線型代数

相澤 拓海

2020 年 8 月 14 日

1　ベクトル空間 (線型空間)

少し量子力学を勉強すると量子状態をベクトル (ケットベクトル) と対応させる考え方が出てくる。つまり、ある特定の量子状態を指定するということはベクトル空間からある一つのベクトルを取り出す作業になる。したがって、ベクトル空間の性質を知っておくことが重要になるのでベクトル空間についてざっと見ていく。

定義 1. ベクトル空間の定義

あるベクトルの集合 V を考える。V は空集合ではない $V \neq \emptyset$ とする。また、和とスカラー倍の演算が定義されている ($\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y} \in V$ かつ $a\boldsymbol{x} \in V$)。任意の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \in V$ とスカラー a, b に対して

(1) $(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})+\boldsymbol{z} = \boldsymbol{x}+(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z})$
(2) $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}+\boldsymbol{x}$
(3) $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{0} = \boldsymbol{0}$
(4) $\boldsymbol{x}+(-\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$
(5) $(ab)\boldsymbol{x} = a(b\boldsymbol{x})$
(6) $1\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$
(7) $a(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}) = a\boldsymbol{x}+a\boldsymbol{y}$
(8) $(a+b)\boldsymbol{x} = a\boldsymbol{x}+b\boldsymbol{x}$

の 8 つを満たすならば、V はベクトル空間 (線型空間) と呼び、その元をベクトルという。

ベクトル空間でも線型空間でもどっちでもいいっぽい。これはすごく重要。当たり前かもしれないが実ベクトル空間 $\mathbb{R}^n$ は上記の条件を満たし、ベクトル空間となっている。量子力学では複素ベクトルが量子状態に対応するので興味があるのは $\mathbb{C}^n$ である。複素数の演算から $\mathbb{C}^n$ もベクトル空間である。n 組の複素数を $(z_1, z_2 \cdots z_n)$ としてベクトルはこれらを縦に並べて

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} \tag{1}$$

定義 1 から和の演算 (addition operation) が定義されているので以下が成り立つ。

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} z'_1 \\ z'_2 \\ \vdots \\ z'_n \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} z_1+z'_1 \\ z_2+z'_2 \\ \vdots \\ z_n+z'_n \end{bmatrix} \tag{2}$$

また、スカラー倍が定義されているので、以下の乗算が成り立つ。z は複素スカラーである。

$$z\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} zz_1 \\ zz_2 \\ \vdots \\ zz_n \end{bmatrix} \tag{3}$$

結構当たり前かもしれないが重要な気がする。ところで複素数はなぜ z を使うのか。高校の時も z を使っていた気がする。

2　ブラベクトルとケットベクトル

普通はベクトルを表す場合は太字か矢印を使うと思う。つまり、$\boldsymbol{\psi}$ や $\vec{\psi}$ として

$$\boldsymbol{\psi} = \vec{\psi} = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix} \tag{4}$$

と書くことが多い。しかしながら量子力学ではブラッケット記法という書き方をすることが多いのでまとめておく。まず、上記の $\boldsymbol{\psi}$ や $\vec{\psi}$ というのはケットベクトル $|\psi\rangle$ と書く。

$$\boldsymbol{\psi} = \vec{\psi} = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix} \equiv |\psi\rangle \tag{5}$$

一方、エルミート共役 (複素共役をとって転置、† を付ける) を取ったものはブラベクトル $\langle\psi|$ と書く。

$$\boldsymbol{\psi}^\dagger = {}^t(\boldsymbol{\psi}^*) = \vec{\psi}^\dagger = {}^t(\vec{\psi}^*) = [\psi_1^*, \psi_2^* \cdots \psi_n^*] \equiv \langle\psi| \tag{6}$$

ブラベクトルとケットベクトルをこのように書いてあげると内積がシンプルに書けるようになる。ベクトルの成分が複素数の場合に $|\psi\rangle$、$|\psi'\rangle$ の内積は以下のように書けるはずである。(実数の場合も包括している。)

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{bmatrix}, |\psi'\rangle = \begin{bmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \\ \vdots \\ \psi'_n \end{bmatrix} \tag{7}$$

$$|\psi\rangle \cdot |\psi'\rangle = \psi_1^*\psi'_1 + \psi_2^*\psi'_2 + \cdots + \psi_n^*\psi'_n \tag{8}$$

式（8）の左辺の点は内積を表す。式 (8) と式 (6) を見比べ、行列の掛け算を思い出すことで内積が以下のように簡単にかけることが分かる。

$$\langle\psi|\psi'\rangle = \psi_1^*\psi'_1 + \psi_2^*\psi'_2 + \cdots + \psi_n^*\psi'_n \tag{9}$$

(9) 式の左辺のように書くことで内積を表す。要するに結局、ブラとかケットとか書いてるが、行列の計算さえわかればこの先の計算もついていける感じがする。

3　基底と線型独立

$|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle$ の n 組のベクトルで張られたベクトル空間における任意のベクトル $|v\rangle$ は $|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle$ を用いて線型結合の形で書ける。

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i |v_i\rangle \tag{10}$$

a_i は係数である。例としてよく出てくるベクトル空間 $\mathbb{C}^2$ の場合を考えてみる。