

(i) 行列 A の固有値は以下の方程式の解です:

$$0 = \det(A - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda \end{pmatrix}. \quad (6)$$

右辺の行列式を基本変形すると

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & 1 & 1 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} -\lambda - 1 & 0 & 1 + \lambda \\ 0 & -\lambda - 1 & 1 + \lambda \\ 1 & 1 & -\lambda \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$= (\lambda + 1)^2 \det \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -\lambda \end{pmatrix} \quad (8)$$

$$= (\lambda + 1)^2 \det \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 - \lambda \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$= (\lambda + 1)^2 (2 - \lambda) \quad (10)$$

となります。なお、式 (7) では行列の3行目を1行目と2行目から引いています。式 (8) では1行目と2行目から $\lambda + 1$ を括りだしています。式 (9) では1列目と2列目を3列目に足し込んでいます。最後に式 (10) で行列式を計算しています。

以上から、固有値が $2, -1, -1$ であることがわかります。固有値 $\lambda_1 = 2$ は縮退しておらず、固有値 $\lambda_2 = \lambda_3 = -1$ が縮退しています。

(ii) 固有値 $\lambda_1 = 2$ の固有ベクトルの成分を仮に

$$\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \quad (11)$$

とすると、 $(A - \lambda_1 I)\vec{u}_1 = \vec{0}$ から

$$\begin{aligned} -2u + v + w &= 0 \\ u - 2v + w &= 0 \\ u + v - 2w &= 0 \end{aligned} \quad (12)$$

です。足し引きすることによって $u : v : w = 1 : 1 : 1$ となるべきことがわかります。なお、式 (12) は3つの条件式があるように見えますが、実質的に条件式は2つしかなく、した

がって3つの変数の比しか求まりません。これは当然で、固有ベクトルは定数倍しても固有ベクトルであることに代わりはないからです。以上の考察から

$$\vec{u}_1 \propto \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (13)$$

であることがわかります。

次に規格化を行います。式(13)のベクトルは長さが $\sqrt{1^2+1^2+1^2}=\sqrt{3}$ なので、それで全体を割れば長さ1に規格化できます。つまり

$$\vec{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (14)$$

です。

(iii) まず、ベクトル \vec{u}_2 と \vec{u}_3 に行列 A をかけると、それぞれ

$$A\vec{u}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} = (-1)\vec{u}_2, \quad (15)$$

$$A\vec{u}_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = (-1)\vec{u}_3 \quad (16)$$

となるので、2つのベクトルが共に固有値 -1 の固有ベクトルであることがわかります。次に、任意の線形結合に対しては

$$A(a\vec{u}_2 + b\vec{u}_3) = aA\vec{u}_2 + bA\vec{u}_3 = -a\vec{u}_2 - b\vec{u}_3 = (-1)(a\vec{u}_2 + b\vec{u}_3) \quad (17)$$

となるので、やはり固有値 -1 の固有ベクトルであることがわかります。

さて、2つのベクトル \vec{u}_2 と \vec{u}_3 の長さは

$$|\vec{u}_2|^2 = (\vec{u}_2)^T \vec{u}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1, \quad (18)$$

$$|\vec{u}_3|^2 = (\vec{u}_3)^T \vec{u}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = 1 \quad (19)$$

なので、いずれも長さ1に規格化されています。また、それぞれベクトル \vec{u}_1 と内積をと

ると

$$(\vec{u}_1)^T \vec{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} (1 \ 1 \ 1) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \quad (20)$$

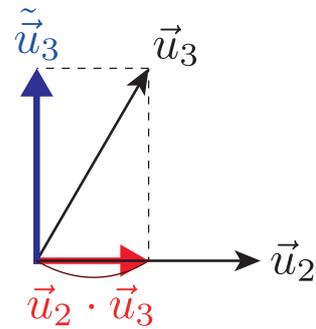
$$(\vec{u}_1)^T \vec{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{6}} (1 \ 1 \ 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = 0 \quad (21)$$

となるので、いずれもベクトル \vec{u}_1 と直交しています。しかし

$$(\vec{u}_2)^T \vec{u}_3 = \frac{1}{2} (1 \ -1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \neq 0 \quad (22)$$

なので、ベクトル \vec{u}_2 と \vec{u}_3 は直交していません。

(iv) シュミットの直交化とは以下のような作業です。図1のように直交していない2つの単位ベクトル \vec{u}_2 と \vec{u}_3 があつたとします。赤で示されているベクトルを \vec{u}_3 から引くと青で示されているベクトルが残り、これがベクトル \vec{u}_2 と直交しています。このようにしてベクトル \vec{u}_2 と直交するベクトルを求める作業がシュミットの直交化です。



ベクトル \vec{u}_2 と \vec{u}_3 の長さはいずれも1なので、内積 $\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_3$ は赤で示されているベクトルの長さを与えます。その方向は \vec{u}_2 ですから、赤で示されているベクトルは

図1: シュミットの直交化の概念図。

$$(\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_3) \vec{u}_2 \quad (23)$$

のはずです。したがって、青で示されているベクトルは

$$\tilde{\vec{u}}_3 = \vec{u}_3 - (\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_3) \vec{u}_2 \quad (24)$$

です。これがベクトル \vec{u}_2 と直交することは、内積をとって

$$\vec{u}_2 \cdot \tilde{\vec{u}}_3 = \vec{u}_2 \cdot [\vec{u}_3 - (\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_3) \vec{u}_2] = \vec{u}_2 \cdot \vec{u}_3 - (\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_3)(\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_2) = 0 \quad (25)$$

となることから確認できます。

実際に式(2)のベクトルを用いると

$$\tilde{\vec{u}}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \times \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

となります。仕上げに規格化すると

$$\tilde{\vec{u}}_3 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} \quad (27)$$

です。実際に $\vec{u}_1 \cdot \vec{\tilde{u}}_3 = \vec{u}_2 \cdot \vec{\tilde{u}}_3 = 0$ も確認できます。

(v) 行列 B の固有値は以下の方程式の解です：

$$0 = \det(B - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} 2 - \lambda & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 - \lambda & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 - \lambda & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 - \lambda \end{pmatrix}. \quad (28)$$

右辺の行列式を基本変形すると

$$\det \begin{pmatrix} 2 - \lambda & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 - \lambda & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 - \lambda & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 - \lambda \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 2 - \lambda & 0 & \lambda - 2 & 0 \\ 0 & 2 - \lambda & 0 & \lambda - 2 \\ 0 & -1 & 2 - \lambda & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 - \lambda \end{pmatrix} \quad (29)$$

$$= (\lambda - 2)^2 \det \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 2 - \lambda & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 - \lambda \end{pmatrix} \quad (30)$$

$$= (\lambda - 2)^2 \det \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 - \lambda & -2 \\ -1 & 0 & -2 & 2 - \lambda \end{pmatrix} \quad (31)$$

$$= (\lambda - 2)^2 \det \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 - \lambda & -2 \\ 0 & 0 & -2 & 2 - \lambda \end{pmatrix} \quad (32)$$

$$= (\lambda - 2)^2 [(2 - \lambda)^2 - 4] \quad (33)$$

$$= (\lambda - 2)^2 \lambda (\lambda - 4) \quad (34)$$

となります。なお、式 (29) では 1 行目から 3 行目を、2 行目から 4 行目をそれぞれ引いています。式 (30) では 1 行目と 2 行目からそれぞれ $\lambda - 2$ を括りだしています。式 (31) では 1 列目を 3 行目に、2 列目を 4 列目にそれぞれ足しています。式 (32) では 4 行目から 1 行目を、3 行目から 2 行目をそれぞれ引いています。最後に式 (33) で行列式を計算しています。

以上から、固有値が $0, 4, 2, 2$ であることがわかります。固有値 $\lambda_1 = 0$ と $\lambda_2 = 4$ は縮退しておらず、固有値 $\lambda_3 = \lambda_4 = 2$ が縮退しています。

(vi) 固有値 0 に対する固有ベクトル \vec{u}_1 を仮に $(u, v, w, z)^T$ としておくと $(A - \lambda_1 I)\vec{u}_1 = \vec{0}$

から

$$\begin{aligned}2u - v - z &= 0 \\ -u + 2v - w &= 0 \\ -v + 2w - z &= 0 \\ -u - w + 2z &= 0\end{aligned}\tag{35}$$

です。第1式から第3式を引くと $u = w$ が、第2式から第4式を引くと $v = z$ が求まり、それを基にすると $u = v = w = z$ が得られます。したがって、固有ベクトルは

$$\vec{u}_1 \propto \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}\tag{36}$$

です。これを規格化して

$$\vec{u}_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}\tag{37}$$

です。

同様に固有値4に対する固有ベクトル \vec{u}_2 を仮に $(u, v, w, z)^T$ としておくと $(A - \lambda_2 I)\vec{u}_2 = \vec{0}$ から

$$\begin{aligned}-2u - v - z &= 0 \\ -u - 2v - w &= 0 \\ -v - 2w - z &= 0 \\ -u - w - 2z &= 0\end{aligned}\tag{38}$$

です。第1式から第3式を引くと $u = w$ が、第2式から第4式を引くと $v = z$ が求まり、それを基にすると $u = -v = w = -z$ が得られます。したがって、固有ベクトルは

$$\vec{u}_2 \propto \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}\tag{39}$$

です。これを規格化して

$$\vec{u}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}\tag{40}$$

です。

(vii) 固有値2に対する固有ベクトル \vec{u}_3 と \vec{u}_4 を仮に $(u, v, w, z)^T$ としておくと $(A - \lambda_3 I)\vec{u}_3 = \vec{0}$ から

$$\begin{aligned} -v & -z = 0 \\ -u & -w = 0 \\ -v & -z = 0 \\ -u & -w = 0 \end{aligned} \tag{41}$$

です。結局 $v = -z$ と $u = -w$ しかわかりません。いろいろな取り方がありますが、たとえば

$$\vec{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{42}$$

ととると、既に互いに直交しているようにとることができます。

他の例として

$$\vec{u}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{43}$$

ととってみましょう。ベクトル \vec{u}_4 をシュミットの直交化でベクトル \vec{u}_3 に直交させると

$$\vec{u}_4 - (\vec{u}_3 \cdot \vec{u}_4)\vec{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \times \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} \tag{44}$$

となります。仕上げに規格化して

$$\vec{u}_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\vec{u}}_4 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{45}$$

でも正解です。

(viii) 与えられた2つのベクトルは、それぞれの要素の値を計算すると

$$\vec{u}_5 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ -1 \\ -i \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_6 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ -1 \\ i \end{pmatrix} \tag{46}$$

です。これらに行列 B をかけると

$$B\vec{u}_5 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ -1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 \\ 2i \\ -2 \\ -2i \end{pmatrix} = 2\vec{u}_5, \quad (47)$$

$$B\vec{u}_6 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ -1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 \\ -2i \\ -2 \\ 2i \end{pmatrix} = 2\vec{u}_6 \quad (48)$$

となり、確かにいずれも縮退している固有値 2 の固有ベクトルであることが確認できます。

規格化を確認するに当たっては、ベクトル \vec{u} と \vec{v} の内積が $(\vec{u})^\dagger \vec{v}$ で与えられることに注意します。したがって

$$|\vec{u}_5|^2 = (\vec{u}_5)^\dagger \vec{u}_5 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -i & -1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ -1 \\ -i \end{pmatrix} = 1 \quad (49)$$

$$|\vec{u}_6|^2 = (\vec{u}_6)^\dagger \vec{u}_6 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & i & -1 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ -1 \\ i \end{pmatrix} = 1 \quad (50)$$

となり、確かにいずれのベクトルも規格化されています。また

$$(\vec{u}_5)^\dagger \vec{u}_6 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -i & -1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ -1 \\ i \end{pmatrix} = 0 \quad (51)$$

となり、2つのベクトルは互いに直交しています。

(ix) 小問 (vii) で求めた基底としては式 (45) を使うことにしましょう。ベクトル \vec{u}_5 が仮に

$$\vec{u}_5 = a\vec{u}_3 + b\tilde{\vec{u}}_4 \quad (52)$$

という線形結合で書けたとしましょう。係数 a を求めるには、式 (52) とベクトル \vec{u}_3 の内積をとります。すると、 \vec{u}_3 と $\tilde{\vec{u}}_4$ の正規直交性から、右辺は

$$a(\vec{u}_3)^\dagger \vec{u}_3 + b(\vec{u}_3)^\dagger \tilde{\vec{u}}_4 = a \times 1 + b \times 0 = a \quad (53)$$

となり、係数 a を引き出せます。一方、左辺は

$$a = (\vec{u}_3)^\dagger \vec{u}_5 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ -1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1+i}{2} \quad (54)$$

となります。これが係数 a です。同様にすると係数 b は

$$b = (\tilde{u}_4)^\dagger \vec{u}_5 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ -1 \\ -i \end{pmatrix} = \frac{1-i}{2} \quad (55)$$

です。以上から

$$\vec{u}_5 = \frac{1+i}{2} \vec{u}_3 + \frac{1-i}{2} \tilde{u}_4 \quad (56)$$

であることがわかります。

同様に

$$\vec{u}_6 = c\vec{u}_3 + d\tilde{u}_4 \quad (57)$$

という線形結合で書けたとすると、

$$c = (\vec{u}_3)^\dagger \vec{u}_6 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ -1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1-i}{2}, \quad (58)$$

$$d = (\tilde{u}_4)^\dagger \vec{u}_6 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ -1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1+i}{2} \quad (59)$$

です。以上から

$$\vec{u}_6 = \frac{1-i}{2} \vec{u}_3 + \frac{1+i}{2} \tilde{u}_4 \quad (60)$$

であることがわかります。

小問 (iii) で述べたように、縮退している固有値の2つの固有ベクトルの任意の線形結合もまた固有ベクトルです。したがって \vec{u}_3 と \tilde{u}_4 が固有ベクトルなら、その線形結合である \vec{u}_5 と \vec{u}_6 もまた固有ベクトルです。どちらを使っても問題ありません。講義では \vec{u}_5 と \vec{u}_6 を用いています。

配点：言葉による説明が不足している場合は、程度によって減点1～2点します。逆に、説明が非常に丁寧だった場合は1点を加算します。

- 式(7)–(10)の行列の基本変形で1点
- 固有値で1点
- 式(13)で1点
- 式(14)の規格化で1点
- 式(15)–(16)の確認で1点
- 式(17)の確認で1点
- 式(18)–(22)の確認で1点
- 式(26)の直交化で1点
- 式(27)の規格化で1点
- 式(29)–(34)の行列の基本変形で1点
- 固有値で1点
- 式(36)–(37)で1点
- 式(39)–(40)で1点
- 式(42)のように一発で規格直交化させたら2点
- 式(43)のように一発では規格直交化させなかった場合、式(44)の直交化で1点、さらに式(45)の規格化で1点
- 式(47)–(48)の確認で1点
- 式(49)–(51)の確認で1点
- 式(54)–(55)あるいは式(58)–(59)の計算の仕方で1点。
- 式(56)あるいは式(60)で1点。

以上で満点は19点です。

注意：計算は途中経過も書きましょう。利点は以下の2つです：

- 書いている内に計算ミスに気付くことがあります。
- 採点者が部分点を与えやすくなります。