

[I] これまでのまとめ：基準振動への分解

N 個の自由度がある系の振動が

$$m\ddot{\vec{x}} = -kA\vec{x} \quad (1)$$

で表されるとき、行列 A を

$$U^T A U = \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_N \end{pmatrix} \quad (2)$$

の形に対角化することによって簡単化できます。新しい変数として

$$\vec{y} = U^T \vec{x} \quad (3)$$

をとると、運動方程式(1)は $m\ddot{\vec{y}} = -k\Lambda\vec{y}$ となり、 $m\ddot{y}_\mu = -k\lambda_\mu y_\mu$ のように分離されます。一般解は $y_\mu = A_\mu e^{i\omega_\mu t} + B_\mu e^{-i\omega_\mu t}$ となります。ただし $\omega_\mu = \sqrt{k\lambda_\mu/m}$ です。

式(3)の逆変換 $\vec{x} = U\vec{y}$ によって元に戻すことができます。これは書き直すと

$$\vec{x} = \sum_{\mu=1}^N y_\mu \vec{u}_\mu = \sum_{\mu=1}^N \vec{u}_\mu (A_\mu e^{i\omega_\mu t} + B_\mu e^{-i\omega_\mu t}) \quad (4)$$

となります。ここで重要なのは、重りの振動 $\vec{x}$ が固有ベクトル（基準振動）の重ね合わせに分解されていることです。重ね合わせの係数が y_μ です。この重ね合わせの係数は $y_\mu = \vec{u}_\mu \cdot \vec{x}$ によって求めることができます。

[II] エルミート行列の固有値と固有ベクトル

エルミート行列 A を対角化する手法を考えます。エルミート行列とは $A^\dagger = A$ を満たす行列です。なお $A^\dagger$ とは転置と複素共役を行う操作で、転置共役あるいはエルミート共役と言います。このとき固有値が必ず実数であること、そして固有ベクトルが正規直交基底を成すことを示しましょう。なお、要素が全て実数であるエルミート行列は実対角行列です。したがって、以下で述べることは全て実対称行列にも成り立ちます。逆に、実対称行列を複素数へ一般化したのがエルミート行列なのです。

まず、

$$A\vec{u}_\mu = \lambda_\mu \vec{u}_\mu \quad (5)$$

だとします。このエルミート共役をとると

$$\vec{u}_\mu^\dagger A = \lambda_\mu^* \vec{u}_\mu^\dagger \quad (6)$$

となります。つまり $\vec{u}_\mu$ が固有値 λ_μ の右固有ベクトルなら、 $\vec{u}_\mu^\dagger$ は固有値 λ_μ^* の左固有ベクトルであるということです。以下で $\lambda_\mu = \lambda_\mu^*$ を示します。

そのために、以下のような数を考えます： $\vec{u}_\mu^\dagger A \vec{u}_\mu$ 。これは以下のように変形できます。

$$\vec{u}_\mu^\dagger A \vec{u}_\mu = \vec{u}_\mu^\dagger (A \vec{u}_\mu) = \lambda_\mu \vec{u}_\mu^\dagger \vec{u}_\mu \quad (7)$$

$$= (\vec{u}_\mu^\dagger A) \vec{u}_\mu = \lambda_\mu^* \vec{u}_\mu^\dagger \vec{u}_\mu. \quad (8)$$

なお、式 (7) においては式 (5) を使い、式 (8) においては式 (6) を使っています。ここで

$$N_\mu = \vec{u}_\mu^\dagger \vec{u}_\mu = \sum_{n=1}^N |(\vec{u}_\mu)_n|^2 \quad (9)$$

です。つまり $\vec{u}_\mu$ がゼロベクトルでない限り $N_\mu > 0$ です。そこで式 (7) と (8) から $\lambda_\mu = \lambda_\mu^*$ が得られます。以上から、エルミート行列の固有値は必ず実数であることがわかります。

次に、固有ベクトルの正規直交性を示すために、今度は以下のような数を考えます： $\vec{u}_\mu^\dagger A \vec{u}_\nu$ 。これは以下のように変形できます。

$$\vec{u}_\mu^\dagger A \vec{u}_\nu = \vec{u}_\mu^\dagger (A \vec{u}_\nu) = \lambda_\nu \vec{u}_\mu^\dagger \vec{u}_\nu \quad (10)$$

$$= (\vec{u}_\mu^\dagger A) \vec{u}_\nu = \lambda_\mu^* \vec{u}_\mu^\dagger \vec{u}_\nu. \quad (11)$$

ここで $\mu \neq \nu$ なら $\lambda_\mu \neq \lambda_\nu$ であるとしましょう。これを「縮退がない」といいます。このとき、式 (10) と (11) から

$$\vec{u}_\mu^\dagger \vec{u}_\nu = 0 \quad (12)$$

が言えます。この左辺を複素ベクトルの内積と定義します。この定義のもとでは、 $\mu \neq \nu$ にたいして $\vec{u}_\mu$ と $\vec{u}_\nu$ が直交しています。

なお、縮退がある場合、つまり $\mu \neq \nu$ なのに $\lambda_\mu = \lambda_\nu$ である場合も、シュミットの直交化を用いて式 (13) が成り立つように $\vec{u}_\mu$ と $\vec{u}_\nu$ を選ぶことができます。(これはレポート問題を参照。)

最後に $\mu = \nu$ の場合には式 (9) となりますが、規格化すると ($\vec{u}_\mu / \sqrt{N_\mu}$ を改めて $\vec{u}_\mu$ とすると)、 $\vec{u}_\mu$ の長さを 1 にとることができます： $\vec{u}_\mu^\dagger \vec{u}_\mu = 1$ 。以上をまとめると

$$\vec{u}_\mu^\dagger \vec{u}_\nu = \delta_{\mu\nu} \quad (13)$$

となり、固有ベクトルが正規直交性を持つ（あるいは、持つように選ぶことができる）ことがわかります。最後に、行列 A が実対称の場合は固有ベクトルを実数ベクトルに取ることができます。このとき式 (13) の左辺は通常の内積となり

$$\vec{u}_\mu \cdot \vec{u}_\nu = \delta_{\mu\nu} \quad (14)$$

に帰着します。

[III] エルミート行列の対角化

固有ベクトルの正規直交性を用いると、以下の手続きでエルミート行列を対角化できます。まず、固有ベクトルを並べた行列

$$U = \begin{pmatrix} \vec{u}_1 & \vec{u}_2 & \cdots & \vec{u}_N \end{pmatrix} \quad (15)$$

を用意します。この行列は

$$U^\dagger U = I \quad (16)$$

を満たします。この関係を満たす行列をユニタリー行列と呼びます。行列 A が実対称の場合は、上述のように固有ベクトルを実数ベクトルにとることができますが、その場合には式 (16) は $U^T U = I$ に帰着し、 U が直交行列になることがわかります。つまり、直交行列を複素数に一般化したのがユニタリー行列です。

式 (16) を以下のように示すことができます。左辺は

$$\begin{pmatrix} \vec{u}_1^\dagger \\ \vec{u}_2^\dagger \\ \vdots \\ \vec{u}_N^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{u}_1 & \vec{u}_2 & \cdots & \vec{u}_N \end{pmatrix} \quad (17)$$

という形をしているので、その $\mu\nu$ 成分は $\vec{u}_\mu^\dagger \vec{u}_\nu = \delta_{\mu\nu}$ であり、単位行列の $\mu\nu$ 成分に一致します。

最後に、以下のようにしてエルミート行列の対角化を行えます：

$$U^\dagger A U = \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_N \end{pmatrix}. \quad (18)$$

これは以下のように示せます。左辺は

$$\begin{aligned} U^\dagger A U &= U^\dagger A \begin{pmatrix} \vec{u}_1 & \vec{u}_2 & \cdots & \vec{u}_N \end{pmatrix} \\ &= U^\dagger \begin{pmatrix} A\vec{u}_1 & A\vec{u}_2 & \cdots & A\vec{u}_N \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \vec{u}_1^\dagger \\ \vec{u}_2^\dagger \\ \vdots \\ \vec{u}_N^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 \vec{u}_1 & \lambda_2 \vec{u}_2 & \cdots & \lambda_N \vec{u}_N \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (19)$$

という形をしているので、その $\mu\nu$ 成分は $\lambda_\nu \vec{u}_\mu^\dagger \vec{u}_\nu = \lambda_\nu \delta_{\mu\nu}$ であり、行列 Λ の $\mu\nu$ 成分に一致します。

[IV] N 自由度系の連成振動（周期境界条件）

無数の重り（全て質量 m ）がバネ（全てバネ定数 k ）で一直線に繋がれている系を考えたいとします。初めから無数の重りを扱うのは難しいので、 N 個の重りが周期的に繋がっている場合を考えます。つまり x_1 の重りの左隣は x_N であり、 x_N の重りの右隣は x_1 であるとして、これを周期境界条件と呼びます。最終的に $N \rightarrow \infty$ とすれば無数の場合が扱えると期待できます。

重りの運動方程式は

$$m\ddot{\vec{x}} = -kA\vec{x} \quad (20)$$

で表され、行列 A は

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & -1 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 & -1 \\ -1 & & & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (21)$$

という形をしています。なお、空欄の要素は 0 とします。

以下のベクトルは行列 A の固有ベクトルです：

$$\vec{u}_\mu = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{ip_\mu} \\ e^{2ip_\mu} \\ e^{3ip_\mu} \\ \vdots \\ e^{Nip_\mu} \end{pmatrix} \quad (22)$$

このとき固有値は

$$\lambda_\mu = 2(1 - \cos p_\mu) = 4 \sin^2 \frac{p_\mu}{2} \quad (23)$$

で

$$p_\mu = \frac{2\pi}{N}(\mu - 1) \quad (24)$$

です。

重要な点は、この系のように離散並進対称性のある系は必ず式 (22) の形の固有ベクトル（基準振動）を持っているということです。つまり**離散並進対称性のある系の任意の振動は式 (22) の基準振動に分解されます。この分解がフーリエ変換です。分解したときの係数を求めるのが逆フーリエ変換です。**