14 エルミート共役

内積空間における線型作用素については、内積に由来するさまざまな数値的情報を利用することで、より強力な取り扱いが可能となる。その内容は、代数というよりは解析的であり、一方で量子論的でもあり、合わせて量子解析的とでもいうべく、いわゆる線型代数の枠に収まりきらないのが何とも悩ましい。世間の教科書も、この内積空間における作用素の扱いが引き気味で、もどかしい限り。量子論の数学的形式を避けての正しい扱いは難しいと思いつつも、まずは無難なところから始めよう。

内積空間の間の線型写像 $\phi : V \to W$ に対して、線型写像 $\varphi : W \to V$ で、$(w|\phi v) = (\varphi w|v)$ $(v \in V, w \in W)$ となるものを、ϕ の**エルミート共役**[*93](hermitian conjugate) とよび、$\varphi = \phi^*$ と表記する。エルミート共役は存在すれば一つしかない。実際、ψ も ϕ のエルミート共役であったとすると、$(\psi w|v) = (w|\phi v) = (\varphi w|v)$ がすべての $v \in V$ で成り立つので、$0 = (\psi w - \varphi w|v)$ で $v = \psi w - \varphi w$ とおけば、$\psi w = \varphi w$ $(w \in W)$。

例 14.1. 列ベクトル空間における標準的な内積に関して、行列を左から掛けることで得られる線型写像のエルミート共役は、行列のエルミート共役に他ならない。実際、$A \in M_{m,n}(\mathbb{C})$ と $v \in \mathbb{C}^n$, $w \in \mathbb{C}^m$ に対して、

$$(w|Av) = w^*Av = (A^*w)^*v = (A^*w|v).$$

エルミート共役をとる操作は共役線型であり、行列のエルミート共役と共通する代数関係をみたす。たとえば、

$$(\varphi\psi)^* = \psi^*\varphi^*, \quad (\phi^*)^* = \phi$$

であり、ϕ がエルミート共役をもつ同型写像であれば、ϕ^* も同型写像で $(\phi^{-1})^* = (\phi^*)^{-1}$ が成り立つ。

命題 14.2. 有限次元内積空間 V から内積空間 W への線型写像 ϕ はエルミート共役をもつ。

Proof. V の正規直交基底 $\{e_1, \cdots, e_n\}$ をとってきて、線型作用素 $\varphi : W \to V$ を $\varphi(w) = \sum(\phi(e_k)|w)e_k$ で定めると、

$$(\varphi(w)|v) = \sum(w|\phi(e_k))(e_k|v) = (w|\phi\Big(\sum e_k(e_k|v)\Big)) = (w|\phi(v)).$$

□

例 14.3. $v \in V$ を線型写像 $\mathbb{C} \ni \lambda \mapsto \lambda v \in V$ と同一視すれば、そのエルミート共役 $v^* : V \to \mathbb{C}$ は、$v^* : v' \mapsto (v|v') \in \mathbb{C}$ となる。とくに、$v^*w = (v|w)$ であり、$wv^* : V \to V$ は、線型作用素 $V \ni v' \mapsto w(v|v') = (v|v')w \in V$ を表す。物理ではこれを $|w)(v|$ のように書くのであった[*94]。

また、標準内積空間 $\mathbb{C}^n$ から内積空間 V への線型写像を V^n の元 $a = (a_1, \cdots, a_n)$ と同一視すれば、a のエルミート共役 $a^* : V \to \mathbb{C}^n$ は、

$$a^* = \begin{pmatrix} a_1^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{pmatrix} : v \mapsto \begin{pmatrix} (a_1|v) \\ \vdots \\ (a_n|v) \end{pmatrix}$$

のように表される。

問 14.1 (*). 内積空間から 1 次元内積空間 $\mathbb{C}$ への線型写像でエルミート共役をもたないものを作れ。

[*93] ほかに随伴 (adjoint) という数学業界特有のよび方もある。フランス語（もとはラテン語）に由来し、joined to の意味。
[*94] Dirac notation というのだが、元は Gibbs の dyad であり、さらには Grassmann まで遡ることはあまり知られていない。

定義 14.4. 内積空間から内積空間への同型写像 $\phi : V \to W$ で、$(\phi(v)|\phi(v')) = (v|v')$ $(v, v' \in V)$ となるものをユニタリー写像 (unitary[*95] map) という。ユニタリー写像にかかわる 2 つの内積空間は、内積空間として同じ構造をもつことになり、等距離同型である (isometrically isomorphic) とよばれる。

命題 14.5. 内積空間から内積空間への線型写像 $\phi : V \to W$ がユニタリー写像となるための必要十分条件は、$\phi^* = \phi^{-1}$ であること。

命題 14.6. 有限次元内積空間から内積空間への線型写像 $\phi : V \to W$ について、次は同値。

(i) ϕ はユニタリーである。

(ii) V の正規直交基底 $e_1, \cdots, e_n$ で $\phi(e_1), \cdots, \phi(e_n)$ が W の正規直交基底となるものが存在する。

(iii) V の勝手な正規直交基底 $e_1, \cdots, e_n$ に対して、$\phi(e_1), \cdots, \phi(e_n)$ が W の正規直交基底となる。

系 14.7. 2 つの有限次元内積空間が等距離同型であるための必要十分条件は、次元が一致すること。

問 14.2. ($\sharp$) 以上の命題と系を示せ。こういうことは言われなくても自分で確かめるようになりたい。

例 14.8. 内積空間 V の正規直交基底 $(e_1, \cdots, e_n)$ とユニタリー写像 $\Phi : \mathbb{C}^n \to V$ とは、関係 $\Phi(\delta_j) = e_j$ $(1 \leq j \leq n)$ により一対一に対応する。ここで、δ_j は $\mathbb{C}^n$ の基本ベクトルを表している。以前の例で導入した記号を使えば、

$$\Phi = \begin{pmatrix} e_1^* \\ \vdots \\ e_n^* \end{pmatrix}$$

であり、線型作用素 $\phi : V \to V$ の行列表示 A を

$$\begin{pmatrix} e_1^* \\ \vdots \\ e_n^* \end{pmatrix} (\phi e_1, \ldots, \phi e_n) = \begin{pmatrix} e_1^* \\ \vdots \\ e_n^* \end{pmatrix} (e_1, \ldots, e_n) A = \begin{pmatrix} e_1^* e_1 & \ldots & e_1^* e_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ e_n^* e_1 & \ldots & e_n^* e_n \end{pmatrix} = I_n A = A$$

のように表すこともできる[*96]。

補題 14.9 (分極等式 polarization identity)**.** 実内積空間においては、等式

$$4(w|v) = (v + w|v + w) - (v - w|v - w)$$

が、複素内積空間においては、等式

$$4(w|v) = \sum_{k=0}^{3} i^k (v + i^k w | v + i^k w)$$

が成り立つ。

Proof. 内積空間における等式 $2(v|w) + 2(w|v) = (v + w|v + w) - (v - w|v - w)$ を使うと、

$$\sum_{k=0}^{3} i^k (v + i^k w | v + i^k w) = 2(v|w) + 2(w|v) + 2i((v|iw) + (iw|v)) = 4(w|v).$$

□

[*95] unit からの派生語で、単位ベクトルを単位ベクトルに移すことに由来する。しかし無限次元ではそれだけから同型はでない。

[*96] 双対空間を導入して、こういった計算を形式的かつ徹底的に行うことも可能。付録参照。

系 14.10. 内積空間 V から内積空間 W への線型写像 ϕ について、すべての $v \in V$ で $\|\phi(v)\| = \|v\|$ ならば、$(\phi(v)|\phi(v')) = (v|v')$ $(v, v' \in V)$ が成り立つ。

Remark 9. 複素ベクトル空間 V の 2 つのベクトル $v, w \in V$ に複素数 $[v, w]$ を対応させる関数で、v について共役線型、w について線型なものを**両線型形式** (sesquilinear form[97]) という。両線型形式で $\overline{[v, w]} = [w, v]$ となるものを**エルミート形式** (hermitian form) という。分極等式は両線型形式について成り立ち、それを使えば、両線型形式がエルミート形式になる条件を $[v, v] \in \mathbb{R}$ $(v \in V)$ と言い換えることができる。

命題 14.11. 有限次元内積空間 V における線型変換 ϕ について、次は同値。

(i) すべての $v \in V$ で $\|\phi(v)\| = \|v\|$.
(ii) すべての $v, w \in V$ で $(\phi(v)|\phi(w)) = (v|w)$.
(iii) $\phi^* = \phi^{-1}$.
(iv) ϕ は正規直交基底を正規直交基底に移す。

Proof. (i) $\Longleftrightarrow$ (ii) および (ii) $\Longleftarrow$ (iii) $\Longleftrightarrow$ (iv) は既にわかっている。(ii) を仮定すると、ϕ は V の正規直交基底を V の正規直交系に移し、V が有限次元であるから、後者も正規直交基底となって (iv) が従う。 □

上の同値な条件を満たす線型変換を、実内積空間の場合は**直交変換** (orthogonal[98] transformation)、複素内積空間の場合は**ユニタリー変換** (unitary transformation) と呼ぶ。行列の場合は、直交行列、ユニタリー行列という言い方をする。また、その条件 ${}^tTT = I$, $U^*U = I$ をそれぞれ書いてみると、$\mathbb{R}^n$ または $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底を並べたものに他ならず、両者は表裏一体の関係にあることがわかる。

命題の内容を行列表示で形式的に書いてみることも可能で、内積空間 V の 2 つのの正規直交基底 $e = (e_1, \cdots, e_n)$, $f = (f_1, \cdots, f_n)$ に対して、

$$fe^* = (f_1, \cdots, f_n) \begin{pmatrix} e_1^* \\ \vdots \\ e_n^* \end{pmatrix} = f_1 e_1^* + \cdots f_n e_n^*$$

は V のユニタリー変換 ϕ を定め、一方、ϕ の行列表示は、

$$f^*e = \begin{pmatrix} f_1^*e_1 & \dots & f_1^*e_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_n^*e_1 & \dots & f_n^*e_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (f_1|e_1) & \dots & (f_1|e_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (f_n|e_1) & \dots & (f_n|e_n) \end{pmatrix}$$

で与えられる。これがユニタリー行列であることは、$(f^*e)^*(f^*e) = e^*ff^*e = e^*e = I$ のように形式的に確かめることもできる。

問 14.3. ユニタリー行列の複素共役および転置は、再びユニタリー行列である。

問 14.4. ユニタリー行列の行列式の絶対値は 1 である。とくに、直交行列の行列式の値は ± 1 である。

問 14.5. 奇数次の直交行列 T は、行列式の値 $\tau = \det(T)$ を固有値にもつ。
ヒント： 等式 ${}^tT(\tau I_n - T) = -\tau^t(\tau I_n - T)$。

[97] sesqui = 1+ 1/2 ということなので勘定が合わぬ。両の字の妥当性は関数解析の注に書いたので、ここでは繰り返さない。
[98] 正しくは orthonormal とよぶべきではあるが、まあいい加減なものである。

例 14.12.

(i) 実数 $\alpha, \beta, \gamma, \theta$ に対して、

$$\begin{pmatrix} e^{i\alpha}\cos\theta & -e^{-i\gamma}\sin\theta \\ e^{-i\beta}\sin\theta & e^{-i(\alpha+\beta+\gamma)}\cos\theta \end{pmatrix}$$

はユニタリー行列。とくに、$\alpha = \beta = \gamma = 0$ のときは、回転の行列 (§16 参照) である。

(ii) n 次の並換 $\sigma = (\sigma(j))_{1\le j\le n}$ に対して、行列

$$T = (e_{\sigma(1)}, \cdots, e_{\sigma(n)}) = (\delta_{j,\sigma(k)})_{1\le j,k\le n}$$

は直交行列である。とくに**巡回置換**[*99](cyclic permutation) $\sigma = (2, 3, \ldots, n, 1)$ の場合、

$$T = \begin{pmatrix} 0 & \ldots & 0 & 1 \\ 1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \ddots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

である。これを巡回行列とよぶ。

問 14.6. 上の例以外に、2 次のユニタリー行列はあるか。

問 14.7. 巡回行列 T の冪 T^k $(k = 2, 3, \ldots, n)$ を具体的に表示せよ。

$T^* = T$ となる作用素 (行列) を実の場合は**対称作用素／行列** (symmetric operator/matrix)、複素の場合は**エルミート作用素／行列** (hermitian operator/matrix) と称える。また、$T^*T = TT^*$ となるものを**正規作用素／行列** (normal operator/matrix)[*100]とよぶ。直交行列、ユニタリ一行列、エルミート行列、これらはすべて正規行列の仲間である。

Remark 10.

(i) エルミート行列の和も差もエルミート行列であるが、エルミート行列の積がエルミート行列になるための条件は、積が交換すること。

(ii) ユニタリー行列の積はユニタリー行列となるが、ユニタリー行列の和がユニタリー行列になることは稀である。

例 14.13.

(i) 3 次のエルミート行列の形は

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c \\ \overline{b_1} & a_2 & b_2 \\ \overline{c} & \overline{b_2} & a_3 \end{pmatrix}.$$

ここで、a_j は実数、他は複素数を表す。

(ii) 2 次のエルミート行列の作る実ベクトル空間の基底として、Pauli のスピン行列

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

に単位行列 I_2 を加えたものを取ることができる。パウリ行列はユニタリー行列でもある。

[*99] 巡換と書いて「めぐりかえ」と読みたいところではあるが、さすがにちょっと。

[*100] またもや正規である。良い性質の行列ぐらいの意味であるが、他に呼び方はないものか。

問 14.8. ($\sharp$) エルミート行列全体は、実ベクトル空間をなす。その次元を求めよ。

問 14.9. ベクトル $\overrightarrow{a} = (a_1, a_2, a_3) \in \mathbb{R}^3$ に対して、$\sigma \cdot \overrightarrow{a} = a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3$ とおくと、

$$(\sigma \cdot \overrightarrow{a})(\sigma \cdot \overrightarrow{b}) = (\overrightarrow{a}|\overrightarrow{b})I_2 + i\sigma \cdot (\overrightarrow{a} \times \overrightarrow{b}).$$

命題 14.14. *内積空間 V の部分空間への正射影 E は、エルミートな射影(すなわち $E^2 = E = E^*$) である。逆に、エルミートな射影 E に対して、E は部分空間 $W = EV$ への正射影である。*

Proof. V における射影 E と V の直和分解 $V = EV \oplus (I-E)V$ が対応するので、$E^* = E \iff EV \perp (I-E)V$ がわかればよい。$(Ev|(I-E)w) = (v|(E^* - E^*E)w)$ より、直交性は $E^* = E^*E$ と言い換えられるので、前提 $E^2 = E$ の下、これが $E^* = E$ と同値であることは見易い。 □

例 14.15. 内積空間 $\mathbb{C}^2$ は、量子力学を組み立てる上での基本素材とでも言うべきもので、その部分空間の記述を調べておくことは基本的な意味をもつ。自明でない部分空間は 1 次元であるので、$\mathbb{C}\binom{1}{w} = \mathbb{C}\binom{w^{-1}}{1}$ のように、拡大複素数 $w \in \overline{\mathbb{C}} = \mathbb{C} \cup \{\infty\}$ で識別される。これに応じて、1 次元射影も

$$E = \frac{1}{1+|w|^2}\begin{pmatrix} 1 & \overline{w} \\ w & |w|^2 \end{pmatrix}$$

のように、$w \in \overline{\mathbb{C}}$ を使って記述される。この対応で、直交補空間をとる操作 $E \mapsto I_2 - E$ は、複素数の反転 $z \mapsto -1/\overline{w}$ に相当することに注意。

一方で、エルミート行列 E の表示を

$$E = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+z & x-iy \\ x+iy & 1-z \end{pmatrix}, \quad x, y, z \in \mathbb{R}$$

のように変更し、これが正射影を表すための条件 $E^2 = E$ を書いてみると $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ となるので、$\overline{\mathbb{C}}$ は座標球面と同定されることになる。この意味で、$\overline{\mathbb{C}}$ は複素球面と呼ばれる。球面の極 $(0, 0, \pm 1)$ がそれぞれ $w = 0, \infty$ に対応している。

問 14.10. E とパウリ行列の関係を考察せよ。

問 14.11. 直和分解 $V = V_1 \oplus \cdots \oplus V_r$ が直交分解であるための必要十分条件は、対応するすべての射影 E_i が正射影となることである。

命題 14.16.

(i) エルミート行列 (とくに実対称行列) の固有値は実数。
(ii) ユニタリー行列 (とくに直交行列) の固有値は、絶対値 1 の複素数。

Proof. この証明は簡単で楽しい。$Av = \lambda v$ とすると、$A^* = A$ であれば、$\lambda(v|v) = (v|Av) = (A^*v|v) = (Av|v) = \overline{\lambda}(v|v)$ から、$\lambda = \overline{\lambda}$.

$A^* = A^{-1}$ であれば、$A^{-1}v = \frac{1}{\lambda}v$ に注意して、$\overline{\lambda}(v|v) = (Av|v) = (v|A^{-1}v) = \frac{1}{\lambda}(v|v)$ より、$|\lambda| = 1$. □

問 14.12. ($\sharp$) 行列

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

の固有値を求めよ。

問 14.13. ユニタリー行列 U と単位行列 I の和がユニタリー行列であれば、U の固有値は $e^{\pm 2\pi i/3}$ の形である。

補題 14.17 (Schur)**.** 任意の行列は、ユニタリ行列により三角行列[*101] *(triangular matrix)* に相似変形できる。

Proof. 行列のサイズ n の大きさに関する帰納法。サイズが $n-1$ の行列に対しては正しいと仮定する。いま、サイズが n の行列 A に対して、A の固有値 α とその固有ベクトル $\vec{u}$ を1組選び、$\vec{u}_1 = \vec{u}/\|\vec{u}\|$ を含む正規直交基底 $(\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_n)$ を用意すると、

$$A(\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_n) = (\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_n) \begin{pmatrix} \alpha & * \\ 0 & B \end{pmatrix}$$

という表示が得られる。ただし B はサイズが $n-1$ の行列である。こうして得られた行列 B に帰納法の仮定を適用すると、サイズが $n-1$ のユニタリー行列 T で、T^*BT が（サイズ $n-1$ の）三角行列となるものが存在する。そこで、サイズが n のユニタリー行列を

$$U = (\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_n) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & T \end{pmatrix}$$

で定めると、U^*AU は三角行列となってめでたい。 □

定理 14.18 (Schur-Toeplitz)**.** 正規行列はユニタリー行列で対角化できる。逆にそのような行列は正規行列である。

Proof. 逆の方はすぐにわかるので、順の方を示す。まず、正規行列 A とユニタリー行列 U に対して、行列 U^*AU は再び正規行列になることに注意する。

そこで、三角行列 B に対して、

$$BB^* = B^*B \iff B \text{ は対角行列}$$

を示せば証明が完了する。これは左方を具体的に計算してみるとわかる。 □

Remark 11. ここではできるだけ手っ取り早い証明を与えたが、もっと自然な方法は、行列が線型作用素の表示形式であることと、下の固有ベクトルの性質、および直交分解を組み合せたものである。付録 C を参照。

問 14.14. 2つのユニタリー行列 U, V の和 $U+V$ が再びユニタリー行列になる場合について調べよ。

問 14.15. 次の形のブロック行列が正規であれば、$B=0$ である。ただし、A, C は正方行列とする。

$$\begin{pmatrix} A & B \\ 0 & C \end{pmatrix}.$$

次の固有ベクトルに関する正規行列の性質も重要である。

命題 14.19. 正規行列 A に対して、

(i) $A\vec{x} = \lambda\vec{x}$ ならば、$A^*\vec{x} = \overline{\lambda}\vec{x}$ である。
(ii) $A\vec{x} = \lambda\vec{x}$, $A\vec{y} = \mu\vec{y}$ $(\lambda \neq \mu)$ であるならば、$\vec{x}$ と $\vec{y}$ は直交する。

[*101] ここで扱われるのは上三角行列と呼ばれるもので、対角線よりも下の成分がすべて 0 の行列をいう。

Proof. (i) は、
$$0 = ((A-\lambda I)\overrightarrow{x}|(A-\lambda I)\overrightarrow{x}) = ((A^*-\overline{\lambda}I)\overrightarrow{x}|(A^*-\overline{\lambda}I)\overrightarrow{x})$$
からわかる。（2つ目の等号で、$AA^* = A^*A$ を使う。）

(ii) は (i) に注意して、
$$\mu(\overrightarrow{x}|\overrightarrow{y}) = (\overrightarrow{x}|A\overrightarrow{y}) = (A^*\overrightarrow{x}|\overrightarrow{y}) = \lambda(\overrightarrow{x}|\overrightarrow{y})$$
による。 □

問 14.16. 実正規行列 A の固有値 λ の固有ベクトル v に対して、ベクトル空間 $\mathbb{C}v + \mathbb{C}\overline{v}$ は、A 及び A^* で不変であり、したがってその直交補空間も不変であることを示せ。

正規行列の対角化の手続き

ステップ1　固有値と固有空間を求める。
ステップ2　各固有空間ごとに正規直交基底を定める。
ステップ3　固有空間ごとの正規直交基底を並べてできるユニタリー行列が正規行列の対角化を実現する。

ステップ1で、固有方程式から固有値を求め、しかる後に固有空間を計算するのは効率が悪いため、直接、固有ベクトル方程式を解くことで、固有値と固有空間を同時に求めるのがよい場合もある。

例 14.20.

(i) 回転の行列 (§ 16 参照) の対角化。
$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} = e^{\mp i\theta}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}.$$

(ii) 巡回行列の固有値と固有ベクトル。これは直接固有ベクトル方程式を解くのがよい。
$$T\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \iff \begin{pmatrix} x_n \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{n-1} \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \iff x_k = \lambda^{-k}x_n, \lambda^n = 1.$$

(iii) A 型グラフの隣接行列の固有値と固有ベクトル。
$$\begin{pmatrix} x_2 \\ x_1 + x_3 \\ \vdots \\ x_{n-2} + x_n \\ x_{n-1} \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} \iff x_{j-1} + x_{j+1} = \lambda x_j (2 \le j \le n-1), x_2 = \lambda x_1, x_{n-1} = \lambda x_n$$
これは、3項間漸化式 $x_{k-1} + x_{k+1} = \lambda x_k$ $(k \ge 1)$ を初期条件 $x_0 = 0$ の下で解いて、終期条件 $x_{n+1} = 0$ を課せばよい。特性二次方程式 $t^2 - \lambda t + 1 = 0$ の解を $q^{\pm 1}$ とすれば、$\lambda = q + q^{-1}$ であり、$x_k = q^k - q^{-k}$ $(1 \le k \le n)$ に終期条件を課すことで、$q^{2n+2} = 1$ となる。これから、$q = \pi il/(n+1)$ $(1 \le l \le n)$ に応じて $\lambda = 2\cos\frac{\pi l}{n+1}$ を固有値とする固有ベクトル $x_k/2i = \sin\frac{\pi kl}{n+1}$ $(1 \le k \le n)$ を得る。

問 14.17. (♯) パウリ行列をユニタリー行列で対角化せよ。

次の命題は、今までに用意した定理・方法を組み合せることで、困難なく示される。

命題 14.21. 実対称行列は直交行列によって対角化される。

問 14.18. 何をどう組み合せるとよいのか考えて、証明にまとめる。

問 14.19. 実対称行列

$$\begin{pmatrix} \cos(2\theta) & \sin(2\theta) \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) \end{pmatrix}$$

を対角化する直交行列を求めよ。

正規作用素 A の互いに異なる固有値を $\{\alpha_j\}$ とし、固有空間 V_{α_j} への正射影を E_j とすると、$I_V = \sum_j E_j$ は直交分解を与え、$A = \sum_j \alpha_j E_j$ となる。この表示を A の**スペクトル分解**[*102](spectral decomposition) と称する。これは、固有ベクトルの選び方の任意性を排除した表示であり、無限次元内積空間に移行しやすい形になっている。

最後に、次の二次形式とも関係してくるエルミート行列の正値性について触れておこう。エルミート性の特徴づけは、分極等式のところでも注意した。他の性質は、エルミート行列の固有値が実数であることと、ユニタリー行列による対角化を使えば、難なくわかる。もはや練習問題に過ぎない。

命題 14.22. 内積空間 V における線型作用素 H がエルミートでるための必要十分条件は、すべての $v \in V$ に対して $(v|Hv)$ が実数であること。そしてこのとき、H の最大固有値・最小固有値はそれぞれ、

$$\max\{(v|Hv); v \in V, |v| = 1\}, \quad \min\{(v|Hv); v \in V, |v| = 1\}$$

に一致する。

定理 14.23. 有限次元内積空間 V における作用素 H について、(i)–(iii) は同値。さらに、(iv)–(vi) も同値。

(i) すべての $v \in V$ に対して $(v|Hv) \geq 0$ である。
(ii) $H = A^*A$ となるような V における線型作用素 A が存在する。
(iii) H はエルミートで、そのすべての固有値は正または零。
(iv) すべての $0 \neq v \in V$ に対して $(v|Hv) > 0$ である。
(v) $H = A^*A$ となるような V における線型作用素 A で逆をもつものが存在する。
(vi) H はエルミートで、そのすべての固有値は正。

前半の同値な条件を満たすエルミート作用素を**正値**[*103](positive semidefinite) あるいは簡単に**正**である (positive) という。後半のより強い条件を満たすエルミート作用素を**正定値** (positive definite) という。

系 14.24. 列ベクトル空間 $\mathbb{C}^n$ 上の内積と n 次正定値行列は一対一に対応する。また、列ベクトル空間 $\mathbb{R}^n$ 上の内積と n 次正定値実行列も一対一に対応する。

[*102] ラテン語の spectrum に由来。狭義には分光学における周波数成分を意味するが、背景にある何かから見える形で現れ出たもの全般をさす。量子論の発展に伴い周波数成分の情報がエルミート作用素の固有値と認識され、それが数学用語として転用される。

[*103] 半正定値とも呼ばれる。この正負にかかわる用語は、洋の東西問わず、どうにも不自由である。非負 (non-negative) のような言い方は見苦しいだけでなく、論理的にも問題がある。いっそのこと、零も含めて正とよび、零を含めない正は別の言い方、例えば真正とか、にした方が幸せかも知れない。実際、作用素解析方面では、そのような使い方になっている。