固有値と固有ベクトルがディープに出現しすぎる件 *

青山学院大学 理工学部　　西山 享

2016/04/10

1　あなたの人生で一番大切なものはなんですか？

と突然聞かれても困ってしまうが，数学において一番重要なものは何ですか？と聞かれたら，どうだろう.「数学で一等重要なもの．それは定義です」と即答する人はあまりいないかもしれない [1]．ふつうは「定理や公式が一番大切（だって名前がついてるもの）」と考えがちだが，多くのものを生み出す定義は，美しい定理に勝る．その，定義の重要性を実感できる一番よい例が線型代数である．

行列やその演算規則から始まり，ベクトル空間，線型写像の導入 [2]，そして行列式，核と像の定義へとすすんで，最奥の部分に位置するのが固有値と固有ベクトルであろう．初等的な教育ではまったく学習しない新しい概念のオンパレードで，それらがお互いに美しく結びつき合い，有効に機能することを目の当たりにして感動する $\cdots$ はずなのだが，まぁ，実際には，新しい定義ばっかりで，苦労する人も多いと察する．そこで,「なんで定義が大事なの？」という人のために，固有値を例にとって定義の役割 (のほんの一面) をちょっと見てみよう．

2　固有値とはなんだろう?

n 次の正方行列 A を考えよう．つまり数字が $n \times n$ の正方形状に並んだ行列だ．すぐに n は 2 とか 3 になる予定なので，当面は一般の n で我慢して欲しい．また n 次の列ベクトル [3] の全体を $\mathbb{C}^n$ と書く．

定義 1. ゼロでないベクトル $v \in \mathbb{C}^n$ に対して，$Av = \lambda v$ となるような複素数 $\lambda \in \mathbb{C}$ が存在するとき，λ を A の固有値，v を固有値が λ の固有ベクトルという．

これが固有値と固有ベクトルの定義である．それだけ？もちろんそれだけだ．定義はシンプルなものに限る．

最低限の事項をチェックしておくと，固有ベクトルはゼロではないということ，そして，固有値と固有ベクトルはかならず組になって現れるということである．固有値は固有ベクトルからただ一つ決まるが，固有ベクトルは固有値から決まるわけではない．実際，v が固有ベクトルなら，$v' = 2v$ だって固有ベクトルである．また $A = 1_n$ が単位行列 [4] なら，ゼロでないベクトルはすべて固有値が 1 の固有ベクトルである．

さて，v を固有値 λ の固有ベクトルとすると，定義式 $Av = \lambda v$ を変形して，$(\lambda 1_n - A)v = 0$ を得る．v はゼロでないから，行列 $\lambda 1_n - A$ は正則でなく，したがって，その行列式は $\det(\lambda 1_n - A) = 0$ を満たす．そこで

$$\Phi_A(t) = \det(t 1_n - A)$$

とおき，これを A の固有多項式と呼ぶ．固有多項式は実際に，文字 t に関する n 次の多項式であって

$$\begin{aligned}\Phi_A(t) &= t^n - (\operatorname{trace} A)\, t^{n-1} + \cdots \\ &\quad + (-1)^{n-1}\Big(\sum_{i=1}^{n} \det A_{i,i}\Big)\, t + (-1)^n \det A\end{aligned}$$

の形をしている．ただし $\operatorname{trace} A$ は A のトレース [5]，$A_{i,i}$ は A から第 i 行と第 i 列を除いた $(n-1)$ 次の小行列である．以上より，次の定理が成り立つことがわかる．

定理 2. 行列 A の固有値 λ は固有多項式 $\Phi_A(t)$ の根である．

実は，この定理の逆が成り立つ．つまり，λ が A の固有値であることと，固有多項式 $\Phi_A(t)$ の根であることは同値である．だから，理論上は「固有値とは，固有多項式の根である」と言ってもよく，実際に,「固有値とは何ですか」という問いに対して「固有方程式の解です」という答えもよく耳にする．

この答は，間違ってはいない．

しかし，数学者なら誰もそれを定義として採用しようとは思わないだろう．そこからはよい数学は生まれてこない．

*数学セミナー 2016 年 06 月号「特集 ◎ 線形代数の質問箱」原稿

[1] 筆者以外に少なくともこの世に一人はいることは，よく知っている．

[2] 一次写像ともいう．英語だと linear map でまさしく “直線” 写像．

[3] タテベクトルともいう．

[4] 単位行列は E_n と書いたり，I_n と書いたりするが，ここでは 1_n，あるいは単に 1 と書く．

[5] 跡ともいう．$\operatorname{trace} A = \sum_{i=1}^{n} a_{i,i}$.

3　スペクトルと波動関数

量子力学によれば，水素原子の電子は次のシュレディンガー方程式に従っている ([1, § 19-1])．

$$-\Big(\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\frac{e^2}{\|x\|}\Big)v(x)=Ev(x) \tag{1}$$

ここで $\hbar$ はプランク定数，m は電子の質量，e は電荷，とまぁ，ここまでは実はどうでもよく，単なる [6] 定数である．$\Delta=\partial_1^2+\partial_2^2+\partial_3^2$ はラプラシアン，$x\in\mathbb{R}^3$ は陽子を原点とした座標で，要するに括弧内の第 2 項はクーロン・ポテンシャルである．ここで，式 (1) の左辺，$-(\cdots)$ の部分を A と思ってみよう．ついでに x は省略する．

$$Av=Ev$$

A はいわゆる微分作用素で線型写像である．E は (なんと) 水素原子のエネルギーをあらわし，スペクトルとも呼ばれる．

もちろん諸君は，もう E の正体をご存じだろう．そう，A の固有値である．その正体はエネルギーだった [7]．もうおわかりだと思うが，エネルギーを根に持つ固有多項式は存在しない [8]．$v=v(x)$ は水素電子の波動関数 (固有関数とも言う) をあらわしている．固有多項式は固有値を決めるが，固有ベクトルまで与えてくれない [9]．

固有値と固有ベクトルをセットに，そして，A が行列でなくても機能する定義が我々には必要である．

4　とはいえ行列が大切

話が原子の世界までぶっ飛びすぎた．行列に戻ろう．簡単のために 2 次の正方行列

$$A=\begin{pmatrix}1&2\\3&2\end{pmatrix}$$

を考える．固有多項式 $\Phi_A(t)$ は

$$\det(t1_2-A)=\begin{vmatrix}t-1&-2\\-3&t-2\end{vmatrix}=(t-4)(t+1)$$

だから，その根 $\lambda=-1,4$ が固有値である．固有ベクトルは $v=\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$ に関する連立一次方程式 $(\lambda 1_2-A)v=0$ を解いて

$$u=\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},\qquad v=\begin{pmatrix}2\\3\end{pmatrix}$$

であることがわかる．正確には，固有値が -1 の固有ベクトルは u の定数倍，固有値が 4 の固有ベクトルは v の定数倍だが，一般に，固有ベクトルは固有空間 $\mathrm{Ker}(\lambda 1_n-A)$ に属する (非ゼロの) ベクトルのことであり [10]，その基底がわかれば十分である．その意味で，固有ベクトルをたずねられたら，固有空間の基底を答えるのが古来からの美しい習慣である．

この例の場合，$\{u,v\}$ は $\mathbb{C}^2$ の基底であるから，任意のベクトル $w\in\mathbb{C}^2$ は $w=au+bv$ $(a,b\in\mathbb{C})$ のように一次結合で書ける．すると Aw は

$$Aw=A(au+bv)=aAu+bAv=(-1)au+4bv \tag{2}$$

のように，係数 a,b をそれぞれ，(-1) 倍，4 倍するだけで計算できる．同様にして，べき乗は

$$A^kw=(-1)^kau+4^kbv \tag{3}$$

となる．つまり，固有値と固有ベクトルさえ分かっていれば，A のべき乗を計算することは容易である．

さて，(3) を見ると，$k\to\infty$ としたときの A^kw の漸近挙動が見えてくる．式 (3) で $b=0$ なら，A^kw は周期 2 の周期運動をする．しかし，もっとも一般の場合には $b\neq 0$ だから，この場合には 4^k の項が効いて，A^kw は無限大に発散する．一般に，固有値の絶対値が 1 より大きいか小さいかは，固有ベクトル方向の漸近挙動を左右する大切な情報である．

べき乗だけでなく，多項式 $p(t)$ に $t=A$ を代入すると

$$p(A)w=p(-1)au+p(4)bv \tag{4}$$

となることが分かる．また，逆行列も

$$A^{-1}w=\frac{1}{(-1)}au+\frac{1}{4}bv$$

のようにあらわされる．これは $p(t)=1/t$ に $t=A$ を代入することに相当するが，もっと一般に次の定理が成り立つ．

定理 3. A が逆行列を持つことと，その固有値がすべてゼロでないことは同値である．また，A の固有値を λ，対応する固有ベクトルを v とすれば，v は逆行列 A^{-1} の固有値 λ^{-1} の固有ベクトルでもある．

さらに突き詰めていけば，$p(t)$ が t の分数式のときも (4) が成り立つことを示すことができる．$p(t)$ がたとえ指数関数や，三角関数などの解析関数であっても，行列 A を代入して $p(A)$ を考えることが，これで可能になる．このように固有値 (スペクトル) を

[6] もちろん，本当はどうでもよくない，物理的には重要な．
[7] いまの場合は．
[8] 本当はそうでもないけど，そうしておく．
[9] 本当はそうでもない．人生はそう簡単じゃない．
[10] $\mathrm{Ker}\,T$ は行列，あるいは線型写像 T の核をあらわす．
[11] 固有値とスペクトルは少し違う．例えば [5, § 2.2] 参照．

用いて，行列や一般の線型写像の解析関数を自由に計算し，その漸近挙動などを論じること をスペクトル解析と呼ぶ [11]．固有値と固有ベクトルの計算はスペクトル解析への第一歩である．

5　行列の対角化と固有値

式 (4) は，通常の基本ベクトル $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2$ の代わりに u, v を基底にとれば，A の作用がこの 2 つの方向への定数倍 (伸縮) に分解されることを示している．実際，

$$P = (u, v) = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 3 \end{pmatrix}$$

とおくと，P は正則であり，

$$\begin{aligned} AP &= A(u, v) = (Au, Av) = ((-1)u, 4v) \\ &= (u, v)\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} = P\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

だから，P^{-1} を左から両辺に掛けることによって

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

と対角行列に変形できる．これを行列 A の対角化と呼ぶ．

逆に，対角化ができれば，いままでの式変形を逆にたどって，対角線上に並んだ数値が固有値であり，行列 P の各列ベクトルが対応する固有ベクトルになることがわかる．P は正則だから，その列ベクトルは基底をなし，その結果，固有ベクトルからなる基底が得られることに注意しよう．

結局，式 (2) と対角化，および固有値・固有ベクトルを求めることは互いにほぼ同値である．ここで "ほぼ" と言ったのは，一般の行列 A に対し，固有ベクトルからなる空間の基底が存在するとは限らないという事情による．このときは，ジョルダン標準形の理論が必要になる [12]．

6　固有ベクトルが見つからない？

今度は，平面の回転行列

$$R_\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

を考えよう．簡単のために $\theta \notin \mathbb{Z}\pi$ とする．さて，R_θ の表す平面上の一次変換 $\varphi_\theta(v) = R_\theta v \ \ (v \in \mathbb{R}^2)$ は原点中心，角度 θ の回転である．

R_θ の固有ベクトルを考えてみよう．固有ベクトルは，行列を掛けると定数倍になるようなベクトルなので，そのベクトルの方向は一次変換 φ_θ によって変化しない．ところが，平面上の回転はすべての方向をいっせいに変えてしまうので，$\mathbb{R}^2$ の中で勝負している限り固有ベクトルは見つからない．

今度は固有値を求めてみる．定理 2 により固有値は固有多項式

$$\Phi_{R_\theta}(t) = t^2 - 2\cos\theta\, t + 1$$

の根である．2 次式は必ず根を持つから，固有値は存在する [13]．したがって，定義により，もちろん固有ベクトルは存在する! 固有値と固有ベクトルは常に組になって現れることを思い出そう．

この場合，固有方程式の解は $t = \cos\theta \pm i\sin\theta = e^{\pm i\theta}$ となって，複素数である．では固有ベクトルはどうだろう? それには $R_\theta v = e^{\pm i\theta} v$ という連立一次方程式を解けばよく，計算を実行すると，$v = \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$ が固有ベクトルとして求まる．複素数の範囲で探さないと固有ベクトルは見つからない [14]．

回転行列の場合，固有ベクトルが回転角によらず，一定であることは興味深い．複素平面において $e^{i\theta}$ を乗ずることは偏角を θ だけ増加させる回転移動と見なされるので，R_θ は二つの複素平面における角度 $\pm\theta$ の回転の影のようなものと思うこともできる．

7　もっと複素数

複素数は自然にはあり得ない数であるとか，想像上の数，便宜上の数と考えられがちであるが，行列を扱っていると複素数は自然に立ち現れてくる．次の形の行列を考えてみよう．

$$Z = \begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix} \quad (a, b \in \mathbb{R}) \tag{5}$$

この Z に複素数 $a + ib$ を対応させ，

$$W = \begin{pmatrix} c & -d \\ d & c \end{pmatrix} \quad (c, d \in \mathbb{R})$$

に複素数 $c+id$ を対応させてみると，行列の和 $Z+W$ や積 ZW は対応する複素数の演算と全く同じであることが確認できる．読者はぜひ計算を実行してみて欲しい．他にも，逆行列や累乗，定数倍，複素共役

[12] 例えば [6], [2] や拙著 [3] を参照して欲しい．

[13] たとえ n 次式になっても状況は変わらない．複素数を係数とする n 次の代数方程式は重複度を込めて n 個の複素数根を持つ (ガウス)．しかし，一方で，その根を具体的に求めることは難しい問題である．

[14] 一般に，固有値が実数であれば固有ベクトルは $\mathbb{R}^n$ から選べるが．固有値が虚数であれば $\mathbb{R}^n$ では見つからない．教授陣の親心によって，大学の演習問題では，固有値が整数や，難しくても分数になるものが多いので，固有ベクトルの成分も有理数である．一般に，固有ベクトルは行列の成分が生成する体に固有多項式の根を添加して得られる拡大体に成分を持つ．

なども行列の言葉ですべて言い表わすことができる．行列の成分には実数しか出てこないのに，行列で計算するとまったく複素数と同じ振る舞いをする．だから，Z は複素数 $a+bi$ の行列による実現である[15]．

では Z の固有値と固有ベクトルはなんだろうか？諸君はもう複素数の固有値に恐れを抱いてはいないと思う．計算してみるとすぐわかるように，固有値は $a \pm bi$，そして対応する固有ベクトルは $\begin{pmatrix} 1 \\ \mp i \end{pmatrix}$ である (複号同順)．だから Z は a, b の値によらず $P = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix}$ により同時対角化されて，

$$P^{-1} Z P = \begin{pmatrix} a+bi & 0 \\ 0 & a-bi \end{pmatrix}$$

となる．つまり Z は複素数 $a+bi$ とその複素共役を同時に考えたものであり，固有値として複素数を内包している．

8　微分とラプラシアンの指数関数

次に，微分作用素の固有値と固有関数を考えてみよう．いろいろと微妙な点も生ずるので，単位円周上の微分

$$D = \frac{d}{d\theta} : C^\infty(S^1) \to C^\infty(S^1)$$

を考える．ここで $S^1 = \{(\cos\theta, \sin\theta) \mid \theta \in \mathbb{R}\}$ は単位円周であり，$f(\theta) \in C^\infty(S^1)$ は周期が 2π の無限階微分可能な θ の関数である．

D はベクトル空間 $C^\infty(S^1)$ 上の線型写像であるから，固有値・固有ベクトルを考えることができる．定義 1 によると

$$Df(\theta) = f'(\theta) = \lambda f(\theta)$$

を満たすような $\lambda \in \mathbb{C}$ と関数 $f(\theta) \in C^\infty(S^1)$ が D の固有値と固有ベクトルである．

つまり，$f(\theta)$ は微分方程式 $y' = \lambda y$ の解で，これはよく知られているように $f(\theta) = e^{\lambda\theta}$ の定数倍である．λ は複素数だが，$\lambda = \alpha + i\beta$ と書いておくと

$$f(\theta) = e^{(\alpha+i\beta)\theta} = e^{\alpha\theta}(\cos\beta\theta + i\sin\beta\theta).$$

しかし，$f(\theta)$ の周期は 2π であるから，$\alpha = 0$ かつ $\beta \in \mathbb{Z}$ でなければならない．つまり固有値は $\lambda = in$ $(n \in \mathbb{Z})$ の形でなければならない．固有関数 (固有ベクトル) は $f(\theta) = e^{in\theta}$ である．

少し難しくなるが，円周上の C^∞ 級関数は $\{e^{in\theta} \mid n \in \mathbb{Z}\}$ の一次結合によって一様に近似される．つまり任意の関数は

$$f(\theta) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} c_n e^{in\theta} \quad (c_n \in \mathbb{C})$$

と書ける (フーリエ級数展開)．こう書いておくと，(抽象的な意味での) 微分は簡単である．

$$D^k f(\theta) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} c_n (in)^k e^{in\theta}.$$

これは微分作用素の対角化に他ならないが，すでに解説したスペクトル解析の手法で，微分 D の指数関数も計算してみよう．$a \in \mathbb{R}$ に対して

$$\begin{aligned} e^{aD} f(\theta) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^k}{k!} D^k f(\theta) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} c_n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(ian)^k}{k!} e^{in\theta} \\ &= \sum_{n\in\mathbb{Z}} c_n e^{ian} e^{in\theta} = \sum_{n\in\mathbb{Z}} c_n e^{in(\theta+a)} \\ &= f(\theta+a) \end{aligned} \tag{6}$$

つまり微分作用素の指数関数は平行移動である!

さて，この式を逆方向から眺めると，平行移動の固有値と固有関数も見えてくる．単位円周上において，偏角を $a \in \mathbb{R}$ だけ平行移動すると

$$\tau_a f(\theta) = f(\theta + a) \quad (\theta \in \mathbb{R})$$

という線型写像 $\tau_a : C^\infty(S^1) \to C^\infty(S^1)$ が得られる．これが式 (6) の右辺であって，その中間項がまさしく平行移動を固有関数の一次結合を用いて表した式になっている．その第 n 項をみると，

$$\tau_a e^{in\theta} = e^{ina} e^{in\theta}$$

だから，$\lambda = e^{ina}$ が固有値，$v = e^{in\theta}$ が対応する固有ベクトルである．

9　一変数多項式環の表現

最後にまた行列へと話を戻そう．n 次正方行列 A を考える．多項式 $f(x)$ に対して，線型写像 $f(A)$ を対応させることで，多項式環の $\mathbb{C}^n$ 上の表現を得る．

一般に多項式環の既約表現は一次元であり，それは複素数 $\lambda \in \mathbb{C}$ を代入することで得られる．つまり $f(x) \mapsto f(\lambda) \in \mathbb{C}$ が既約表現である[16]．

さて，A が固有ベクトルからなる基底 $\{v_j \mid 1 \leq j \leq n\}$ を持ち，それぞれ固有値 λ_j を持つとすると，スペクトル解析の手法を応用して

$$f(A)\Big(\sum_{j=1}^{n} c_j\, v_j\Big) = \sum_{j=1}^{n} c_j\, f(\lambda_j) v_j \tag{7}$$

[15] もう少し正確に言うと，式 (5) は，実数体上の多元環としての，$\mathbb{C}$ の $\mathbb{R}^2$ における 2 次元表現である．

[16] かなり大げさに言えば，これはヒルベルトの零点定理 (弱形) である．

となる．これは一次元の部分空間 $\mathbb{C}v_j$ が，λ_j に対応する既約表現であることを意味している．つまり，固有ベクトルによる分解は多項式環の表現の既約分解を与えている[17].

ついでに付け加えると，固有多項式に対しては $\Phi_A(\lambda_j) = 0$ だから，式 (7) によって $\Phi_A(A) = 0$ であることが分かる．これをケイリー・ハミルトンの公式と呼ぶ．したがって，多項式環の表現は商環 $\mathbb{C}[x]/(\Phi_A(x))$ を経由して得られており，この多元環の分解が上の既約分解に対応している．

このように，固有値・固有ベクトルの懐は深いが，ここで紹介したのはそのほんの入り口にしか過ぎない．線型作用素 A の連続性も考慮にいれると，固有値の概念を拡張して，スペクトルの定義を「連続な逆作用素 $(\lambda 1 - A)^{-1}$ が存在しないような λ」とするのがよい[18]．定義からどのような数学が生まれてくるか．それを決めるのはあなたである．

References

[1] Richard Phillips Feynman, Robert B. Leighton, Matthew Sands, (砂川重信訳). 量子力学. ファインマン物理学 / ファインマン, レイトン, サンズ [著], No. 5. 岩波書店, 1986.

[2] 佐武一郎. 線型代数学. 数学選書, No. 1. 裳華房, 2015.

[3] 西山享. ジョルダン標準形 : 行列の標準形と分解をめぐって : 重点解説. 臨時別冊・数理科学, . SGC ライブラリ ; 77. サイエンス社, 2010.

[4] 洲之内治男. 関数解析入門. サイエンスライブラリ理工系の数学, No. 10. サイエンス社, 改訂, 1994.

[5] 中村周. 量子力学のスペクトル理論. 共立講座 21 世紀の数学, No. 26. 共立出版, 2012.

[6] 斎藤正彦. 線型代数入門. 基礎数学, No. 1. 東京大学出版会, 第 41 刷, 1996.

[7] 堀田良之. 加群十話 : 代数学入門. すうがくぶっくす, No. 3. 朝倉書店, 1988.

[17] ジョルダン標準形は直既約分解に対応する．詳しくは [7] 参照．

[18] 例えば [4, § 4.2]，あるいは前掲 [5] 参照．

*) 原稿を読んで貴重なコメントをくれた石井遼くんに感謝する．