

行列のスペクトル分解

ここで扱う行列はエルミート (自己共役) 行列である.

$A = A^* \in M_n(\mathbb{C})$ とする. このとき A の固有値は実数であり

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$$

と並べ各固有値に対し

$$Ax_i = \lambda_i x_i \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

となる $x_i (\neq 0) \in \mathbb{C}^n$ がとれる. エルミート行列の異なる固有値の固有ベクトルは直交するので

$$(x_i | x_j) = x_j^* x_i = \delta_{ij}$$

となるように選ぶことができる.

これを行列の形で表すと

$$A \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

$\{x_i\}$ の選び方から

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix}$$

はユニタリ行列であるから

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{pmatrix} \\ &= \lambda_1 x_1 x_1^* + \lambda_2 x_2 x_2^* + \cdots + \lambda_n x_n x_n^* \end{aligned}$$

となる. ここで $P_i = x_i x_i^* \in M_n(\mathbb{C})$ ($i = 1, 2, \dots, n$) とおくと

$$A = \lambda_1 P_1 + \lambda_2 P_2 + \cdots + \lambda_n P_n$$

となり

$$\begin{aligned}P_i^2 &= x_i x_i^* x_i x_i^* = P_i \\P_i^* &= (x_i x_i^*)^* = x_i x_i^* = P_i \\P_i P_j &= x_i x_i^* x_j x_j^* = 0 \quad (i \neq j)\end{aligned}$$

を満たす. **これを行列 A のスペクトル分解**という. スペクトル分解が得られれば

$$A^n = \lambda_1^m P_1 + \lambda_2^m P_2 + \cdots + \lambda_n^m P_n$$

と m 乗を求めることなどができる.

例 1(1) 固有値 -1 の固有ベクトル $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, 固有値 2 の固有ベクトル $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 固有値 3

の固有ベクトル $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -2 \end{pmatrix}$ であるエルミート行列 A は以下ようになる.

$$\begin{aligned}A &= -1 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \\&\quad + 3 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{-1}{\sqrt{6}} \\ \frac{-2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{6}} & \frac{-2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \\&= -1 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{-1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{-1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} + 3 \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{-1}{6} & \frac{-1}{3} \\ \frac{-1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ \frac{-1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \\&= \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{-5}{3} & \frac{-1}{3} \\ \frac{-5}{3} & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{-1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{8}{3} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

(2) 固有値 -2 の固有ベクトルが $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$, 固有値 3 の固有ベクトルが $\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$

であるエルミート行列 A は以下になる.

$\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ が生成する線形空間から 2 つの直交ベクトルを選ぶ. 例えば $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ など, シュミットの直交化法を用いるのも一つの方法である.

$$\begin{aligned} A &= -2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} - 2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ &\quad + 3 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{-2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \\ &= -2 \begin{pmatrix} \frac{5}{6} & \frac{1}{3} & \frac{-1}{6} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{-1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{5}{6} \end{pmatrix} + 3 \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{-1}{3} & \frac{1}{6} \\ \frac{-1}{3} & \frac{4}{3} & \frac{-5}{3} \\ \frac{1}{6} & \frac{-1}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{-7}{6} & \frac{-5}{3} & \frac{5}{6} \\ \frac{-5}{3} & \frac{4}{3} & \frac{-5}{3} \\ \frac{5}{6} & \frac{-5}{3} & \frac{-7}{6} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

行列が無限次元になると固有値がスペクトルというより広い概念に変わり, スペクトルは無限集合になることもある. 行列は射影の一次結合で表されたが, 無限次元では無限和 = 積分として表されることになる. その準備として行列の場合にも積分形の表示がどうなるかを見ておくことにする.

まづ**行列の順序**を導入する.

$$A \geq 0 \Leftrightarrow A \text{ は半正值行列}$$

$$\Leftrightarrow A = A^*, A \text{ の固有値は } 0 \text{ 以上}$$

$$\Leftrightarrow \forall x \in \mathbb{C}^n, (Ax | x) \geq 0$$

2 つのエルミート行列 A, B に対して $B - A \geq 0$ のとき $A \leq B$ と表す. これが順序

関係であることは

$$\begin{aligned} A = B &\Leftrightarrow \forall x, y \in \mathbb{C}^n, (Ax \mid y) = (Bx \mid y) \\ &\Leftrightarrow \forall x \in \mathbb{C}^n, (Ax \mid x) = (Bx \mid x) \end{aligned}$$

よりわかる. 直交射影 P, Q については

$$\begin{aligned} P \leq Q &\Leftrightarrow PQ = P = QP \\ &\Leftrightarrow Q - P \text{ は直交射影} \end{aligned}$$

となる.

直交射影の族 $\{E_\lambda\}_{\lambda \in \mathbb{R}}$ が以下の条件を満たすとき **スペクトル族** という.

$$(1) \ E_{-\infty} = 0, \ E_{+\infty} = 1$$

$$(2) \ \lambda \leq \mu \Rightarrow E_\lambda \leq E_\mu$$

$$(3) \ \forall x \in \mathbb{C}^n, \lim_{\lambda \rightarrow \mu-0} E_\lambda x = E_\mu x$$

例えば例 1(1) の行列のスペクトル分解をもとに

$$\begin{aligned} A &= -1 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{-1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{-1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} + 3 \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & \frac{-1}{6} & \frac{-1}{3} \\ \frac{-1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ \frac{-1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \\ &= -1P_{-1} + 2P_2 + 3P_3 \end{aligned}$$

次のようなスペクトル族を構成することができる.

$$E_\lambda = \begin{cases} 0 & \lambda \leq -1 \\ P_{-1} & -1 < \lambda \leq 2 \\ P_{-1} + P_2 & 2 < \lambda \leq 3 \\ P_{-1} + P_2 + P_3 = 1 & \lambda > 3 \end{cases}$$

このスペクトル族を用いて Stieltjes 積分を考えてみる. つまり

$$\forall x \in \mathbb{C}^n, \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_\lambda x$$

今の場合だとスペクトル族 $\{E_\lambda\}$ は $\lambda \leq -1$, $\lambda > 3$ で変化がないので, 上の積分は $t_0 \leq -1$, $t_n > 3$ である分割 $t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_n$ に対し, 和

$$t_1(E_{t_1} - E_{t_0})x + t_2(E_{t_2} - E_{t_1})x + \cdots + t_n(E_{t_n} - E_{t_{n-1}})x$$

の分割の幅を 0 に近づけた極限で定義される. $t_i < t_{i+1}$ が $-1, 2, 3$ を挟んでいないときは

$$E_{t_{i+1}} - E_{t_i} = 0$$

となり, 分割の幅がどんどん狭くなることから

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_\lambda x = -1P_{-1}x + 2P_2x + 3P_3x = Ax$$

となる. このスペクトル族を用いた Stieltjes 積分はスペクトル分解になっていることがわかる. 無限次元の作用素のときには, スペクトル分解としてスペクトル族を用いた Stieltjes 積分で表すことを考えることになる.

練習問題 例 1(2) をもとにスペクトル族 $\{F_\lambda\}$ を構成し

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dF_\lambda$$

とできることを確かめよ.