読書ノート：線形代数の半歩先

tomixy

2025 年 3 月 23 日

目次

はじめに

数式を眺める視点を、いろいろと

行列にはベクトルをうまく操作するための装置としての役割もある

ベクトルを別のベクトルに変換するものとしての行列、という見方もできる

その先に、関数を別の関数に変換するものを考え、これが行列とつながり、さらに時間発展する系の記述ともつながる…と話は続く

* * *

半歩先から見える景色を

線形代数は便利な道具でもあり、世界を捉えるための思考方法でもある

入力に対して出力を対応させるという少し抽象的いな「コト」を、数値がならんだベクトルや行列という具体的な「モノ」で表現する、それを可能にするのが線形代数

関数という「曲がってうねる形」を、具体的な数値のならびに書き下せること、さらには、一つの対象をさまざまに表現できること、線形代数が教えてくれるこれらは、現実世界の問題をどのように数学の言葉で記述して、どのように計算機で処理していくのかを考えるうえで、とても役立つ

「数の集まり」に「演算」を追加

集まるだけでは面白くないので

数学では、要素が集まった集合を考えるのが基本

そこにたとえば足し算の演算を入れると、要素間を行き来できるようになる

実数の集合を考えたとき、$7.4 + 6.4 = 13.8$ のように、二つの要素を足すことで別の要素に移れる

また、関係性まで考えるとさらに応用の幅が広がる

関係性の一つの例は「距離」

ベクトルや行列と同じような「集合・演算・関係性」をもつ対象なら、その類似性を使ってベクトルや行列で扱える

* * *

足し算が豊かさを与えてくれる

ベクトルに演算を導入すると、別のベクトルと行き来できるようになる

この演算を入れたものを線形空間という

* * *

線形空間の定義

たとえば和を計算したときに、結果として得られた要素が考えている集合からはみ出てしまっては困る

演算で集合の要素を行き来でき、その演算の結果が想定外にならない安全な場所、というのが線形空間

実際には、線形空間 V は以下の性質を満たすものとして定義できる

1. $c\boldsymbol{x} \in V$（スカラー倍しても V からはみ出ません）

2. $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} \in V$（足し算でもはみ出ません）
3. $(c_1c_2)\boldsymbol{x} = c_1(c_2\boldsymbol{x})$（スカラー倍は分離できます）
4. $1\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$（1 というスカラー倍は要素を変えません）
5. $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} + \boldsymbol{x}$（足し算の順番は交換できます）
6. $\boldsymbol{x} + (\boldsymbol{y} + \boldsymbol{z}) = (\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) + \boldsymbol{z}$（前半、後半、どちらを先に計算しても同じ）
7. $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{0} = \boldsymbol{x}$ となるベクトル $\boldsymbol{0}$ が存在する（零元があります）
8. $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$ となるベクトル $\boldsymbol{u}$ が存在し、このベクトル $\boldsymbol{u}$ を $-\boldsymbol{x}$ と書く、すなわち $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$（逆元、つまり負符号もあります）
9. $c_1(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) = c_1\boldsymbol{x} + c_1\boldsymbol{y}$（足してからスカラー倍、スカラー倍してから足す、が同じ）
10. $c_1\boldsymbol{x} + c_2\boldsymbol{x} = (c_1 + c_2)\boldsymbol{x}$（スカラー倍だけ先に計算も可能）

一次結合がすべての基本

組み合わせるという視点

演算によってベクトル同士を行き来できるようになると、あるベクトルをほかのベクトルを使って表現できる

スカラー倍と和のみを使った形を一次結合もしくは線形結合という

*　*　*

一次結合の係数を求める方法

$\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ によって $\boldsymbol{c}$ を書き表すときの係数は、一般には連立方程式を使って求める

$$\boldsymbol{c} = \lambda_1\boldsymbol{a} + \lambda_2\boldsymbol{b}$$

から、$\boldsymbol{c}$ の各要素 c_i に対して以下が成り立つ

$$c_i = \lambda_1 a_i + \lambda_2 b_i$$

ただし、連立方程式の解がない場合もある

*　*　*

分解するという視点

分解できる場合もあれば、できない場合もある

これは、先ほどの「組み合わせる」という視点において、一次結合を作っても一部のベクトルしか再現できない、ということ

*　*　*

空間を生成するという視点

r と s は実数から自由に選べるとすると、$\boldsymbol{x} = r\boldsymbol{a}_1 + s\boldsymbol{a}_2$ でさまざまなベクトル $\boldsymbol{x}$ を表現できる

それらを集めると平面が形作られていき、実はこの平面も線形空間になっている

このように一次結合で線形空間を作ることができ、その「もと」となるベクトルのことを生成元という

無駄をはぶく

よい矢印、余分な矢印

ある矢印 $\boldsymbol{x}$ を、他の矢印の一次結合の形で書きたいとき、

- 2 次元系を考えているから 2 つあれば十分、3 つは冗長
- 「平行」なものが 2 つだと不十分

などが言える

無駄なものをはぶく、必要最低限で済ます、線形代数にもそれを表すための概念がきちんと用意されている

*　*　*

したがうことは、お互いさま

一次従属は、線形従属とも呼ばれる

「従属」という言葉からわかるように、何かが何かにしたがっている

たとえば、互いをスカラー倍だけで表現できているベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2$ を考える

$$\boldsymbol{a}_1 = -\boldsymbol{a}_2, \quad \boldsymbol{a}_2 = -\boldsymbol{a}_1$$

自分自身をほかの矢印を使って表現できているので、$\boldsymbol{a}_1$ は $\boldsymbol{a}_2$ にしたがっているし、逆も然り

また、$\boldsymbol{a}_1$ と $\boldsymbol{a}_2$ の一次結合で表せるベクトル $\boldsymbol{a}_3$ は、この 2 つの矢印 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2$ にしたがっている

$$\boldsymbol{a}_3 = 2\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2$$

* * *

従属は「組」に対する概念

ここで大切なのは、何かしらの「組」を考えたときに「それらが従属の関係にある」かどうかを判断できること

何かが何かにしたがっていれば、逆のことも言える

たとえば、$\boldsymbol{a}_3 = 2\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2$ は、

$$\boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{a}_3 - 2\boldsymbol{a}_1$$

とも書ける

ほかをしたがえているように見えて、実は自分がしたがっていて…という関係にある

ベクトルの組を考え、どれか 1 つのベクトルがほかのベクトルの一次結合で表せるときに、それらのベクトルの組は一次従属である、と言う

たとえば、$\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3\}$ は一次従属である

一次従属であれば、余分なものが含まれている

そこで、次に一次従属ではないものを考える

* * *

従属していなければ独立

線形空間 V に属する N 個のベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_N$ および N 個の実数 $c_1, c_2, \ldots, c_N$ に対して、

$$c_1\boldsymbol{a}_1 + c_2\boldsymbol{a}_2 + \cdots + c_N\boldsymbol{a}_N = 0$$

が成立するのが $c_1 = c_2 = \cdots = c_N = 0$ の場合に限られるとき、ベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_N$ は一次独立であると言う

一次独立の場合、互いに表現できないため、無駄がないとわかる

* * *

一次独立の定義を噛み砕く

一次独立の定義に出てきた式

$$c_1\boldsymbol{a}_1 + c_2\boldsymbol{a}_2 + \cdots + c_N\boldsymbol{a}_N = 0$$

に対して、たとえば $c_1 \neq 0$ とする

これは一次独立の条件 $c_1 = c_2 = \cdots = c_N = 0$ を破っている

今は $c_1 \neq 0$ なので、式を

$$\boldsymbol{a}_1 = -\frac{c_2}{c_1}\boldsymbol{a}_2 - \cdots - \frac{c_N}{c_1}\boldsymbol{a}_N$$

と変形できる

すると、$\boldsymbol{a}_1$ をほかのベクトルで表現できてしまっているので、一次従属であることがわかる

c_1 以外が 0 でない場合も同様なので、条件 $c_1 = c_2 = \cdots = c_N = 0$ を満たすときのみ、このような式変形ができない

これが一次独立の状況である

* * *

「基底」は、必要十分なもの

ベクトルの一次結合を使って空間を過不足なく表現できる「必要十分であるもの」、それが基底

2 次元空間の基底は、平行でない 2 つのベクトルである

3 次元空間に埋め込まれている平面は、2 つの平行でないベクトルの一次結合で表現可能なので、そ

の 2 つのベクトルは、3 次元空間の中にある部分空間の基底となる

基底は、「注目している空間」を過不足なく、必要十分に表現できるもの
余分であれば削る必要がある
また、考えている基底で表現できる空間が、もっと大きな空間の部分空間になっていることもある

* * *

一次独立かどうかが鍵

D 次元空間 $\mathbb{R}^D$ を考えたとき、その部分空間 $V \subset \mathbb{R}^D$ を作り出すベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}'_D$ を考える
このとき、これらの生成元が一次独立ならば、$\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}'_D\}$ を V の基底と言う

一次従属だと、互いを互いで表現できてしまうので、余分なものがあるとわかる
基底であるかどうかの鍵は、一次独立性があるかどうかである

なお、上の定義において、$D' \leq D$ であることに注意
部分空間として、たとえば 3 次元空間中の平面を考えると、$D' = 2$ および $D = 3$ である
3 次元空間中で考えても必ずしも 3 次元空間すべてを表現する必要はない

基底と呼ぶときには、どのような線形空間を考えているのかにも注意が必要である

方法を決めれば表現は「一つ」

基底が変われば、座標は変わる

ベクトル $\boldsymbol{x} = 2\boldsymbol{a}_1 + 3\boldsymbol{a}_2$ を、いわゆる「座標」で表現する場合、どのように書くだろうか？

直感的には「右に 2 つ、上に 3 つ」と簡単に捉えて、$[2, 3]^\top$ と考えられる
しかし、これは基底として $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2\}$ を考えていたから

一次結合の係数をならべたものが「座標」だが、「座標」というのは使っている基底の情報とセットでないと意味をなさないもの
特定の表現方法、つまり基底を決めてこそ、数をならべたベクトルを作ることができる

これを利用すれば、基底を変えることで目的の計算に便利なベクトルを作ることもできる

* * *

表現方法はいろいろでも本質は「一つ」

基底の選び方はたくさんあるが、基底を決めてしまえば表現方法は一つに定まる
つまり、基底が決まれば「座標」は一意に決まる

表現したい矢印やベクトル（本質）は一つ
基底の選び方は表現方法の違いであり、基底を一つに決めれば、表現の仕方は一意に定まる

* * *

そもそもどうやって無駄なものを知るの？

基底は無駄をはぶいたものだが、そのためには行基本変形などで一次独立かどうかを調べる必要がある

内積で近さを測る

ベクトル同士の関係性を知る方法

集合だけだと身動きできないが、演算によって互いを行き来できるようになった
ただし、2 つのベクトルを取り出したときに、それらが似ているかどうかを議論するためには道具が

少し必要となる

それがベクトルの内積である

矢印で考えた場合、内積は次のように定義された

1. $\overrightarrow{x}$ と $\overrightarrow{y}$ のなす角を θ とする
2. ベクトル $\overrightarrow{x}$ の大きさを $|\overrightarrow{x}|$、ベクトル $\overrightarrow{y}$ の大きさを $|\overrightarrow{y}|$ とする
3. $\overrightarrow{x}$ と $\overrightarrow{y}$ の内積を $\overrightarrow{x} \cdot \overrightarrow{y} = |\overrightarrow{x}||\overrightarrow{y}|\cos\theta$ とする

矢印で記述できる場合にはこれでも大丈夫だが、想像できないような 4 次元以上の高次元では、角度 θ から出発するわけにはいかない

そのため、順番を逆にして定義していく

* * *

内積はスカラー値を与える関数

内積を「二つのベクトルを引数にとり、スカラー値を返す関数」として捉えてみる

ただし、どんな関数でもよいわけではなく、いくつかの性質を満たす必要がある

2 つのベクトル $\boldsymbol{a}_1$ と $\boldsymbol{a}_2$ を考える

これらは D 次元空間内の矢印だとし、それぞれのベクトルを成分に分けて以下のように書くことにする

$$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} a_{1,1} \\ a_{1,2} \\ \vdots \\ a_{1,D} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} a_{2,1} \\ a_{2,2} \\ \vdots \\ a_{2,D} \end{bmatrix}$$

1 つ目の添え字はどちらのベクトルかを指定するもので、2 つ目の添字が空間の次元を示す

これら 2 つのベクトルの内積を以下のように定義する

$$\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_2 = \sum_{d=1}^{D} a_{1,d} a_{2,d}$$

ベクトルの要素ごとにかけ算をして足し合わせる、というだけ

* * *

内積の「書き方」は一つではない

内積の記法はいくつかある

- $\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_2$
- $(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2)$
- $\boldsymbol{a}_1^\top \boldsymbol{a}_2$
- $\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_2 \rangle$

$\boldsymbol{a}_1 \cdot \boldsymbol{a}_2$ の記法は、本書では今後は使わない

$(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2)$ では括弧が閉じていて、2 つのベクトルを用いていることがわかりやすい

これは数学でよく使う

$\boldsymbol{a}_1^\top \boldsymbol{a}_2$ は、すでに行列について学んだ人にはわかりやすい表記

ただし、本書では先にこの記法を導入しておく

縦向きにならんだベクトルを横向きに転置した $\boldsymbol{a}_1^\top$ を左側に置き、右側のベクトル $\boldsymbol{a}_2$ とならべて書いたときに、「要素ごとの積の総和」を意味することにする

$\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_2 \rangle$ の記法は物理学、特に量子力学の分野でよく用いられるもの

* * *

内積の「定義」ですら一つではない

実は内積と呼ばれる量はこれだけに限らない

たとえば物理学の一般相対性理論では曲がった空間を考える

すると、ベクトル同士の関係性が、空間の曲がり方によって変わる

内積は関係性を議論するための道具なので、曲がった空間には曲がった空間なりの関係性、つまり内積が定義される

形式的な定義を与えたとき、その具体的な可能性はいろいろとあり得るのが数学のよいところ
答えや手段が一つに決まらないのは不安かもしれないが、逆に言えば、たくさんの可能性のなかから目的にあったものを選び取れるということ

* * *

内積の形式的な定義

ここでは $\mathbb{R}$ 上の線形空間 V を考える
このとき、2 つのベクトルを引数にとり、実数を返す関数 $(\cdot,\cdot): V \times V \to \mathbb{R}$ として、次の性質を満たすものを内積と呼ぶ
なお、ここでは $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w} \in V$、$c \in \mathbb{R}$ とする

1. $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{v},\boldsymbol{u})$
2. $(c\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{u},c\boldsymbol{v}) = c\,(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})$
3. $(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{u},\boldsymbol{w}) + (\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})$, $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) + (\boldsymbol{u},\boldsymbol{w})$
4. $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}) \geq 0$, $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}) = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{u} = 0$

1 番目は対称性を意味しており、順番を変えても結果が変わらない
2 番目と 3 番目の性質は双線形性と呼ばれるもの
4 番目は、自分自身との内積は負の値にならないことを意味している

* * *

線形代数という言葉にも使われている線形性についても触れておこう
関数 $f: V \to \mathbb{R}$ が線形であるとは、以下の 2 つの性質を満たす場合を言う
ここでは $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v} \in V$、$c \in \mathbb{R}$ とする

1. $f(c\boldsymbol{u}) = cf(\boldsymbol{u})$
2. $f(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}) = f(\boldsymbol{u}) + f(\boldsymbol{v})$

つまり、スカラー倍や和などの演算をしてから f に入れるのと、先に f に入れてから演算をするのは同じ、ということ
関数を使うタイミングと演算をするタイミングを入れ替えられるので、計算がとても楽になる

先ほどの双線形性は、引数が 2 つの場合なので「双」がつく

* * *

これらを満たせばすべて内積なので、今後、内積を使った議論が出てきた場合には、自分好みの内積を定義して当てはめることができる

* * *

ブラケット記号は「閉じた」形

縦方向に数が並んだベクトルに対応する記号として $|\boldsymbol{a}_1\rangle$ を導入する
これをケットベクトルと呼ぶ
本書では単にケットと呼ぶこともある
たとえば以下のようなもの

$$|\boldsymbol{a}_1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 7 \end{bmatrix}, \quad |\boldsymbol{a}_2\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{bmatrix}$$

そしてこれらを横倒しに転置したものがブラベクトル

$$\langle\boldsymbol{a}_1| = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 7 \end{bmatrix}, \quad \langle\boldsymbol{a}_2| = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

本書では単にブラと呼ぶこともある

英語で括弧のことをブラケット（bracket）と言う
左側に来る $\langle\boldsymbol{a}_1|$ などがブラ（bra）、右側に来る $|\boldsymbol{a}_2\rangle$ がケット（ket）、つなぎとしてアルファベットの c を追加してあげれば、「bracket」の完成

この表記だと括弧が閉じるので、ブラベクトルとケットベクトルがセットになることもわかりやすい

内積はスカラー、つまり単なる数を与えるので、$\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_2 \rangle$ が出てきたらスカラーとして扱える

今は具体的なベクトルを考えたが、記法を変えたのでもう少し抽象的なものとして捉えることができる

「無限個の数字がならんだベクトル」を扱うときに、この表記が便利

大きさ、距離、さらなる解釈

自分自身の大きさは自分自身との内積

ほかのベクトルとの関係性を見る前に、自分自身との関係性を見てみよう

つまりベクトルの大きさである

ベクトルの大きさは、要素ごとの 2 乗を計算し、和をとって、その平方根をとったもの

D 次元ベクトル $\boldsymbol{a}_1$ の場合には、

$$\|\boldsymbol{a}_1\| = \sqrt{a_{1,1}^2 + a_{1,2}^2 + \cdots + a_{1,D}^2} = \sqrt{\sum_{d=1}^{D} a_{1,d}^2}$$

と書ける

ここで、$\|\boldsymbol{a}_1\|$ の記号はノルムと呼ばれる

わざわざ新しい言葉を導入したのは、今後を見すえて概念を広く捉えるため

また、上式の形のノルムを特に $\|\boldsymbol{a}_1\|_2$ と書くこともある

要素ごとの 2 乗を考えているので右下添字として 2 をつけた、と捉えられる

ちなみに、上式を次のように書き換えられる

$$\|\boldsymbol{a}_1\| = \sqrt{\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_1 \rangle}$$

内積を使って、ノルムを定義できるということになる

* * *

ノルムの定義も一つではない

以下の 3 つの性質を満たすものはすべてノルム

1. $\|\boldsymbol{u}\| \geq 0$ であり、また $\|\boldsymbol{u}\| = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{u} = 0$
2. $c \in \mathbb{R}$ に対して $\|c\boldsymbol{u}\| = |c|\|\boldsymbol{u}\|$（$|c|$ は通常の絶対値）
3. $\|\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}\| \leq \|\boldsymbol{u}\| + \|\boldsymbol{v}\|$

1 番目は、「大きさがゼロのベクトルは、ゼロベクトル」であることを意味している

* * *

互いがどれだけ離れているかを測る

ここで導入する関係性は距離

距離としては、離れているものほど大きな値を、近いほど小さな値を返すような関数を考えればよい

また、負の距離というのは不自然なので、ゼロ以上の値を返してほしい

イメージをもつために矢印で考えると、ベクトル $\boldsymbol{c} = \boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2$ の大きさが、まさに距離としての性質を備えている

$$d(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2) = \|\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_2\|$$

このノルムで定義された関数 $d(\cdot, \cdot) : V \times V \to \mathbb{R}$ が、2 つのベクトルの距離を与える

もし自分自身との距離を考えると、距離がゼロになることもわかる

ノルムの性質から負の値を返さないこともわかる

＊　＊　＊

距離もやはり…

以下の性質を満たすような集合 V 上の関数 $d : V \times V \to \mathbb{R}$ はすべて距離である

なお、$\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in V$ とする

1. $d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) \geq 0$、また、$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}$ ならば $d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = 0$（距離はゼロ以上、また、同じベクトルであれば距離はゼロ）
2. $d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = d(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{u})$（対称性があり、どちらから測っても距離は同じ）
3. $d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) + d(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) \geq d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{w})$（三角不等式：三角形の 2 辺の長さを足すと、もう 1 辺の長さと等しい、もしくは大きくなる）

＊　＊　＊

内積、ノルム、距離はすべて必要？

距離の概念を一般化した位相空間の議論もある

本書では集合のあとで演算を導入したが、演算はさておき、集合に対していくつかの性質を満たす開集合を定義することで、位相を導入できる

この位相は距離の概念と関係する

さらに、もっとも近いもの、つまり「同じ」ものも、こちらで決められる

何をしたいのかに応じて、一見違うものを同一視してしまう、これが数学のすごさである

＊　＊　＊

内積のいろいろな見方

1. $(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2)$：内積は…2 つの「ベクトル」を引数にとる関数？
2. $\boldsymbol{a}_1^\top \boldsymbol{a}_2$：内積は…「ベクトルの転置」とベクトルのかけ算？
3. $\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_2 \rangle$：内積は…状態を「測定」するもの？

今回はわかりやすさのために、「互いの関係性」という形で内積を紹介した

1 つ目の見方は、2 つのベクトルを引数にとって、その関係性を返す関数

2 つのベクトルは同等で、どちらが特別ということはない

2 つ目の見方では、右側の $\boldsymbol{a}_2$ は数が縦方向にならんだ列ベクトル

本書では列ベクトルを基本とするため、基本的なベクトル $\boldsymbol{a}_2$ と、もう一つ別のベクトル $\boldsymbol{a}_1$ を使った、という見方ができる

なお、ベクトルの内積は行列の掛け算と関係する

そのため、2 つ目の見方は内積というよりは単に「要素ごとの積の総和」という計算方法として捉えやすい見方である

これは計算機にとって、とても便利な見方

3 つ目の見方のブラケット表記は、ブラとケットを単なるベクトルと捉えれば、単に「2 つ目の見方を違う書き方にしたもの」である

しかし、ブラケット表記を使うと、具体的にならんだ数のイメージから離れることができる

＊　＊　＊

ケットが「状態」でブラは「観測装置」

本書では列ベクトルを基本とする

多くの応用においても、やはり列ベクトルが基本

そのため、ケットが基本的なものである

数式や状態をこのケットとして与えて、これが考えるべき対象、となる

では、ブラとは何だろうか？

そもそも無限の数が並んだベクトルや、多項式など

のもう少し抽象的な概念は計算機では扱いづらい

一方、スカラー値は便利

そのために、抽象的なものを入れたら具体的な値を返してくれるもの、つまり「関数」を考えていくことになる

少し視点を変えて、現実的な実験を考える

目の前にある実験対象はとても複雑で、そのすべてを詳細に調べることは難しそう

そこで、何かしらの観測装置を使って、出てきた数値を調べる

最終的に値を返すもの…やはり「関数」である

ケットという「状態」に対して、結果としてスカラー値を返すような「関数」を考えたいのだが、そのための「観測装置」がブラ

実際、ブラをケットに作用させると内積になる

内積はスカラー値を与えるもので、スカラー値なら扱いが簡単

＊　＊　＊

いくつかの空間の定義

内積・ノルム・距離の概念は空間を考える上で大切なもの

完備という用語は、ざっくりと言ってしまえば、空間上の要素の「列」を考えて、その列の極限を考えても空間内に収まってくれること

はみ出たりしないので、とても性質のよいもの

ノルムが定義されている完備な線形空間としてバナッハ空間、内積が定義されている完備な線形空間としてヒルベルト空間がある

考える空間を限定することで数学的に厳密な議論が可能になり、より強い主張のある結果が得られる

必ずしも内積を使ってノルムを定義する必要はない

内積を入れられれば自然にノルムと距離を定義できるが、いきなりノルムを考える場合もある

内積を入れても入れなくてもよい、という意味で、バナッハ空間は適用範囲の広い議論ができる

このあたりは関数解析に関わる話題

どちらの基底が好み？

多くの場合によい形がある

これまで見てきたように、「基底は一つではない」、さらには「内積やノルム、距離も一つではない」と、何でもありの感じだった

そのなかで便利なものを選んで議論することが大切

＊　＊　＊

描けない角度を内積を使って定義

先ほどは互いの距離を内積から定義したが、今度は互いが作る角度を考える

矢印ならば簡単にイメージできる

そもそも 2 つ矢印のなす角度を用いて内積を定義することもできた

しかし、4 次元以上になると矢印による解釈を使えないので、順番を変えて内積から…という話だった

そのため、素朴には内積およびベクトルのノルムを使って、逆に角度を定義してあげる

つまり、

$$\cos\theta = \frac{\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_2 \rangle}{\|\boldsymbol{a}_1\|\|\boldsymbol{a}_2\|}$$

で角度 θ を定義する

＊　＊　＊

高次元空間でも 90° は直交を意味する

矢印を思い描けない高次元空間でも、角度が 90° などだと 2 つのベクトルは直交すると言う

「など」と書いたのは −90° でも直交であり、ほかにもたくさん直交する角度があるから

そのため、

$$\cos\theta = \frac{\langle \boldsymbol{a}_1 \,|\, \boldsymbol{a}_2 \rangle}{\|\boldsymbol{a}_1\|\|\boldsymbol{a}_2\|}$$

で定義される左辺がゼロになるときに直交と考えるのがよさそう

つまり、2 つのベクトル $\langle \boldsymbol{a}_i|$ と $\langle \boldsymbol{a}_j|$ に対して、

$$\left\langle \boldsymbol{a}_i \,\middle|\, \boldsymbol{a}_j \right\rangle = 0 \quad \text{もしくは} \quad \left\langle \boldsymbol{a}_j \,\middle|\, \boldsymbol{a}_i \right\rangle = 0$$

のとき、これらのベクトルは直交の関係にある

ここで、内積の性質から i と j の左右を入れ替えても値は変わらないことを利用した

* * *

直交していると計算がすごく簡単になる

基底とは、考えたい空間を生成する「必要十分なもの」、つまり一次独立なベクトルの組だった

直交している必要はないが、直交していれば互いに一次結合の形で表現できないので、確実に基底になっている

なぜ直感的に直交する基底のほうが「よい」と感じるのか、その理由を考えてみる

今は素朴にブラ $\langle\cdot|$ を行ベクトル、ケット $|\cdot\rangle$ を列ベクトルと考える

* * *

基底として「直交してはいないが、一次独立」の $\{|\boldsymbol{a}_1\rangle, |\boldsymbol{a}_2\rangle\}$ を用いるとする

そして、この基底を用いてベクトル $|\boldsymbol{x}\rangle$ を、

$$|\boldsymbol{x}\rangle = c_1\,|\boldsymbol{a}_1\rangle + c_2\,|\boldsymbol{a}_2\rangle$$

と表現しておく

「基底はいろいろあるが、基底を決めれば表現は一つ」なので、c_1 と c_2 は一意に定まる

これらを求めるために、左から $\langle \boldsymbol{a}_1|$ と $\langle \boldsymbol{a}_2|$ をかけ算しよう

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{a}_1 \,|\, \boldsymbol{x} \rangle &= c_1\,\langle \boldsymbol{a}_1 \,|\, \boldsymbol{a}_1 \rangle + c_2\,\langle \boldsymbol{a}_1 \,|\, \boldsymbol{a}_2 \rangle \\
\langle \boldsymbol{a}_2 \,|\, \boldsymbol{x} \rangle &= c_1\,\langle \boldsymbol{a}_2 \,|\, \boldsymbol{a}_1 \rangle + c_2\,\langle \boldsymbol{a}_2 \,|\, \boldsymbol{a}_2 \rangle
\end{aligned}$$

ブラケット記号が閉じている $\langle \boldsymbol{a}_1 \,|\, \boldsymbol{a}_2 \rangle$ や $\langle \boldsymbol{a}_1 \,|\, \boldsymbol{x} \rangle$ などの形の部分はスカラーであり、具体的なベクトルが与えられれば簡単に計算できる（内積を計算するだけ）

すると、式が 2 つ、未知変数も 2 つなので、連立方程式を解けば c_1 と c_2 が求まる

今は基底が 2 つだけなので、基底から作られる線形空間の次元は 2、つまり平面である

もし基底の数が D 個なら、D 次元空間が作られ、式の数も D 個、未知変数も D 個になる

よって、D 元連立一次方程式を解くことになる

* * *

次に基底として「直交している」$\{|\boldsymbol{u}_1\rangle, |\boldsymbol{u}_2\rangle\}$ を用いる

$|\boldsymbol{x}\rangle$ を基底で表現する一次結合を考えてみると、

$$|\boldsymbol{x}\rangle = d_1\,|\boldsymbol{u}_1\rangle + d_2\,|\boldsymbol{u}_2\rangle$$

なお、先ほどと同じ c_1 と c_2 を使っているが、基底が違うので、別のものだと捉えるように注意

左から $\langle \boldsymbol{u}_1|$ と $\langle \boldsymbol{u}_2|$ をかけ算すると、

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{u}_1 \,|\, \boldsymbol{x} \rangle &= c_1\,\langle \boldsymbol{u}_1 \,|\, \boldsymbol{u}_1 \rangle + c_2\,\langle \boldsymbol{u}_1 \,|\, \boldsymbol{u}_2 \rangle \\
\langle \boldsymbol{u}_2 \,|\, \boldsymbol{x} \rangle &= c_1\,\langle \boldsymbol{u}_2 \,|\, \boldsymbol{u}_1 \rangle + c_2\,\langle \boldsymbol{u}_2 \,|\, \boldsymbol{u}_2 \rangle
\end{aligned}$$

直交しているので $\langle \boldsymbol{u}_1 | \boldsymbol{u}_2 \rangle = 0$、$\langle \boldsymbol{u}_2 | \boldsymbol{u}_1 \rangle = 0$ などが成立して、

$$c_1 = \frac{\langle \boldsymbol{u}_1 | \boldsymbol{x} \rangle}{\langle \boldsymbol{u}_1 | \boldsymbol{u}_1 \rangle}$$
$$c_2 = \frac{\langle \boldsymbol{u}_2 | \boldsymbol{x} \rangle}{\langle \boldsymbol{u}_2 | \boldsymbol{u}_2 \rangle}$$

という式が得られる

内積を簡単に計算できるのは先ほどと同様だが、今回は連立方程式を解く必要がない

この意味で、直交する基底、すなわち直交基底は便利で「よい」と言える

直交は作れる

直交するように係数を選ぶ

シュミットの直交化法と呼ばれる方法により、直交基底を作ることもできる

例として、次の 3 つのベクトルを生成元とする線形空間を考える

$$|\boldsymbol{a}_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\boldsymbol{a}_2\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\boldsymbol{a}_3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

まず 1 つ、ベクトル $|\boldsymbol{a}_1\rangle$ を選ぶ

次に $|\boldsymbol{a}_1\rangle$ に直交する基底を作りたいのだが、何でもよいわけではない

生成元から作られる空間を考えたいので、ここでは $|\boldsymbol{a}_2\rangle$ を材料に使う

$c \in \mathbb{R}$ として、

$$|\tilde{\boldsymbol{u}}_2\rangle = |\boldsymbol{a}_2\rangle + c\,|\boldsymbol{a}_1\rangle$$

を作る

この $|\tilde{\boldsymbol{u}}_2\rangle$ を $|\boldsymbol{a}_1\rangle$ と直交させたいので、左から $\langle \boldsymbol{a}_1|$ を掛け算する

$$\langle \boldsymbol{a}_1 | \tilde{\boldsymbol{u}}_2 \rangle = \langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_2 \rangle + c\,\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_1 \rangle$$

この左辺をゼロにしたいわけなので、

$$c = -\frac{\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_2 \rangle}{\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_1 \rangle}$$

と選べばよいことがわかる

* * *

ノルムを揃えておくと便利

分母 $\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_1 \rangle$ の部分はベクトル $\boldsymbol{a}_1$ の内積で、この平方根がノルム、つまりベクトルの大きさである

ここを初めから 1 にしておくと分母が消えてくれて、計算が簡単になりそう

もし最初から $|\boldsymbol{a}_1\rangle$ のノルムが 1 であれば、次のようになる

$$c = -\langle \boldsymbol{a}_1 | \boldsymbol{a}_2 \rangle$$

ベクトルのノルムを 1 に揃えておくことを正規化と呼ぶ

$|\boldsymbol{a}_1\rangle$ を正規化したベクトルを $|\boldsymbol{u}_1\rangle$ として、$\langle \boldsymbol{a}_1|$ の代わりに $\langle \boldsymbol{u}_1|$ を使って c を求めておく

$$c = -\langle \boldsymbol{u}_1 | \boldsymbol{a}_2 \rangle$$

すると、$|\tilde{\boldsymbol{u}}_2\rangle = |\boldsymbol{a}_2\rangle + c\,|\boldsymbol{a}_1\rangle$ の代わりに

$$|\tilde{\boldsymbol{u}}_2\rangle = |\boldsymbol{a}_2\rangle - \Big(\langle \boldsymbol{u}_1 | \boldsymbol{a}_2 \rangle\Big)|\boldsymbol{u}_1\rangle$$

を考えればよいことになる

この式だけで、考えたい空間上において $\boldsymbol{u}_1$ に直交するベクトルを作ることができた

さらにこの作業を続けるときに、求まった $|\tilde{\boldsymbol{u}}_2\rangle$ をまた正規化して、$|\boldsymbol{u}_2\rangle$ を作っておく

次に作るベクトル $|\tilde{\boldsymbol{u}}_3\rangle$ は、$|\boldsymbol{u}_1\rangle$ と $|\boldsymbol{u}_2\rangle$ の両方に直交する必要がある

考え方は上の計算と同じで、係数を追加して、その係数を求める方程式を立てるという流れ

念のため次のステップまで進んでおくと、まずは、

$$|\tilde{\boldsymbol{u}}_3\rangle = |\boldsymbol{a}_3\rangle + c_1\,|\boldsymbol{u}_1\rangle + c_2\,|\boldsymbol{u}_2\rangle$$

とする

これに左から $\langle \boldsymbol{u}_1|$ と $\langle \boldsymbol{u}_2|$ をかけ算した場合のそれぞれにおいて、左辺がゼロになればよい

式が 2 つ出てきて、未知変数も c_1 と c_2 の 2 つあるので、解ける

ただ、実際にはそもそも $|\boldsymbol{u}_2\rangle$ は $|\boldsymbol{u}_1\rangle$ に直交しているので、もっと簡単に計算を進められる

* * *

シュミットの直交化法のまとめ

今、考えたい空間の生成元を $|\boldsymbol{a}_d\rangle,\, d = 1, 2, \ldots, D$ とする

1. $|\boldsymbol{a}_1\rangle$ を正規化して最初の基底を作る：$|\boldsymbol{u}_1\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{\langle \boldsymbol{a}_1\,|\,\boldsymbol{a}_2\rangle}}\,|\boldsymbol{a}_1\rangle$
2. まずは $d = 1$ として、以下の手順 3 5 を繰り返す
3. $d+1$ 番目の基底の候補を作る：$|\tilde{\boldsymbol{u}}_{d+1}\rangle = |\boldsymbol{a}_{d+1}\rangle - \sum_{d'=1}^{d}\Big(\langle \boldsymbol{u}_{d'}\,|\,\boldsymbol{a}_{d+1}\rangle\Big)|\boldsymbol{u}_{d'}\rangle$
4. 基底の候補 $|\tilde{\boldsymbol{u}}_{d+1}\rangle$ を正規化して $|\boldsymbol{u}_{d+1}\rangle$ を作り、これを $d+1$ 個目の基底とする
5. d を 1 つ増やして、次の基底の計算へと進む

このように、互いに直交しつつノルムが 1 となっている基底のことを正規直交基底と呼ぶ

この正規直交基底を作るための手順は、あとで関数を考えるときにも使う

* * *

成分を抜いたら残らないこともある

実は以下のベクトルは一次従属であるため、「基底」とは呼べない

$$|\boldsymbol{a}_1\rangle = \begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix},\quad |\boldsymbol{a}_2\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix},\quad |\boldsymbol{a}_3\rangle = \begin{bmatrix}0\\2\\-1\end{bmatrix}$$

あとで見るように、この中から 2 つを選んで組を作ると基底となる

3 次元空間中に 2 つのベクトルなので、作られる線形空間は平面

与えられたベクトルの組、つまり生成元が、どのような空間を作るのか、基底なのか、それとも余分なものが含まれるのか…行列の概念はこの判断と密接に関係する

ただ、このあとの計算で見るように、シュミットの直交化法で実際に正規直交基底を構成することでも、余分なものを削ることができる

* * *

具体的な計算で余分なものが消える

次の例で計算を進めてみる

$$|\boldsymbol{a}_1\rangle = \begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix},\quad |\boldsymbol{a}_2\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix},\quad |\boldsymbol{a}_3\rangle = \begin{bmatrix}1\\2\\-1\end{bmatrix}$$

$\langle \boldsymbol{a}_1|\boldsymbol{a}_1\rangle = 2$ なので、正規化すると、

$$|\boldsymbol{u}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}$$

が得られる

次のステップは、

$$\langle \boldsymbol{u}_1\,|\,\boldsymbol{a}_2\rangle = \begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\cdot 1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

より、

$$
\begin{aligned}
|\tilde{\boldsymbol{u}}_2\rangle &= |\boldsymbol{a}_2\rangle - \Big(\langle \boldsymbol{u}_1 \,|\, \boldsymbol{a}_2\rangle\Big)|\boldsymbol{u}_1\rangle \\
&= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

である

次のステップのために正規化しておこう

$\langle \tilde{\boldsymbol{u}}_2 | \tilde{\boldsymbol{u}}_2 \rangle = \dfrac{3}{2}$ なので、次のようになる

$$
|\boldsymbol{u}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}
$$

次に得られるはずのベクトル $|\tilde{\boldsymbol{u}}_3\rangle$ は以下のように計算できる

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{u}_1 \,|\, \boldsymbol{a}_3\rangle &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{2}} \\
&= \frac{3}{\sqrt{2}} \\
\langle \boldsymbol{u}_2 \,|\, \boldsymbol{a}_3\rangle &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}} - \frac{2}{\sqrt{6}} - \frac{2}{\sqrt{6}} \\
&= -\frac{3}{\sqrt{6}}
\end{aligned}
$$

より、

$$
\begin{aligned}
|\tilde{\boldsymbol{u}}_3\rangle &= |\boldsymbol{a}_3\rangle - \Big(\langle \boldsymbol{u}_1 \,|\, \boldsymbol{a}_3\rangle\Big)|\boldsymbol{u}_1\rangle - \Big(\langle \boldsymbol{u}_2 \,|\, \boldsymbol{a}_3\rangle\Big)|\boldsymbol{u}_2\rangle \\
&= \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} - \frac{3}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{3}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{3}{2} \\ \frac{3}{2} \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{3}{6} \\ -\frac{3}{6} \\ 1 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{6}{6} - \frac{9}{6} + \frac{3}{6} \\ \frac{12}{6} - \frac{9}{6} - \frac{3}{6} \\ -1 - 0 + 1 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

最後に残ったのはゼロベクトル

つまり、これまでに得られたものを抜くと何も残らない、ということ

この時点までで、3 つの生成元から作られる線形空間は 2 次元、つまり平面であり、基底は 2 つであることがわかる

その基底として、ここで作った $|\boldsymbol{u}_1\rangle$ と $|\boldsymbol{u}_2\rangle$ を使える

なお、消えてしまった $|\boldsymbol{a}_3\rangle$ が不要ということではない

今回は $|\boldsymbol{a}_1\rangle$ から出発したが、ほかのベクトルから始めることもできる

そうすると別の基底が求まる

そこでは $|\boldsymbol{a}_3\rangle$ が、$|\boldsymbol{a}_1\rangle$ か $|\boldsymbol{a}_2\rangle$ のどちらかの代わりに活躍する

ただし、どんな基底を使っても、結果として作られる平面は同一のもの

ToDo

P.