入門:線形代数学とその物理への応用

目次

Made by R. Okamoto (Emeritus Prof., Kyushu Institute of Technology)
Filename=linear-algbra-intro20190417.ppt

1. 物理学における行列とその固有値問題

古典物理学における応用例:

結合した二つ以上の振動系の運動方程式と規準振動

量子力学における応用例:

物理量に対応する線形演算子

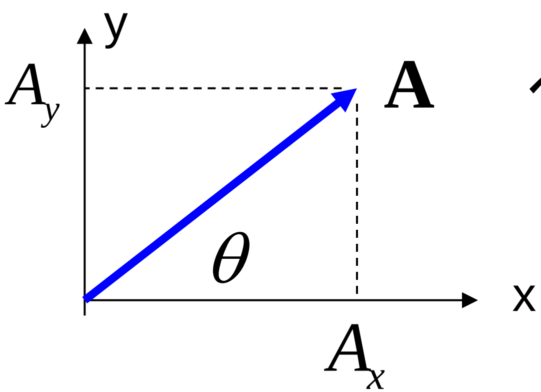
（数学では線形作用素;linear operator)、

シュレーディンガー方程式の固有値と固有関数

2. ベクトルとその性質

2.1 ベクトルの記法

以下、簡単のために、ベクトルと行列の最少構成である2次元ベクトル、(2x2)行列を考えるが、n次元に一般化することは容易である。



ベクトル(vector)とは大きさと向きをもつ量である。

ベクトルの大きさA

$$A \equiv \sqrt{A_x^2 + A_y^2}$$

ベクトルの傾き

$$\tan\theta = \frac{A_y}{A_x}$$

しかし、矢印でベクトルを記法は種々の計算には便利ではないので、以後、*n*次元の成分をもつベクトルAを1行n列の行列で表す。

$$\mathbf{A} \equiv A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y = (A_x, A_y)$$

$$\equiv \begin{bmatrix} A_x \\ A_y \end{bmatrix} \equiv |A\rangle$$ (ケット-A, ket-Aと読む)

転置行列

$$\mathbf{A}^T \equiv [A_x, A_y]; T \equiv \text{transpose}$$

括弧(bracket)→bra + ket

$$[A_x^*, A_y^*] \equiv \langle A|$$ (ブラ-A, bra-Aと読む)

デイラック(P.M.A.Dirac)記法

以下、種々の応用を想定して、ベクトルの成分は一般に複素数であるとする。

$$\mathbf{A} \equiv \begin{bmatrix} A_x \\ A_y \end{bmatrix}, \mathbf{B} \equiv \begin{bmatrix} B_x \\ B_y \end{bmatrix}$$

ベクトルの定数倍 $$k\mathbf{A} = \begin{bmatrix} kA_x \\ kA_y \end{bmatrix}$$

２つのベクトルの和と差 $$\mathbf{A}+\mathbf{B} = \begin{bmatrix} A_x + B_x \\ A_y + B_y \end{bmatrix}, \mathbf{A}-\mathbf{B} = \begin{bmatrix} A_x - B_x \\ A_y - B_y \end{bmatrix}$$

ひとつのベクトルのエルミート共役ベクトル(hermitian-conjugate vector)

$$\mathbf{A}^\dagger \equiv (\mathbf{A}^t)^* = \begin{bmatrix} A_x^*, A_y^* \end{bmatrix}; (^*\text{: 複素共役）}$$

(†:ダガーと読む。dagger,短剣の意味)

$< A | B >$はbra-A ket-Bと読む(発音する）.

2つのベクトルの内積（スカラー積）

$$< A | B > \equiv (\mathbf{A}^\dagger \bullet \mathbf{B}) \equiv \begin{bmatrix} A_x^*, A_y^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_x \\ B_y \end{bmatrix} = A_x^* B_x + A_y^* B_y.$$

$$\rightarrow < A | A > = (\mathbf{A}^\dagger \bullet \mathbf{A}) = A_x^* A_x + A_y^* A_y \equiv |\mathbf{A}|^2.$$

３．行列の加減と乗除と種類

ここでは、行列(matrix) AをAの上にhat記号をつけて表す。

$$\hat{A} \equiv (A_{ij}) \equiv \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}, \hat{B} \equiv (B_{ij}) \equiv \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$$

行列の定数倍

$$k\hat{A} = (kA_{ij}) = \begin{bmatrix} kA_{11} & kA_{12} \\ kA_{21} & kA_{22} \end{bmatrix}$$

行列の和と差

$$\hat{A} + \hat{B} = \begin{bmatrix} A_{11} + B_{11} & A_{12} + B_{12} \\ A_{21} + B_{21} & A_{22} + B_{22} \end{bmatrix}, \hat{A} - \hat{B} = \begin{bmatrix} A_{11} - B_{11} & A_{12} - B_{12} \\ A_{21} - B_{21} & A_{22} - B_{22} \end{bmatrix}$$

行列の積

$$\hat{A}\,\hat{B} \equiv \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{bmatrix}$$

逆行列

$$\hat{A}^{-1}; \hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \hat{1}$$

行列の積の順序は一般には交換可能ではない（非可換）

$$\hat{A}\,\hat{B} \equiv \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}B_{11}+A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12}+A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11}+A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12}+A_{22}B_{22} \end{bmatrix}$$

$$\hat{B}\,\hat{A} \equiv \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{11}A_{11}+B_{12}A_{21} & B_{11}A_{12}+B_{12}A_{22} \\ B_{21}A_{11}+B_{22}A_{21} & B_{21}A_{12}+B_{22}A_{22} \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\,\hat{A} = \begin{bmatrix} A_{12}B_{21}-B_{12}A_{21} & A_{11}B_{12}+A_{12}B_{22}-B_{11}A_{12}-B_{12}A_{22} \\ A_{21}B_{11}+A_{22}B_{21}-B_{21}A_{11}-B_{22}A_{21} & A_{21}B_{12}-B_{21}A_{12} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 19 & 24 \\ 43 & 50 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 23 & 34 \\ 31 & 46 \end{bmatrix}$$

変数xの関数f(x)のべき級数展開 $f(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \cdots$

同じ行列の積は同じ行列の
べき乗と定義する。

$$\hat{A}\hat{A} \equiv \hat{A}^2,\ \hat{A}\hat{A}\hat{A} \equiv \hat{A}^3, \cdots, \overbrace{\hat{A}\cdots\hat{A}}^{n} \equiv \hat{A}^n$$

行列の関数のべき級数展開

$$f(\hat{A}) = c_0 \hat{1} + c_1 \hat{A} + c_2 \hat{A}^2 + \cdots$$

行列の転置と対称行列

ある行列Aの転置（T, transpose）または転置行列

$$\hat{A} \equiv \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \rightarrow \hat{A}^T \equiv \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} \\ A_{12} & A_{22} \end{bmatrix}, (\hat{A}^T)_{ij} = A_{ji}$$

行列の転置の例：

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \rightarrow \hat{A}^T \equiv \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$$

一般には $\hat{A}^T \neq \hat{A}$ である。しかし、$\hat{A}^T = \hat{A}, A_{ji} = A_{ij}$ であれば **対称行列（symmetric matrix)** という。

対称行列の例：

$$\hat{S} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 5 \\ 5 & 4 \end{bmatrix} \rightarrow \hat{S}^T = \begin{bmatrix} 1 & 5 \\ 5 & 4 \end{bmatrix} = \hat{S}$$

複素行列のエルミート共役(共役転置,または随伴)

$$\hat{A} \equiv \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \to \hat{A}^{\dagger} \equiv \begin{bmatrix} A_{11}^{*} & A_{21}^{*} \\ A_{12}^{*} & A_{22}^{*} \end{bmatrix}, \ (\hat{A}^{\dagger})_{ij} = A_{ji}^{*}$$

(†:ダガーと読む。dagger,短剣の意味)

一般に、ある行列とそのエルミート共役は等しくない

$$\hat{A}^{\dagger} \neq \hat{A}$$

ある(複素)行列のエルミート共役の例:

$$\hat{A} \equiv \begin{bmatrix} 2+3\mathrm{i} & 4+5\mathrm{i} \\ 6-7\mathrm{i} & 8+9\mathrm{i} \end{bmatrix}$$

$$\to \hat{A}^{\dagger} \equiv (\hat{A}^{*t}) = \begin{bmatrix} 2-3\mathrm{i} & 6+7\mathrm{i} \\ 4-5\mathrm{i} & 8-9\mathrm{i} \end{bmatrix} \neq \hat{A}$$

エルミート行列(自己随伴行列)

しかし、特に、$\hat{A}^{\dagger} = \hat{A}$ であれば、

行列Aを**エルミート行列(Hermitian matrix)　,**

または自己共役

あるいは自己随伴行列(self -adjoint matrix)という。

エルミート行列の対角要素は必ず実数になるが、非対角要素
は一般には複素数である。

エルミート行列の例:

$$\hat{H} \equiv \begin{bmatrix} 2 & 4+5\mathrm{i} \\ 4-5\mathrm{i} & 8 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \hat{H}^{\dagger} \equiv (\hat{H}^{*t}) = \begin{bmatrix} 2 & 4+5\mathrm{i} \\ 4-5\mathrm{i} & 8 \end{bmatrix} = \hat{H}$$

ベクトルへの行列の演算

一般に、行列を左から列ベクトルをかけると、別のベクトルに変化する。

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

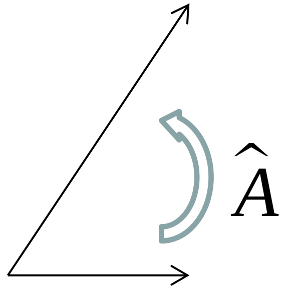
一般に

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11}x + A_{12}y \\ A_{21}x + A_{22}y \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix},$$

大きさの変化 $1 \to \sqrt{1^2 + 3^2} = \sqrt{10}$

偏角の変化

$$\tan\theta = 0 \to \tan\theta = 3$$



行列がベクトルに作用すると、
一般には大きさだけではなく、
ベクトルの方向も変化する！！

4. 固有値と固有ベクトルの計算(1):実対称行列の対角化

$$\hat{A}=\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}$$

実対称行列の固有値の計算

$$\rightarrow\begin{bmatrix}2 & -1\\ -1 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}$$

行列を作用させてもベクトルの方向が変化しないような固有のベクトルが存在する！
λ:固有値

$$\rightarrow\begin{cases}2x-y=\lambda x\\ -x+2y=\lambda y\end{cases}$$

$$\rightarrow\begin{cases}(2-\lambda)x-y=0\\ -x+(2-\lambda)y=0\end{cases}$$

$$\rightarrow\begin{vmatrix}2-\lambda & -1\\ -1 & 2-\lambda\end{vmatrix}=0$$

x=y=0という自明な解以外の解が存在するためには、係数行列の行列式がゼロであるべき

$$\rightarrow(2-\lambda)^2-1=0$$

$$\rightarrow(\lambda-1)(\lambda-3)=0$$

$$\therefore\lambda_1\equiv1,\ \lambda_2=3$$

実行列の固有ベクトルと直交変換行列の計算

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = \lambda_1 \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix},$$

$$(x_1)^2 + (y_1)^2 = 1$$

固有ベクトルの規格性

$$\rightarrow \begin{cases} (2-\lambda_1)x_1 - y_1 = 0 \\ -x_1 + (2-\lambda_1)y_1 = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix};$$

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} = \lambda_2 \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix},$$

$$(x_2)^2 + (y_2)^2 = 1$$

$$\rightarrow \begin{cases} (2-\lambda_2)x_2 - y_2 = 0 \\ -x_2 + (2-\lambda_2)y_2 = 0 \end{cases} \rightarrow \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow [x_1, y_1]\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} = 0$$

固有ベクトルの直交性

$$\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ y_1 & y_2 \end{bmatrix} \equiv \hat{U} \rightarrow \hat{U}^T \hat{U} = \hat{U}\hat{U}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \hat{I},$$

直交変換

$$\rightarrow \hat{U}\hat{A}\hat{U}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$$

5. 固有値と固有ベクトルの計算(2):エルミート行列の対角化

あるエルミート行列: $A_{ji}^{*} = A_{ij}$ (*は複素共役)

$$\hat{A} \equiv \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix} \to \hat{A}^{\dagger} \equiv \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix} = \hat{A} \quad (^{\dagger}\text{はダガーと読む})$$

固有値の計算法

$$\begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

$$\text{with } |x|^2 + |y|^2 = 1$$

規格化条件

$$\to \begin{cases} \lambda x + \mathrm{i}y = 0 \\ \mathrm{i}x - \lambda y = 0 \end{cases}$$

同次連立一次方程式

$$\to 0 = \begin{vmatrix} \lambda & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & -\lambda \end{vmatrix}$$

x=y=0という自明な解以外の解が存在するためには、係数行列の行列式がゼロであるべき

$$= \lambda^2 - 1$$

$$\to \lambda_1 = 1, \lambda_2 = -1$$

エルミート行列の行列要素は一般には複素数であるが,
固有値は実数である!

エルミート行列の固有ベクトルとユニタリ変換

$$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = \lambda_1 \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} \quad \text{with } |x_1|^2 + |y_1|^2 = 1$$

固有値λ_1に属する固有ベクトル：$\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix}$

$$\to \begin{cases} \lambda_1 x_1 + i y_1 = 0 \\ i x_1 - \lambda_1 y_1 = 0 \end{cases}$$

固有ベクトルの規格性

列ベクトル

$$\to \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} = \lambda_2 \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} \quad \text{with } |x_2|^2 + |y_2|^2 = 1$$

固有値λ_2に属する固有ベクトル：$\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix}$

$$\to \begin{cases} \lambda_2 x_2 + i y_2 = 0 \\ i x_2 - \lambda_2 y_2 = 0 \end{cases}$$

列ベクトル

$$\to \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} x_1^* & y_1^* \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} = 0$$

固有ベクトルの直交性

$$\hat{U} \equiv \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ y_1 & y_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{bmatrix} \to \hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}$$

ユニタリ変換

$$\to \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

エルミート行列のユニタリ変換による対角化

行列の固有値問題＝行列の対角化問題

６．２つの行列の同時対角化

同時対角化＝2つの異なる行列が共通の(固有)ベクトルにより対角化されること

同時固有ベクトル、同時対角化が可能である条件

if $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ and $[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$, 二つの行列が交換可能であれば

$$\rightarrow |a\rangle = \frac{1}{a}\hat{A}|a\rangle$$

$$\rightarrow \hat{B}|a\rangle = \frac{1}{a}\hat{B}\hat{A}|a\rangle$$

$$= \frac{1}{a}\hat{A}\hat{B}|a\rangle$$

$$\rightarrow \hat{A}\left(\hat{B}|a\rangle\right) = a\left(\hat{B}|a\rangle\right)$$

$$\rightarrow \hat{B}|a\rangle \propto |a\rangle$$

$$\therefore \hat{B}|a\rangle = b|a\rangle$$

a:行列$\hat{A}$のある固有値,

$|a\rangle$:行列$\hat{A}$のある固有値aに属する固有ベクトル,

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \rightleftarrows \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} * \\ * \end{bmatrix} = a\begin{bmatrix} * \\ * \end{bmatrix}$$

ここで, bの値を計算する.

$\hat{B}|a\rangle = b|a\rangle$の両辺のそれぞれと左から$\langle a|$との内積を考える.

$$\rightarrow \langle a|\hat{B}|a\rangle = b\langle a|a\rangle$$

$$\rightarrow b = \frac{\langle a|\hat{B}|a\rangle}{\langle a|a\rangle}$$

参考書

和達三樹「物理のための数学」、岩波書店、2000年。
特に、2章と3.1節。

押川元重、坂口紘治「基礎線形代数(三訂版）」、1997年。

Nielsen, Chuang, 量子コンピュータと量子通信１
(量子力学とコンピュータ科学)、コロナ社、2000年。
特に、2.1節　線形代数。