5　自己共役作用素

5.1　閉作用素

$(X, (\ ,\ ))$ をヒルベルト空間とする. 複素ヒルベルト空間, 実ヒルベルト空間のどちらでもよい.

Definition 1 $M \subset X$ を線形部分空間とする.

$T : M \to X$ が閉作用素とは次が成立する時に言う. すなわち, T が線形で, 次をみたす. $\{x_n\} \subset M$ が

$$\lim_{n\to\infty} \|x_n - x\| = 0 \quad (5.1)$$
$$\lim_{n\to\infty} \|Tx_n - y\| = 0 \quad (5.2)$$

をみたすとき, $x \in M$ で $Tx = y$.

Remark 2 (1) T の定義域 M を $D(T)$ と書くことにする. $D(T)$ が X の中で稠密 (dense) のとき, $(T, D(T))$ を densely defined operator という.

(2) $T : X \to X$ が有界ならば, T は closed operator である. しかし, 有界にならないような重要な閉作用素がたくさんある.

実際上は, 最初から閉作用素が与えられることは少なく, 次の性質を持つ可閉作用素が与えられ, それを拡張して閉作用素を得ることが多い.

Definition 3 線形作用素 $T : D(T) \to X$ が可閉 (closable) $\Longleftrightarrow$ $\{x_n\}_{n=1}^{\infty} \subset D(T)$ が $\lim_{n\to\infty} x_n = 0$ かつ Tx_n が $y \in X$ に収束するとき, $y = 0$.

Example 4 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ を開集合とする. $X = L^2(\Omega)$ で,

$$Tf(x) = \frac{\partial^N f}{\partial x_1^{i_1} \cdots \partial x_n^{i_n}}(x) \quad (i_1 + \cdots i_n = N) \quad (5.3)$$
$$f \in D(T) := C_0^{\infty}(\Omega) \quad (5.4)$$

と線形作用素 $(T, D(T))$ を定めると可閉作用素になる. これは, 部分積分を用いると証明できる.

さて, 可閉作用素から閉作用素を作ることができる.

Proposition 5 線形作用素 $(T, D(T))$ が可閉とする. $\mathcal{D}$ を $\exists \{x_n\}_{n=1}^{\infty} \subset D(T)$

$$\lim_{n\to\infty} x_n = x. \quad (5.5)$$

$$\lim_{n\to\infty} Tx_n \text{ が収束する} \quad (5.6)$$

となる $x \in X$ の要素全体とすると, $\mathcal{D}$ は線形部分空間で $x \in \mathcal{D}$ に対して、(5.5), (5.6) をみたす $\{x_n\}$ を用いて

$$Sx = \lim_{n\to\infty} Tx_n.$$

と定義すると *well-defined* で $(S, \mathcal{D})$ は閉作用素となる.

Remark 6 (1) $D(T) \subset \mathcal{D}$ が定義からわかる. 上の $(S, \mathcal{D})$ を最小閉拡大といい, S を $\bar{T}$, $\mathcal{D}$ を $D(\bar{T})$ と書く.

(2) 二つの線形作用素 $(T, D(T)), (S, D(S))$ に対して, $D(T) \subset D(S)$ で $Sx = Tx$ $\forall x \in D(T)$ のとき $T \subset S$ と書いて S は T の拡大 (拡張) という. (定義域が広がっているから) (1) で最小と言っているのは, $(\bar{T}, D(\bar{T}))$ が $(T, D(T))$ の拡大でしかも閉作用素になっているもののなかで, 一番定義域が小さいからである.

Proposition 7 $(T, D(T))$ について次は同値である.
(1) $(T, D(T))$ は可閉.
(2) $(T, D(T))$ の拡大 $(S, D(S))$ で閉作用素であるものが存在する.

問 1 上の Proposition 7 を示せ.

5.2 自己共役作用素

Definition 8 T を X 全体で定義された有界線形作用素とする. T が自己共役作用素 *(self-adjoint operator)* とは, すべての $x, y \in X$ について $(Tx, y) = (x, Ty)$ が成立する作用素のことを言う.

したがって, $\mathbb{R}^n$ 上の対称行列の定める作用素, $\mathbb{C}^n$ 上のエルミート行列の定める作用素は自己共役である. 有界でない自己共役作用素も多数存在し, 重要である. まずその定義をする。以下線形作用素はつねに densely defined とする.

Definition 9 線形作用素 $(T, D(T))$ の随伴作用素 (=adjoint operator), (または共役作用素=conjugate operator) $(T^*, D(T^*))$ を次のように定義する.

$$D(T^*) = \{y \in X \mid \exists z \in X, \forall x \in D(T), (Tx, y) = (x, z)\}. \tag{5.7}$$

そして $y \in D(T^*)$ に対して,

$$T^* y = z \qquad (z \text{ は上の式の } (Tx, y) = (y, z) \text{ が成立している } z).$$

と定める. (この定義が *well-defined* かどうかはチェックする必要がある.).

問 2 $(T^*, D(T^*))$ は閉作用素であることを示せ.

Definition 10 $\forall x, \forall y \in D(T)$ に対して,

$$(Tx, y) = (x, Ty)$$

すなわち,

$$T \subset T^*$$

のとき T は対称作用素 (symmetric operator) という. $T = T^*$ のとき、自己共役作用素 self-adjoint operator) という.

問 1, 問 2 より, 対称作用素は可閉な作用素である. 非有界な対称作用素の例を問いの形であげる.

問 3 Ω を $\mathbb{R}^d$ の有界領域としその境界 $\partial\Omega$ は滑らかとする．$X = L^2(\Omega, dx)$ とする．$\Delta = \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ と書く．

$$
\begin{aligned}
D_1 &= \Big\{ f \in C_0^\infty(\Omega) \mid f \text{ は } \mathbb{R}^d \text{ 上の } C^\infty \text{ 関数で } \{x \in \mathbb{R}^d \mid f(x) \neq 0\} \text{ の閉包が} \\
&\qquad \Omega \text{ に含まれるコンパクト集合であるもの} \Big\} \\
D_2 &= \Big\{ f \in C^2(\Omega) \mid f \text{ は } \mathbb{R}^d \text{ 上の } C^2 \text{ 関数を } \Omega \text{ に制限したもので境界上で } \tfrac{\partial f}{\partial \mathbf{n}} = 0 \Big\}
\end{aligned}
$$

ただし, $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{n}}$ は内向き法線方向 $\mathbf{n}$ 方向への微分を表す.

(1) D_1, D_2 は X の稠密な線形部分空間であることを示せ.

(2) 定義域を D_1 とし f に対して Δf を対応させる作用素を Δ_{D_1} とかく．定義域を D_2 に取り換えて同じように定義した作用素を Δ_{D_2} で表す．$\Delta_{D_1}, \Delta_{D_2}$ は対称作用素であることを示せ.

非有界な対称作用素の例は簡単に作れるが, 非有界な自己共役作用素はそう簡単には作れない. $D(T^*) = D(T)$ という条件はなかなかチェックしにくいのである．そこで, まずは対称作用素を作っておいて, 閉作用素のときと同じように, それを適当に拡張して自己共役作用素を作るということをする．その観点から次の定義をおく.

Definition 11 対称作用素 $(T, D(T))$ が本質的に自己共役 (=essentially self-adjoint) とは, $(T, D(T))$ の拡張で自己共役作用素になるものがひとつだけあることと定義する.

Remark 12 $(T, D(T))$ が本質的自己共役であること $\bar{T}$ が自己共役作用素となることは同値である.

Example 13 (1) 問 3 の例を考える．(Δ_{D_1}, D_1) は essentially self-adjoint ではない．(Δ_{D_2}, D_2) は essentially self-adjoint である．(Δ_{D_2}, D_2) の自己共役拡張を Neumann 境界条件のラプラス作用素という.
(2) $X = L^2(\mathbb{R}^d, dx)$ とする．$T = -\Delta$, $D(T) = C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ とする．$(T, D(T))$ は densely defined な対称作用素かつ essentially self-adjoint である.
(3) $X = L^2(\mathbb{R}^n)$. $V(x)$ を

$$
\begin{aligned}
\int_{\|x\| \le R} |V(x)|^2 dx &< \infty \qquad (\text{任意の } 0 < R < \infty \text{ に対して}) && (5.8) \\
C := \inf_{x \in \mathbb{R}^n} V(x) &> -\infty && (5.9)
\end{aligned}
$$

となる関数とする．$D(T) = C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, とし

$$
(Tf)(x) = -(\Delta f)(x) + V(x) f(x).
$$

と定めると, $(T, D(T))$ は本質的自己共役となる (Reed-Simon, Methods of Modern Mathematical Physics II: Fourier Analysis, Self-Adjointness, Theorem X.28 を参照). 例えば調和振動子のハミルトニアンを与える作用素 $T = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2$ は $C_0^\infty(\mathbb{R})$ を定義域として本質的自己共役である.

自己共役とは限らない一般な作用素 $(T, D(T))$ について，レゾルベント集合，スペクトル集合と呼ばれる重要な概念が定義される．この定義自身は一般なバナッハ空間で定義される.

Definition 14 (レゾルベント集合, スペクトル集合) 作用素 $(T, D(T))$ に対して，集合

$$\rho(T) = \Big\{\lambda \in \mathbb{C} \;\Big|\; (\lambda - T) : D(T) \to \mathrm{Ran}(\lambda - T) \text{ は一対一対応であり } \mathrm{Ran}(\lambda - T) = X \text{ かつ } (\lambda - T)^{-1} : X \to D(T) \text{ は有界}\Big\} \tag{5.10}$$

をレゾルベント集合と言う．$\mathbb{C} \setminus \rho(T)$ を T のスペクトル集合という．ただし，X が $\mathbb{R}$ 上のバナッハ空間のときは，$\rho(T), \sigma(T)$ は $\mathbb{R}$ の範囲で考える．

ヒルベルト空間上の自己共役作用素については，スペクトル集合，レゾルベント集合は特徴的な性質を持つ．以下の定理で X は $\mathbb{C}$ 上のヒルベルト空間としているが，$\mathbb{R}$ を係数体とするヒルベルト空間のときは，$\lambda \in \mathbb{R}$ の範囲で考える．

Theorem 15 $(T, D(T))$ を自己共役作用素とする．$\lambda \in \mathbb{C}$ とし，

$$\mathrm{Ker}(\lambda - T) = \{x \in D(T) \mid (\lambda - T)x = 0\}$$

と定義する．
(1) $\mathrm{Ker}(\lambda - T)$ は X の閉部分空間である．$\lambda \notin \mathbb{R}$ ならば $\mathrm{Ker}(\lambda - T) = \{0\}$.
(2)

$$X = \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)} \bigoplus \mathrm{Ker}(\bar{\lambda} - T). \tag{5.11}$$

$\bar{\lambda}$ は複素共役を表す． すなわち，任意の $x \in X$ に対して一意的に $x_1 \in \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)}$ と $x_2 \in \mathrm{Ker}(\bar{\lambda} - T)$ が存在して $x = x_1 + x_2$ とかけ，かつ $(x_1, x_2) = 0$ である．
(3) $\lambda - T : D(T) \to \mathrm{Ran}(\lambda - T)$ が一対一かつある定数 $C \geq 0$ が存在して，任意の $x \in \mathrm{Ran}(\lambda - T)$ に対して，

$$\|(\lambda - T)^{-1}x\| \leq C\|x\| \tag{5.12}$$

をみたすならば，$\mathrm{Ran}(\lambda - T) = X$ かつ $\|(\lambda - T)^{-1}\| \leq C$.
(4) $\lambda = a + \sqrt{-1}b$ $(a, b \in \mathbb{R}, b \neq 0)$ とする．このとき，$(\lambda - T) : D(T) \to \mathrm{Ran}(\lambda - T)$ は一対一であり，任意の $x \in \mathrm{Ran}(\lambda - T)$ に対して，

$$\|(\lambda - T)^{-1}x\| \leq \frac{1}{b}\|x\|. \tag{5.13}$$

従って，$\mathrm{Ran}(\lambda - T) = X$ となる．

Remark 16 Theorem 15 (3) の結果より，T が自己共役作用素のときは，

(i) $\lambda - T : D(T) \to X$ は一対一

(ii) ある $C > 0$ が存在して，任意の $x \in \mathrm{Ran}(\lambda - T)$ に対して，$\|(\lambda - T)^{-1}x\| \leq C\|x\|$

が成立するだけで λ はレゾルベント集合に属すことになる．また，(4) は $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$ を示している．

Proof of Theorem 15. (1) $x_n \in \mathrm{Ker}(\lambda - T)$ $(n = 1, 2, \ldots)$ とし $\lim_{n\to\infty} x_n = x$ とする．仮定より $Tx_n = \lambda x_n$. 従って，$\lim_{n\to\infty} Tx_n = \lambda x$. T は閉作用素だから $x \in D(T)$ かつ $Tx = \lambda x$. これは $x \in \mathrm{Ker}(\lambda - T)$，すなわち $\mathrm{Ker}(\lambda - T)$ が閉部分空間であることを示している．

後半のステートメントを示すため、

- 任意の $x \in D(T)$ に対して $(Tx, x) \in \mathbb{R}$.

を示す．これは，$\overline{(Tx,x)} = (x, Tx) = (Tx, x)$ より従う．$\lambda \notin \mathbb{R}$ とする．このとき，$x \neq 0$ ならば

$$(x, (\lambda - T)x) = \bar{\lambda}\|x\|^2 - (x, Tx) \notin \mathbb{R},$$

だから $(\lambda - T)x \neq 0$.

(2) $X = \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)} \oplus \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)}^{\perp}$ (X の直交分解) に注意する．従って，$\mathrm{Ker}(\bar{\lambda} - T) = \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)}^{\perp}$ を示せばよい．

(i) $\mathrm{Ker}(\bar{\lambda} - T) \subset \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)}^{\perp}$ の証明

$x \in D(T)$ が $(\bar{\lambda} - T)x = 0$ を満たすとする．このとき，任意の $y \in D(T)$ に対して

$$0 = \left((\bar{\lambda} - T)x, y\right) = (x, (\lambda - T)y).$$

よって $x \in \mathrm{Ran}(\lambda - T)^{\perp}$. ゆえに $x \in \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)}^{\perp}$.

(ii) $\mathrm{Ker}(\bar{\lambda} - T) \supset \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)}^{\perp}$ の証明

$y \in \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)}^{\perp}$ とする．このとき，任意の $x \in D(T)$ に対して，$(y, (\lambda - T)x) = 0$. 従って，

$$(Tx, y) = (x, \bar{\lambda}y) \qquad \text{すべての } x \in D(T) \text{ に対して.}$$

T は自己共役だから，これは $y \in D(T)$ かつ $Ty = \bar{\lambda}y$ を意味する．これで逆の包含関係も示された．

(3) (i) $\lambda \notin \mathbb{R}$, (ii) $\lambda \in \mathbb{R}$ の二つに分けて示す．

(i) $\lambda \notin \mathbb{R}$ のとき

$\mathrm{Ker}(\bar{\lambda} - T) = \{0\}$ だから

$$X = \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)}. \tag{5.14}$$

このことを用いて，$X = \mathrm{Ran}(\lambda - T)$ を示そう．(5.14) より $y \in X$ に対して $x_n \in D(T)$ $(n = 1, 2, \ldots)$ が存在して $y = \lim_{n\to\infty}(\lambda - T)x_n$ となる．$y_n = (\lambda - T)x_n$ とおく．$x_n = (\lambda - T)^{-1}y_n$ かつ

$$\|x_n - x_m\| = \|(\lambda - T)^{-1}(y_n - y_m)\| \leq C\|y_n - y_m\| \to 0 \quad (n, m \to \infty).$$

ゆえに X の完備性から x_∞ が存在して，$\lim_{n\to\infty} x_n = x_\infty$. また $\lim_{n\to\infty} Tx_n = \lim_{n\to\infty}(\lambda x_n - y_n) = \lambda x_\infty - y$. T は閉作用素だから $x_\infty \in D(T)$ かつ $Tx_\infty = \lambda x_\infty - y$. すなわち $(\lambda - T)x_\infty = y$. これで示された．

(ii) $\lambda \in \mathbb{R}$ のとき

このとき $\bar{\lambda} = \lambda$ である．従って，一対一の仮定から $\mathrm{Ker}(\lambda - T) = \{0\}$. ゆえにやはり $X = \overline{\mathrm{Ran}(\lambda - T)}$. このことから，$X = \mathrm{Ran}(\lambda - T)$ を示せばよいことになるが，それは，(i) と同じなので省略する．$\|(\lambda - T)^{-1}\| \leq C$ は定義から自明である．

(4) (1) の結果より $\mathrm{Ker}(\lambda - T) = \{0\}$ だから一対一であるのはよい．(5.13) を示す．$x \in D(T)$ に対して

$$\begin{aligned} \|(\lambda - T)x\|^2 &= \left((a + \sqrt{-1}b - T)x, (a + \sqrt{-1}b - T)x\right) \\ &= \left((a - T)x + \sqrt{-1}bx, (a - T)x + \sqrt{-1}bx\right) \\ &= \|(a - T)x\|^2 + b^2\|x\|^2 \geq b^2\|x\|^2. \end{aligned} \tag{5.15}$$

□

問 4 $(T, D(T))$ を自己共役作用素とし, $C \in \mathbb{R}$ が存在し, 任意の $x \in D(T)$ に対して,

$$(Tx, x) \geq C\|x\|^2 \tag{5.16}$$

を仮定する．このとき，$(-\infty, C) \subset \rho(T)$．すなわち，$\lambda < C$ ならば $\lambda - T$ は有界線形な逆写像を持つ．
ヒント: $\|(\lambda - T)x\|^2 \geq (C - \lambda)^2\|x\|^2$ を示すことにより，単射性を示せ．

Remark 17 (1). 対称作用素が (5.16) をみたすとき, 下に有界な作用素という．とくに, $C = 0$ のとき非負な作用素, $C > 0$ のとき, 正の作用素という．線形代数で学んだ正値対称行列の定義を思い出してほしい．Example 13 であげた対称作用素は下に有界である．また Example 13 (2) であげた $A = -\Delta + V$ はポテンシャル V の力の場の中を動く質点の運動のハミルトニアンの量子化でありそのスペクトルは観測されるエネルギーと見なせる．(5.16) が成り立つとき $\sigma(T) \subset [C, \infty)$ となるから, 観測されるエネルギーが下に有界となり, 物理的には自然である．また, 一般の自己共役作用素 T に対して, $\sigma(T) \subset [C, \infty)$ と (5.16) が成立することが同値であることも証明できる．

(2) 下に有界な作用素には Friedrichs 拡張とよばれる自己共役拡張が存在する．しかし, 下に有界ではないと自己共役作用素に拡張できないようなものもある．例えば Reed and Simon 著、Functinal analysis の 313 ページ問題 5 を見よ．なお, Example 13 (1) の (Δ, D_1) は非負な作用素である．その Friedrichs 拡張は Dirichlet 境界条件のラプラス作用素と呼ばれる．

問 5 $\lambda \in \rho(T)$ とする．μ が $|\mu - \lambda| \cdot \|(\lambda - T)^{-1}\| < 1$ を満たせば，$\mu \in \rho(T)$ となることを次の式を示すことにより示せ．

$$(\mu - T)^{-1} = \left(I + (\mu - \lambda)(\lambda - T)^{-1}\right)^{-1} (\lambda - T)^{-1}.$$

ヒント：$\mu - T = (\lambda - T) + (\mu - \lambda)I = (\lambda - T)\left\{I + (\mu - \lambda)(\lambda - T)^{-1}\right\}$ に注意せよ．

上の問は $\rho(T)$ が開集合になることを示している．従って，スペクトル集合 $\sigma(T)$ は閉集合である．以下の問は作用素ノルムとスペクトル集合の関係を示している．

問 6 T を有界線形作用素とする．このとき $\sigma(T) \subset \{\lambda \in \mathbb{C} \mid |\lambda| \leq \|T\|\}$．
ヒント：$|\lambda| > \|T\|$ のとき，$\lambda I - T = \lambda\left(I - \frac{T}{\lambda}\right)$ と書き直して，*Neumann* 級数を用いて連続な逆写像を構成せよ．

自己共役作用素のスペクトル集合に対して、つぎのことがわかる．

Lemma 18 $(T, D(T))$ を自己共役作用素とする．
(1) $\sigma(T) = \left\{\lambda \in \mathbb{R} \mid \inf_{\|x\|=1, x \in D(T)} \|(\lambda - T)x\| = 0\right\}$.

以下, $D(T) = X$ とし, T を有界な自己共役作用素とする．

(2) $\|T^2\| = \|T\|^2$.
(3) $f(t) = \sum_{k=1}^n a_k t^k$ を実数係数の多項式とする．$f(T) = \sum_{k=1}^n a_k T^k$ と新しい作用素を定義する．$f(T)$ は有界な自己共役作用素であり,

$$\sigma(f(T)) = f(\sigma(T)).$$

(4) $\|T\| = \sup\{|x| \mid x \in \sigma(T)\}$.

Remark 19 (4) について：自己共役性を仮定しない一般の有界線形作用素 T については

$$\sup\{|x| \mid x \in \sigma(T)\} = \lim_{n\to\infty} \|T^n\|^{1/n}$$

が知られている．$\|T^n\| \leq \|T\|^n$ だから $\sigma(T) \subset \{z \in \mathbb{C} \mid |z| \leq \|T\|\}$ となる．このこと自身は，Neumann 級数を用いた議論でわかることである．

Proof. (1) $\rho(T) \cap \mathbb{R} = \{\lambda \in \mathbb{R} \mid \inf_{\|x\|=1, x\in D(T)} \|(\lambda - T)x\| > 0\}$ を示せばよいが，これは $\rho(T)$ の定義から明らかである．
(2) $\|T^2\| \leq \|T\|^2$ は作用素ノルムの定義のところで述べた性質である．逆を示す．

$$\|T\|^2 = \sup_{\|x\|\leq 1} (Tx, Tx) = \sup_{\|x\|\leq 1} (T^2x, x) \leq \sup_{\|x\|\leq 1} \|T^2x\| \leq \|T^2\| \tag{5.17}$$

(3) $f(T)$ の自己共役性は自明であろう．$f(\sigma(T)) \subset \sigma(f(T))$ は難しくない．$\sigma(f(T)) \subset f(\sigma(T))$ は次のようにする．$a_n \neq 0$ とする．$\lambda \in \sigma(f(T))$ とする．λ は実数である．$f(t) - \lambda = 0$ の実根を重複度をこめて μ_i $(i = 1, \ldots, m)$ とすると正数 $c_1, \ldots, c_l$ が存在して ($i \neq j$ でも $c_i = c_j$ となり得ることに注意せよ)

$$f(t) - \lambda = a_n \prod_{1\leq i\leq m} (t - \mu_i) \cdot \prod_{1\leq j\leq l} (t^2 + c_j). \tag{5.18}$$

ただし，$n = 2l + m$ の関係があることに注意せよ．このことはいわゆる代数学の基本定理 (実数係数の多項式 $P(t)$ で定義される方程式 $P(t) = 0$ は必ず複素数の範囲で解を持つ) を複素数を用いないで述べたものである．従って，

$$a_n^{-1}(f(T) - \lambda) = \prod_{1\leq i\leq m} (T - \mu_i) \cdot \prod_{1\leq j\leq l} (T^2 + c_j) \tag{5.19}$$

$\lambda \in \sigma(f(T))$ だから $\inf\{\|(f(T) - \lambda)x\| \mid \|x\| = 1\} = 0$ となる．$T^2 + c_j$ は可逆な作用素だから

$$\inf\{\|(\prod_{1\leq i\leq m} (T - \mu_i))x\| \mid \|x\| = 1\} = 0.$$

このことから, ある i が存在して $\inf\{\|(T - \mu_i)x\| \mid \|x\| = 1\} = 0$ となること，すなわちある μ_i について $\mu_i \in \sigma(T)$ が示される．つまり $f(\mu_i) = \lambda$ である．
(4) まず

$$\|T^2\| = \sup\left\{|x| \mid x \in \sigma(T^2)\right\} \tag{5.20}$$

を示す．これが示されれば, $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$, (2),(3) より

$$\|T\|^2 = \|T^2\| = \sup\left\{|x| \mid x \in \sigma(T^2)\right\} = \sup\left\{x^2 \mid x \in \sigma(T)\right\}.$$

となり証明が終る．一般に有界線形作用素 T に対して, 問 6 より $\|T^2\| \geq \sup\left\{|x| \mid x \in \sigma(T^2)\right\}$.
さて、$\|T\|^2 \in \sigma(T^2)$ を示す。まず、

$$\sup_{\|x\|=1} (T^2x, x) = \sup_{\|x\|=1} (Tx, Tx) = \|T\|^2 = \|T^2\|. \tag{5.21}$$

ゆえに、

$$\begin{aligned} \inf_{\|x\|=1} \|(\|T\|^2 - T^2)x\|^2 &= \inf_{\|x\|=1} \left\{\|T\|^4 + \|T^2x\|^2 - 2\|T\|^2(T^2x, x)\right\} \\ &\leq \inf_{\|x\|=1} 2\|T\|^2 \left(\|T\|^2 - (T^2x, x)\right) = 0. \end{aligned} \tag{5.22}$$

(5.22) で (5.21) を用いた．したがって, (2) の結果より証明が終わる． □

Remark 20 T が自己共役でなければ $\sigma(T) = \{0\}$ かつ T がゼロ写像でないということはありうる．実際, $X = L^2([0,1])$ で

$$(Tf)(t) = \int_0^t f(s)ds$$

とおくと, Volterra 型の積分方程式のところで述べた Neumann 級数を用いる論法で $\sigma(T) = \{0\}$ がわかる．しかし $T \neq 0$. またこの T は自己共役ではない.

問 7 上の (注) の積分作用素 T について $\sigma(T) = \{0\}$ を示せ．さらに, T^* を求め，$T \neq T^*$ を示せ.

5.3 自己共役作用素のスペクトル分解 (I)

以下の内容は実ヒルベルト空間，複素ヒルベルト空間いずれでも成立する．スペクトル分解というのは，有限次元の場合は行列の対角化と同じことである．

Theorem 21 $X = \mathbb{C}^n$ または $\mathbb{R}^n$ とし内積は通常の内積とする．線形写像 $T : X \to X$ にはある行列 A が対応する．$X = \mathbb{C}^n$ のときは，T が自己共役とは ${}^t\bar{A} = A$, $X = \mathbb{R}^n$ のときは ${}^tA = A$ をみたすことと同値である．したがって，線形代数で学んだように T の固有値は全て実数で重複度も込めると n 個ある．その相異なる固有値を小さい順番に並べて $\alpha_1, \ldots, \alpha_k$ とする．固有値 α_i をもつ固有ベクトルの全体を X_i と書くと $i \neq j$ のとき $X_i \perp X_j$ である．更に，X_i への射影を P_i とすると

$$T = \sum_{i=1}^k \alpha_i P_i$$

が成立する．

一般の自己共役作用素に対してもこのような形の定理 (スペクトル分解定理と呼ばれる) が von Neumann により証明されている．その内容を紹介しよう．そのため，Theorem 21 を少し書き換えよう．まず $\lambda \in \mathbb{R}$ に対して射影作用素 $E(\lambda)$ を

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \sum_{\{i \mid \alpha_i \le \lambda\}} P_i \\ &= \left\{\oplus_{\{i \mid \alpha_i \le \lambda\}} X_i\right\} \text{への射影} \end{aligned} \tag{5.23}$$

と定める．これは次の性質を持つ．

(i) $\lambda < \mu$ ならば $\mathrm{Ran}E(\lambda) \subset \mathrm{Ran}E(\mu)$.

(ii) 任意の $x \in X$ に対して，$\lim_{\lambda\to\infty} E(\lambda)x = x$ かつ $\lim_{\lambda\to-\infty} E(\lambda)x = 0$.

(iii) 任意の $\mu \in \mathbb{R}$ と $x \in X$ に対して，$\lim_{\lambda\to\mu+0} E(\lambda) = E(\mu)$.

$\{\alpha_1, \ldots, \alpha_k\} \subset (a, b)$ となるように十分大きな区間 $[a, b]$ を取る．$[a, b]$ の分割

$$\Delta = \{a = c_0 < \ldots < c_m = b\}$$

を取り,

$$I(\Delta, E(\lambda)) = \sum_{i=0}^{m-1} c_i \left(E(c_{i+1}) - E(c_i)\right) \tag{5.24}$$

とおく．任意の $x \in X$ に対して,

$$\lim_{|\Delta|\to 0} I(\Delta, E(\lambda))x = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i P_i x = Tx \tag{5.25}$$

を示すことができる．従って，$\lim_{|\Delta|\to 0} I(\Delta, E(\lambda))$ で定まる作用素を $\int_a^b \lambda dE(\lambda)$ と書くと

$$T = \int_a^b \lambda dE(\lambda) \tag{5.26}$$

のように書けることがわかる．

Remark 22 一般に有界線形作用素 $\{T_n\}$ の列に対して，有界線形作用素 T が存在して，任意の $x \in X$ に対して $\lim_{n\to\infty} T_n x = Tx$ が成立するとき，T_n は T に強収束すると言う．$I(\Delta, E(\lambda))$ は T に強収束すると言える．

スペクトル分解定理はヒルベルト空間上の一般な自己共役作用素 T に対して，上記の (i),(ii),(iii) を満たす射影作用素の集合 $\{E(\lambda) \mid -\infty < \lambda < \infty\}$ が存在して

$$Tx = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda)\right) x \qquad x \in D(T)$$

と書けることを主張するものである．$\{E(\lambda)\}$ は単位の分解と呼ばれる．正確に述べよう．

Theorem 23 (スペクトル分解定理) ヒルベルト空間 $(X, (\ ,\ ))$ 上の自己共役作用素 $(T, D(T))$ を考える．このとき，射影作用素の族 $\{E(\lambda) \mid -\infty < \lambda < \infty\}$ で上記の性質 (i), (ii), (iii) を満たすものが一意的に存在し，次が成立する．

$$\begin{aligned} D(T) &= \left\{ x \in X \;\middle|\; \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\left(E(\lambda)x, x\right) < \infty \right\}, & (5.27) \\ Tx &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda)\right) x. & (5.28) \end{aligned}$$

上の定理の中の式は次のように定義されている．Δ は $[a, b]$ の分割である．

$$\begin{aligned} \int_a^b \lambda^2 d\left(E(\lambda)x, x\right) &= \lim_{|\Delta|\to 0} \sum_{i=0}^{m-1} c_i^2 \left\{(E(c_{i+1})x, x) - (E(c_i)x, x)\right\}, & (5.29) \\ \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\left(E(\lambda)x, x\right) &= \lim_{a\to-\infty, b\to+\infty} \int_a^b \lambda^2 d\left(E(\lambda)x, x\right) & (5.30) \\ \int_a^b \lambda dE(\lambda) &= \lim_{|\Delta|\to 0} I(\Delta, E(\lambda)). & (5.31) \end{aligned}$$

この定理の証明は易しくない．

- フーリエ解析と関数解析学 (新井仁之著, 培風館)
- 関数解析 III(伊藤清三, 岩波講座, 基礎数学)

を参照してほしい.

問 8 (1) $\lambda' > \lambda$ ならばすべての $x \in X$ について $(E(\lambda')x, x) \geq (E(\lambda)x, x) \geq 0$ であることを示せ. これを用いて, $a < a' < b' < b$ ならば $0 \leq \int_{a'}^{b'} \lambda^2 d(E(\lambda)x, x) \leq \int_a^b \lambda^2 d(E(\lambda)x, x)$ となることを示せ. このことから, (5.30) の右辺は単調増加であることがわかる.
ヒント：単位の分解 $E(\lambda)$ の性質 (ii) を用いよ.
(2) $\lim_{|\Delta| \to 0} I(\Delta, E(\lambda))$ は作用素ノルムに関して収束することを示せ.
ヒント：Δ, Δ' に対してその細分を取ってみよ.
(3) $a < b,\ c < d$ とする. $(a, b] \cap (c, d] = \emptyset$ のときすべての $x \in X$ に対して

$$\left(\int_a^b \lambda dE(\lambda)x, \int_c^d \lambda dE(\lambda)x \right) = 0$$

を示せ. $(a, b] \cap (c, d] \neq \emptyset$ のとき $\alpha = \max(a, c), \beta = \min(b, d)$ と定めると

$$\left(\int_a^b \lambda dE(\lambda)x, \int_c^d \lambda dE(\lambda)x \right) = \int_\alpha^\beta \lambda^2 d\left(E(\lambda)x, x\right)$$

を示せ.
(4) $x \in D(T)$ のとき, $\displaystyle\lim_{a \to -\infty, b \to \infty} \left(\int_a^b \lambda dE(\lambda) \right) x$ は収束することを示せ.

5.4 自己共役作用素のスペクトル分解 (II)

前のセクションで一般の自己共役作用素のスペクトル分解定理を紹介したが, 作用素が下に有界でレゾルベントがコンパクト作用素になるような場合 (有界領域の Dirichlet(または Neumann) 境界条件のラプラス作用素など) は一般論に頼らなくても比較的容易に証明できるので, それを説明する. まず, コンパクト作用素の定義を与え, その場合のスペクトル分解定理を述べる事にする.

Definition 24 $(X, \|\ \|)$ をノルム空間とする。$T \in L(X, X)$ がコンパクト作用素とはつぎが成立するときにいう：
　$\{x_n\}_{n=1}^\infty \subset X$ が $\sup_n \|x_n\|_X < \infty$ をみたすならば適当な部分列 $x_{n(k)}$ をとると $\lim_{k \to \infty} Tx_{n(k)}$ は収束する。

Remark 25 *X が有限次元のとき有界線形作用素は, つねにコンパクト作用素である.*

Example 26 (1) *$X = C([0, 1] \to \mathbb{R})$, ノルムは sup-norm とする. $K(x, y)$ を $(x, y) \in [0, 1]^2$ の連続関数とし, $(Tf)(x) = \int_0^1 K(x, y)f(y)dy$ とする. このとき, T はコンパクト作用素である.*
(2) $X = L^2([0, 1], dx)$ とする. $K(x, y)$ を $\iint_{[0,1]^2} K(x, y)^2 dxdy < \infty$ となる関数とする. $(Tf)(x) = \int_0^1 K(x, y)f(y)dy$ とおくと T はコンパクト作用素になる.

問 9 上の二つの例がコンパクト作用素になることを示せ。

Theorem 27 (コンパクト作用素のスペクトル分解定理) $S : X \to X$ をコンパクトな自己共役作用素とする．$\dim X = \infty$ とする．つぎの (1), (2) のどちらか一方のみが成立する．
(1) $\sigma(S)$ が有限集合のとき：
ある自然数 n が存在して, $\sigma(S) = \{\beta_1, \cdots, \beta_n\} \cup \{0\}$ となる．ただし, β_i は互いに相異なる 0 でない実数とする．このとき, 有限次元部分空間 $\{X_i\}_{i=1}^n$ で $X_i \perp X_j$ $(i \neq j)$ をみたすものが存在して, P_i を X から X_i への射影とすると,

$$Tx = \sum_{i=1}^{n} \beta_i P_i x. \tag{5.32}$$

とかける．
(2) $\sigma(S)$ が無限集合のとき：
このときは, $\sigma(S)$ が可算無限個の実数からなり, $\sigma(S) = \{\beta_i\}_{i=1}^\infty \cup \{0\}$ となる．ただし, β_i は互いに相異なる 0 でない実数である．さらに

(i) $\lim_{i\to\infty} \beta_i = 0$.

(ii) X の有限次元部分空間の列 X_i が存在して, $i \neq j$ ならば $X_i \perp X_j$ で X から X_i への射影を P_i と書くと, 任意の $x \in X$ に対して,

$$Sx = \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i P_i x. \tag{5.33}$$

とくに $x \in (\bigoplus_{i=1}^\infty X_i)^\perp$ のとき $Sx = 0$.

Remark 28 上の (2) (ii) であるが

$$\bigoplus_{i=1}^{\infty} X_i := \left\{ x \in X \mid \exists x_i \in X_i,\ x = \sum_{i=1}^{\infty} x_i \right\}$$

が定義である．X_i は S の固有値 β_i に対応する固有空間である．$X = \bigoplus_{i=1}^\infty X_i$ となることもありえる．$(\bigoplus_{i=1}^\infty X_i)^\perp = \emptyset$ ならば 0 は固有値では無いがスペクトル集合には属するということになる．
上の定理の S について，単位の分解 $E(\lambda)$ は

$$\bigoplus_{\{i \mid \beta_i \leq \lambda\}} X_i$$

への直交射影となる．

Proof 証明の概略をしるす.
まず,

(i) $\mu \in \sigma(S)$ $(\mu \neq 0)$ ならばある $x \neq 0$, $Tx = \mu x$ となる．

(ii) $Sx = \mu x$, $Sy = \nu y$, $\mu \neq \nu$ ならば $(x, y) = 0$.

(iii) 任意の $\mu \in \mathbb{R}$ $(\mu \neq 0)$ に対して, $\dim \{x \in X \mid Tx = \mu x\} < \infty$.

を示す.

次に, $\sigma(S)$ が有限集合かどうかで場合わけする.

• $\sigma(S)$ が有限集合のとき:

$0 \in \sigma(S)$ を示す。$\sigma(S) \setminus \{0\} = \{a_1, \cdots, a_n\}$ とする. $X_i = \{x \in X \mid Sx = a_i x\}$ とおくと (iii) より $\dim X_i < \infty$. $Y := (\oplus_{i=1}^n X_i)^\perp$ とおくと $\dim X = \infty$ より、$Y \neq \{0\}$. $SY \subset Y$ かつ S の Y への制限 $S|_Y$ はコンパクト作用素であることが示せる. $b \in \sigma(S|_Y)$, $b \neq 0$ とすると (i) より $\{x \in Y \mid Tx = bx\} \neq \emptyset$. しかしこれはありえない. ゆえに、$\sigma(T|_Y) = \{0\}$. Lemma 18 (4) より, $S|_Y = 0$ となる. したがって $0 \in \sigma(T)$ となる.

また、上の証明をみれば (1) が証明されたこともわかる。

• $\sigma(T)$ が無限集合のとき：

(iv) $\sigma(T)$ は 0 以外に集積点を持たない.

が (i), (ii) を用いて証明できる. これから $\sigma(T)$ が可算無限で (2) で述べているような集合になることがわかる. また, $(\bigoplus_{i=1}^\infty X_i)^\perp \neq \{0\}$ ならば $S|_{(\bigoplus_{i=1}^\infty X_i)^\perp} = 0$ もすぐわかる. □

問 10 上の (i), (ii), (iii), (iv) を証明せよ.

上の定理を用いて次の定理を示す。

Theorem 29 (レゾルベントがコンパクト作用素になる場合のスペクトル分解定理) $(T, D(T))$ を $(Tx, x) \geq C\|x\|^2$ $(x \in D(T))$ をみたす自己共役作用素とする. $\lambda < C$ のとき有界作用素 $(\lambda - T)^{-1}$ がコンパクト作用素と仮定する. このとき, 次が成立する.

(1) X の有限次元部分空間 X_n が存在して、$n \neq m$ ならば $X_n \perp X_m$ かつ

$$X = \bigoplus_{i=1}^{\infty} X_i. \tag{5.34}$$

(2) $+\infty$ に発散する狭義単調増加な数列 $\{\alpha_n\}_{n=1}^\infty$ で $\alpha_1 \geq C$ となるものが存在し, $D(A)$ は次のように特徴づけられる.

$$D(T) = \left\{ x \in X \;\middle|\; \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^2 \|P_n x\|_H^2 < \infty \right\}. \tag{5.35}$$

(3) $x \in D(T)$ に対して,

$$Tx = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n P_n x. \tag{5.36}$$

Proof. $S = (\lambda - T)^{-1}$ とおく. S は自己共役なコンパクト作用素で $\ker S = \{0\}$ だから, 0 に収束するような可算無限個の相異なる固有値 $\{\beta_i\}_{i=1}^\infty$ と対応する固有空間 X_i が存在して、

$$Sx = \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i P_i x. \tag{5.37}$$

$((\lambda - T)x, x) \leq (\lambda - C)\|x\|^2 \qquad x \in D(T)$ だから任意の $x (\neq 0) \in X$ について

$$(Sx, x) \leq 0. \tag{5.38}$$

従って，すべての i について $\beta_i < 0$. 適当に順番を付け直して, β_i は単調に増加して 0 に収束するようにできる．さて，形式的には $T = \lambda - S^{-1}$ だから (5.37) より、

$$\tilde{T}x = \sum_{i=1}^{\infty} \left(\lambda - \frac{1}{\beta_i} \right) P_i x. \tag{5.39}$$

とおくと $T = \tilde{T}$ となるはずである。このアイデアを遂行するため, 次のように考える.

(i) $\alpha_i = \lambda - \frac{1}{\beta_i}$ と定めると α_i は $+\infty$ に発散する単調増加数列である.

(ii) (5.35) の右辺で $\tilde{T}$ の定義域を定めると $(\tilde{T}, D(\tilde{T}))$ は自己共役作用素 ($D(\tilde{T})$ が dense であることも言う必要がある) になる．ただし, P_i は S を用いて決めた P_i である.

(iii) $S = (\lambda - \tilde{T})^{-1}$ を示すことにより $T = \tilde{T}$ を示す.

(iv) 最後に $\alpha_i \geq C$ を示す.

の順番で証明すればよい． $\square$

問 11 上の (i), (ii), (iii), (iv) を示して証明を完成させよ.

Remark 30 一般なスペクトル分解定理 (Theorem 23) との対応を見ておこう．Theorem 29 の状況にあるとき, T の単位の分解は

$$E(\lambda) = \sum_{\{i \ | \ \alpha_i \leq \lambda\}} P_i. \tag{5.40}$$

(5.40) の和は有限和である．また

$$\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d\left(E(\lambda)x, x\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i^2 \|P_i x\|^2 \tag{5.41}$$

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda) \right) x = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i P_i x \tag{5.42}$$

5.5 例

ここでは, 下に有界でレゾルベントがコンパクトになるような典型的な例をあげる．またレゾルベントがコンパクトにならないが重要な例もあげる.

Theorem 31 Example 13 (1)*Neumann* 境界条件のラプラス作用素，Remark 17 で定義した *Dirichlet* 境界条件のラプラス作用素について, Theorem 29 の仮定が成り立つ.

Example 32 上記定理で一番簡単な $D = (0, l)$ $(l > 0)$ の場合を考える．X を実ヒルベルト空間 $L^2((0, l), dx)$ とし，$T = \frac{d^2}{dx^2}$ を Neumann 境界条件 $u'(0) = u'(l) = 0$ のラプラス作用素とする．このとき，$e_0(x) = \sqrt{\frac{1}{l}}$, $e_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \cos\left(\frac{n\pi}{l} x\right)$ $(n = 1, 2,)$ とおくと $\{e_n\}$ $(n = 0, 1, \ldots)$ は T の固有値 $\lambda_n = -\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$ に対する固有関数で X の完全正規直交系をなす．$f \in X$ に対して,

$u(t,x)=\sum_{n=0}^{\infty} e^{t\lambda_n}(f,e_n)e_n(x)$ (和は X の要素としての和, (f,e_n) は X での内積) とおくと $u(t,x)$ は次の熱方程式の解になることがわかる：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) \qquad (t>0, x\in D)\\
u(0,x) &= f(x),\\
\left.\frac{\partial}{\partial x}u(t,x)\right|_{x=0,1} &= 0. \qquad (\text{Neumann 境界条件})
\end{aligned}$$

$p(t,x,y)=\sum_{n=0}^{\infty} e^{\lambda_n t}e_n(x)e_n(y)\quad (t>0, x,y\in D)$ とおくと $u(t,x)=\int_0^l p(t,x,y)f(y)dy$ となる．この $p(t,x,y)$ を上記の偏微分方程式の初期値問題の基本解と言う．$\int_0^l p(t,x,y)dy=1$, $p(t,x,y)=p(t,y,x)$ は簡単に示せる．上記の三角関数の和の形だとわかりにくいが，正値性 $p(t,x,y)>0$ も示すことができる．従って，$p(t,x,y)$ は D 上の確率密度関数である．実際，x から出発した反射壁ブラウン運動の推移確率密度関数が $p(t,x,y)$ である．このような基本解の表示は一般の D の場合でも成立するが，$e_n(x),\lambda_n$ などを求めるのは難しい．

問 12 $X=L^2(D,dx)$ で $T=\frac{d^2}{dx^2}$ で次の二つの境界条件について固有関数，固有値を求め，それぞれに対応する偏微分方程式の初期値問題について，Example 32 と同様なことをしてみよ．周期境界条件というのは，$(0,l)$ で 0 と l を同一視して円周上の関数と考えていることにあたる．
(1) (*Dirichlet* 境界条件) $u(0)=u(l)=0$.
(2) (周期境界条件) $u(0)=u(l), u'(0)=u'(l)$.

Theorem 33 $X=L^2(\mathbb{R}^n)$ とし、$T=-\Delta+V(x)$, $D(T)=C_0^{\infty}$ とする．$V(x)$ は実数値関数で任意の $0<R<0$ に対して $\sup_{\|x\|\le R}|V(x)|<\infty$ かつ $\lim_{\|x\|\to\infty}V(x)=+\infty$ をみたすとする．Example 13 (3) より，$(T,D(T))$ は本質的自己共役である．これの自己共役拡張は Theorem 29 の仮定をみたす.

上記の Theorem 31, Theorem 33 において，考えている作用素が下に有界な作用素であることは比較的容易に示せる．レゾルベントがコンパクトになることは，次の Rellich の定理による．

Theorem 34 $\Omega\subset\mathbb{R}^n$ を有界領域とする．$C_0^{\infty}(\Omega)$ 上の次の内積を考える．$f,g\in C_0^{\infty}(\Omega)$ に対して，

$$(f,g)_{H_0^1}=\int_\Omega\sum_{i=1}^n\frac{\partial f}{\partial x_i}(x)\frac{\partial g}{\partial x_i}(x)\ dx. \tag{5.43}$$

このとき，$\{f_n\}_{n=1}^{\infty}\subset C_0^{\infty}(\Omega)$ が $\sup_n\|f_n\|_{H_0^1}<\infty$ をみたすならば，L^2 のノルムで収束する部分列 $\{f_{n(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ が存在する．

この定理をどう用いて上記定理を証明するかアイデアを述べよう (正確な証明にはなっていない).
Theorem 31 の証明：

$$\sup_n\|(1-T)f_n\|_X<\infty$$

のとき, f_n の収束部分列を選び出せればよい. 実は,

$$\begin{aligned}\int_\Omega f_n(x)^2dx+\|f_n\|_{H_0^1}^2 &= \int_\Omega f_n(x)^2dx+\int_\Omega(-\Delta f_n)(x)f_n(x)dx \qquad (5.44)\\ &= ((1-T)f_n,f_n)\\ &\le \|(1-T)f_n\|_X^2 \qquad (5.45)\end{aligned}$$

だから, Rellich の定理より, OK となる. (5.44) で部分積分の公式を用いた.
Theorem 33 の証明：

仮定より $C:=\inf_{x\in\mathbb{R}^n}V(x)>-\infty$. 問 4 より、$(1+|C|+A)^{-1}$ は X 上の有界線形作用素である. これがコンパクトであることを示す. $\{f_n\}\subset X$ が

$$\|(1+|C|+A)f_n\|_X\le 1 \qquad (5.46)$$

をみたすとする. このことから $\|f_n\|_X\le 1$ がわかる. 仮定より任意の正数 ε に対して, 十分大きな $R>0$ をとると, $\inf_{\|x\|\ge R-1}V(x)\ge\varepsilon^{-1}$. (5.46) より,

$$\int_{\|x\|\ge R-1}V(x)f_n(x)^2dx\le 1.$$

したがって

$$\int_{\|x\|\ge R-1}f_n(x)^2dx\le\varepsilon. \qquad (5.47)$$

φ_R を

$$\varphi_R(x)=\begin{cases}1 & \text{if } \|x\|\le R-1\\ 0 & \text{if } \|x\|\ge R\end{cases} \qquad (5.48)$$

となるようにとる. ただし、$\sup_x|\varphi_R(x)|\le 1$ かつ $\sup_{x,i}\left|\frac{\partial\varphi_R}{\partial x_i}(x)\right|\le 2$ となるようにする. すると,

$$\begin{aligned}\left\|\frac{\partial}{\partial x_i}(f_n\varphi_R)\right\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}=\int_{\|x\|<R+1}\left|\frac{\partial(f_n\varphi_R)}{\partial x_i}\right|^2dx &\le 2\int_{\mathbb{R}^n}\left|\frac{\partial f_n}{\partial x_i}\right|^2dx+8\int_{\mathbb{R}^n}f_n(x)^2dx\\ &\le 2\int_{\mathbb{R}^n}(-\Delta f_n)(x)f_n(x)dx+8\\ &\le 10. \qquad (5.49)\end{aligned}$$

したがって, Rellich の定理により, $\{f_n\varphi_R\}_{n=1}^\infty$ の中から $L^2(\mathbb{R}^n)$ のノルムで収束する部分列が選べる. この事と (5.47) を用いると, $\{f_n\}$ の適当な部分列が $L^2(\mathbb{R}^n)$ で収束することがわかる.

最後に重要な例をもう一つあげる.

Example 35 $X=L^2(\mathbb{R}^3)$ とし, $T=-\Delta-\frac{1}{\|x\|}$, $D(T)=C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ とする. この T は種々の物理定数を無視すればクーロンポテンシャルの中を動く荷電粒子の量子力学的運動を表すシュレーディンガー作用素である. このとき, $\inf_x-\frac{1}{\|x\|}=-\infty$ だから Example 13 (3) の定理を用いて本質的自己共役性は示せない. しかし, 次の加藤-Rellich の定理と Theorem 37 を用いると, 本質的自己共役性がわかる. しかし, T のレゾルベントはコンパクトではない.

Theorem 36 (加藤-Rellich) $(S, D(S))$ をヒルベルト空間 X 上の自己共役作用素とする．$(B, D(B))$ を対称作用素で
(1) $D(S) \subset D(B)$
(2) ある $0 \le \delta < 1$ と $C \ge 0$ が存在してすべての $x \in D(S)$ に対して，

$$\|Bx\| \le \delta\|Sx\| + C\|x\| \tag{5.50}$$

となるとする．このとき，$S + B$ は $D(S)$ を定義域として，自己共役作用素である．

Theorem 37 任意の $0 < \delta < 1$ に対して C を十分大きくとれば，全ての $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ に対して，

$$\sup_{x\in\mathbb{R}^3} |f(x)| \le \delta\|\Delta f\|_{L^2} + C\|f\|_{L^2}. \tag{5.51}$$

問 13 Theorem 37 を用いて，$S = -\Delta$,

$$(Bf)(x) = \frac{1}{\|x\|} f(x) \tag{5.52}$$

$$D(B) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^3) \mid \frac{f(x)}{\|x\|} \in L^2 \right\} \tag{5.53}$$

と定めると，Theorem 36 の条件をみたすことを示せ.

問 14 Example 35 の T について，ある $M \in \mathbb{R}$ が存在して $\sigma(T) \subset [M, \infty)$ を示せ.

5.6 スペクトルの分類

スペクトル分解定理を用いると自己共役作用素に対して，そのスペクトルとヒルベルト空間の元をより詳細に分類することができる．これは，量子力学ではヒルベルト空間の元は波動関数，すなわち量子力学的粒子の状態を表しているが，それが散乱状態にある，束縛状態にあるなどと言うことの一般化にあたる．以下，$(T, D(T))$ は自己共役作用素，$E(\lambda)$ はその単位の分解とする．また，$a < b$ のとき，$E((a, b]) = E(b) - E(a)$ と定義する．まずスペクトル集合の特徴づけを与える．

Proposition 38 $\lambda \in \sigma(T)$ となるための条件は任意の $\varepsilon > 0$ に対して $\mathrm{Ran}\, E((\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon]) \ne \emptyset$.

Definition 39 (1) λ が T の多重度有限の固有値でかつ $\sigma(T)$ の孤立点であるものの全体を $\sigma_{disc}(T)$ と書き，離散スペクトル (discrete spectrum) という．
(2) $\sigma_{ess}(T) = \sigma(T) \setminus \sigma_{disc}(T)$ を T の本質的スペクトル (真性スペクトルともいう，英語では essential spectrum) という．
(3) T の固有値全体の集合 (すなわち $x \ne 0$ で $Tx = \lambda x$ となる λ 全体) を $\sigma_p(T)$ と書き，点スペクトル (point spectrum) と呼ぶ.

Remark 40 点スペクトルが本質的スペクトルであることもある．

シュレーディンガー作用素に対して，本質的スペクトルが分かる例を与える．

Theorem 41 $L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ で $T = -\Delta + V$, $D(T) = C_0(\mathbb{R}^n)$ を考える．ただし，$n = 3$ のときは $V \in L^2(\mathbb{R}^n, dx)$, $n \geq 4$ のときはある $p > n/2$ が存在して $V \in L^p(\mathbb{R}^n, dx)$ を仮定する．このとき $(T, D(T))$ は本質的自己共役である．この自己共役拡張 T について $\sigma_{ess}(T) = [0, \infty)$.

とくに $\sigma(-\Delta) = \sigma_{ess}(-\Delta) = [0, \infty)$ である．

Theorem 42 Example 13 (3) をみたす $L^2(\mathbb{R}^N, dx)$ 上のシュレーディンガー作用素 $T = -\Delta + V$ を考える．さらに $\liminf_{x \to \infty} U(x) = c$ を仮定する．このとき $\sigma_{ess}(T) \subset [c, \infty)$.

本質的スペクトルの特徴づけを与える．

Theorem 43 次の条件は同値である．
(1) $\lambda \in \sigma_{ess}(T)$.
(2) λ は $\sigma(T)$ の集積点であるかまたは多重度無限の孤立固有値である．
(3) 任意の $\varepsilon > 0$ に対し，$\dim\ \mathrm{Ran}\ E((\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon]) = \infty$.
(4) λ に対して以下の性質をみたす $\{x_n\}$ が存在する．

(i) $\{x_n\} \subset D(T)$.

(ii) $\{x_n\}$ は正規直交系である．

(iii) $\lim_{n \to \infty} \|(\lambda - T)x_n\| = 0$.

T の連続スペクトルの概念を $E(\lambda)$ を用いて，導入する．

Definition 44 (1) X_p を T の固有ベクトル全体で張られる空間の閉包と定義する．
(2) X_c を $(E(\lambda)x, x)$ が λ の連続関数になるような x の全体と定義する．
(3) X_{ac} を $(E(\lambda)x, x)$ が λ の絶対連続関数になるような x の全体と定義する．

Remark 45 関数 $F(t)$ $(t \in \mathbb{R})$ が絶対連続関数であるとは次が成立するときに言う：
• 任意の $\varepsilon > 0$ に対して $\delta > 0$ が存在して，互いに共通部分の無い有限列 $\{(a_i, b_i] \mid 1 \leq i \leq n\}$ が $\sum_{i=1}^n (b_i - a_i) < \delta$ を満たせば $\sum_{i=1}^n |F(b_i) - F(a_i)| < \varepsilon$ となる．

絶対連続関数は有界変動な連続関数である．実は $F(t)$ が絶対連続関数であることと次は同値である：

• $F(t)$ はほとんどすべての t で微分可能かつ任意の $-\infty < a < b < +\infty$ に対して $F' \in L^1([a, b], dt)$ であり，さらに
$$F(b) - F(a) = \int_a^b F'(t)dt \tag{5.54}$$
が成立する．ただし，(5.54) の右辺の積分はルベーグ積分である．

Theorem 46 (1) X_c, X_{ac} は X の閉部分空間である．さらに $X = X_p \oplus X_c$ と直交分解される．
(2) $T(D(T) \cap X_c) \subset X_c$. さらに $\left(T|_{D(T) \cap X_c}, D(T) \cap X_c\right)$ は X_c 上の自己共役作用素である．

Definition 47 Theorem 46 (2) の自己共役作用素 $(T|_{D(T) \cap X_c}, D(T) \cap X_c)$ のスペクトル集合を $\sigma_c(T)$ と書き，T の連続スペクトルという．

Remark 48 場の量子論では連続スペクトルに含まれる固有値を埋蔵固有値とよび，その解析は重要な問題である．参考文献として「フォック空間と量子場」(新井朝雄著) をあげておく．

X_p, X_c, X_{ac} に属するベクトルの特徴的な性質を説明しよう．そのため，いくつか定義を置く．以下の議論で時間パラメータとして T を使う所があるので，自己共役作用素を H と書くことにする．

Definition 49 H を $\mathbb{C}$ 上のヒルベルト空間 X 上の自己共役作用素，$E(\lambda)$ をその単位の分解する．$t \in \mathbb{R}$ に対して，X 上の有界線形作用素

$$\int_a^b e^{-\sqrt{-1}\lambda t} dE(\lambda) := \lim_{|\Delta| \to 0} \sum_{i=0}^{m} e^{-\sqrt{-1}c_i t} \left(E(c_{i+1}) - E(c_i) \right) \tag{5.55}$$

を定義する (上記極限は作用素ノルムの意味での収束であることが証明できる)．ただし $\Delta = \{a = c_0 < \cdots < c_m = b\}$ は区間 $[a, b]$ の分割である．作用素の強収束の意味で

$$U(t) := e^{-\sqrt{-1}tH} := \lim_{a \to -\infty, b \to +\infty} \left(\int_a^b e^{-\sqrt{-1}\lambda t} dE(\lambda) \right) \tag{5.56}$$

と定義する．

Remark 50 (1) $U(t)$ はユニタリ作用素 ($\|U(t)x\| = \|x\| \ \forall x \in X$) でありかつ次の方程式を満たす．

$$\frac{d}{dt} U(t)x = -\sqrt{-1} H U(t) x \qquad (t \in \mathbb{R}) \tag{5.57}$$

$$U(0)x = x \tag{5.58}$$

これは $H = -\Delta + V$ のときはシュレーディンガー方程式である．
(2) 自己共役作用素 H に対して，より一般に複素数値関数 $f(\lambda)$ に対して作用素 $f(H)$ をその単位の分解を用いて

$$f(H) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) dE(\lambda)$$

として定義できる．f が実数値のとき，$f(H)$ は自己共役作用素となる．$f(\lambda)$ が一般の可測関数のとき，上記左辺の積分をルベーグ式の積分で意味をつけることができる．H が有界作用素で，多項式 $f(\lambda) = \sum_{k=0}^n a_k \lambda^k$ のときは，(5.55) と同様に右辺を定義すればよい．このとき

$$\sum_{k=0}^{n} a_k H^k = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) dE(\lambda)$$

が成立する．

Theorem 51 $H = -\Delta + V$ を $X = L^2(\mathbb{R}^n \to \mathbb{C}, dx)$ 上のシュレーディンガー作用素とする．
(1) $u \in X_p$ ならば

$$\lim_{R \to \infty} \sup_{t > 0} \int_{\{x \ | \ |x| \geq R\}} |e^{-t\sqrt{-1}H} u(x)|^2 dx = 0. \tag{5.59}$$

(2) V は $-\Delta$-コンパクトとする．$u \in X_c$ ならば

$$\lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \left(\int_{\{x \ | \ |x| \leq R\}} |e^{-t\sqrt{-1}H} u(x)|^2 dx \right) dt = 0, \qquad \forall R > 0. \tag{5.60}$$

(3) V が $-\Delta$-コンパクトとする．$u \in X_{ac}$ ならば

$$\lim_{t\to\pm\infty}\int_{\{x\ |\ |x|\le R\}} |e^{-t\sqrt{-1}H}u(x)|^2 dx = 0, \qquad \forall R > 0. \tag{5.61}$$

Remark 52 V が $-\Delta$-コンパクトの定義は次の通り：

• $\{u_n\} \subset D(-\Delta)$ が $\sup_n \|u_n\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} < \infty$, $\sup_n \|-\Delta u_n\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} < \infty$ をみたせば，$\{V\cdot u_n\}_n$ は $L^2(\mathbb{R}^n)$ で収束する部分列を持つ．

例えば

(i) $V \in L^2(\mathbb{R}^n)$

(ii) $\lim_{|x|\to\infty} V(x) = 0$

のいずれかを満たせば $-\Delta$-コンパクトである．

上の定理の意味を解説しよう．$\displaystyle\int_A |e^{-t\sqrt{-1}H}u(x)|^2 dx$ はシュレーディンガー方程式に従う量子力学的粒子が時刻 t に集合 A に見出される確率を表す．従って，上記の定理は次のような物理的な意味がある．

(1) $u \in X_p$ から出発すると粒子は遠方に飛び去ることは無い (束縛状態, bound state)

(2) $u \in X_c$ のとき長時間平均を見ると粒子は時間発展とともに有限な範囲で見出される確率は小さくなる, すなわち無限遠に飛び去る (散乱状態, scattering states)

(3) $u \in X_{ac}$ のとき，時間が経過すると (あるいは無限の過去に遡っていくと) 有限な範囲に粒子が見出される確率は小さくなる (より強い散乱状態)

以上の数理物理的な側面は Reed-Simon の本,「スペクトル理論」(黒田成俊著, 岩波講座，基礎数学) を参照して欲しい．