt\left[-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)\delta x+\frac{\partial L}{\partial x}\delta x\right]=0 \tag{60}$$

このうち、第 1 項は t_0 と t_f で δx が 0 であるから 0 となる。また次の積分は δx を括り出すと、括弧内が常に 0 でなければならないことが誘導され、結局、Lagrange 方程式が誘導できる。