テンソル計算と Einstein の縮約記法

くろすけ

March 2023

概要

このノートでは Einstein の縮約記法を使ったテンソル計算の手法をまとめる。添字 $i, j, k, \ldots$ については特に指定しない限り、$1, 2, \ldots, N$ の値を取るものとする。なお、正則行列 A に対する逆行列 A^{-1} の ij 成分は V_{ij} で表記している。

Contents

1 Einstein の縮約記法

物理 (特に電磁気学や相対論、場の理論) では多くのベクトル・テンソルの計算を扱う。線形代数でやった行列の積やベクトルの線形変換のように、行列やベクトルを何個も掛け合わせた量を計算する必要がある。この掛け合わされた量を簡潔に表現する記法として用いられているのが *Einstein* **の縮約記法**[*1]である。この記法を使うことで計算が大幅に簡略化される (有り体に言ってしまえば、総和記号を省略する記法)。特に相対論と場の量子論では教科書等で真っ先に導入されるくらいには日常的に用いられる記法である。

定義 1.1 (Einstein の縮約記法)**.** ある項について同じ添字が 2 回現れるとき、その添字に関して総和を取るものと約束する。例えば、下つきの添字を持つ量 a_i と上つきの添字を持つ量 b^i に対し、これら各成分の積の総和は

$$a_i b^i \coloneqq \sum_{i=1}^{N} a_i b^i = a_1 b^1 + a_2 b^2 + \cdots + a_N b^N \tag{1}$$

と表記する。1 回しか現れない添字には総和を取らない。

上の定義では下につく添字と上につく添字の縮約に対して定義した。このような添字の位置 (相対論における共変性・反変性など) を気にしない場合であれば、下についた添字同士の縮約に上の縮約記法（定義 1.1) を使っても特に差し支えはない:

$$a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \ldots a_N b_N \tag{2}$$

なお、縮約記法を適用されている添字のことを**ダミー添字** *(dummy index)* といい、それ以外の全体の添字として残っているものを**フリー添字** *(free index)* という。ダミー添字は全体から見たときに添字としては機能しないため注意する (縮約内のローカルな添字は縮約外で添字として振る舞わない)。また、ダミー添字はその文字自体に意味はなく、自由に添字を取り替えることができる。

2 重要なテンソルと演算

A テンソル

A.1 Kronecker のデルタ

定義 2.1 (Kronecker のデルタ)**.**

$$\delta^i_j = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \tag{3}$$

[*1] この名称は特殊・一般相対性理論を提唱した Albert Einstein に由来する。Einstein は自身の論文で縮約記法を導入している。

A.2 Levi-Civita の記号 (完全反対称テンソル)

定義 2.2 (Levi-Civita の記号)**.**

$$\epsilon_{i_1 i_2 \ldots i_N} = \begin{cases} +1 & (i_1 i_2 \ldots i_N \text{は } 1, 2, \ldots, N \text{ の偶置換 }) \\ -1 & (i_1 i_2 \ldots i_N \text{は } 1, 2, \ldots, N \text{ の奇置換 }) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{4}$$

A.3 重要な公式

3 次元ベクトルを考えるとき、Kronecker のデルタと Levi-Civita の記号に関して以下の等式が成立する。

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl} \tag{5}$$

これはベクトルの内積・外積を変形する上で必要不可欠な公式である。その実用例は後に回す。

B 演算

各種演算を縮約記法で表記すると以下のようになる。

内積 $\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} = A_i B_i$
外積 $[\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}]_i = \epsilon_{ijk} A_j B_k$
勾配 $[\boldsymbol{\nabla} f(x)]_i = \partial_i f(x)$
トレース $\operatorname{tr} A = A_{ii}$

3 テンソル計算の実例

基本的な notation は導入できたので、実際にこれらを使った計算の簡約化を実例で示していく。実際のところ、縮約記法がとりわけ有用なのはベクトルの内積・外積の計算をしたり相対論・場の理論でテンソル量の計算をするときである。普通の線形代数の計算では (高次の項を計算するとかでなければ)、高々数個の総和記号を省略できる程度でそこまで有用というわけでもない。

A 行列式の微分

平方行列 A の行列式 $\det A$ の微分は

$$d(\det A) = (\det A) \operatorname{tr}\left(A^{-1} dA\right) \tag{6}$$

B 逆行列の微分

正則行列 A に対する逆行列 A^{-1} の満たす恒等式 $AA^{-1} = 1$ の各成分を縮約記法で表すと以下のようになる:

$$A_{ij}\forall_{jk} = \delta_{ik} \tag{7}$$

この両辺を微分すると右辺は定数であるため任意の成分でゼロに、左辺は Leibniz 則が適用されるので

$$(dA_{ij})\forall_{jk} + A_{ij}(d\forall_{jk}) = 0 \tag{8}$$

今の目標は A_{ij} による $d\forall_{ij}$ の表示。(7) を用いて上式を移行した

$$A_{ij}(d\forall_{jk}) = -(dA_{ij})\forall_{jk} \tag{9}$$

の両辺に $\forall_{li}$ をかけて

$$\forall_{li}A_{ij}d\forall_{jk} = -\forall_{li}dA_{ij}\forall_{jk} \Longrightarrow d\forall_{lk} = -\left[A^{-1}(dA)A^{-1}\right]_{lk} \tag{10}$$

を得る。したがって、逆行列 A^{-1} の微分 $d(A^{-1})$ の表示は

$$d(A^{-1}) = -A^{-1}(dA)A^{-1} \tag{11}$$

である。これを偏微分のときに適用すると、

$$\frac{\partial A^{-1}}{\partial x} = -A^{-1}\frac{\partial A}{\partial x}A^{-1} \tag{12}$$

となる。

C　ベクトル解析の諸公式 (出典: 電磁気学)

ベクトル三重積:

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{C}\times\boldsymbol{A})=\boldsymbol{C}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{13}$$

まず第一式を成分表示する:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C}) =& A_i[\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C}]_i && (14)\\ =& A_i(\epsilon_{ijk}B_jC_k) && (15)\\ =& \epsilon_{ijk}A_iB_jC_k && (16)\end{aligned}$$

第二式・第三式の成分表示もこれと一致することから三重積公式の成立が確認できる。以下の公式についても同様に成分を書き下すことで示せる:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{C}\times\boldsymbol{D}) =& (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C})\boldsymbol{B}-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C} && (17)\\ (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot(\boldsymbol{C}\times\boldsymbol{D}) =& (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C})(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{D})-(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{D}) && (18)\\ (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times(\boldsymbol{C}\times\boldsymbol{D}) =& [\boldsymbol{D}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})]\boldsymbol{C}-[\boldsymbol{C}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})]\boldsymbol{D} && (19)\end{aligned}$$

これらの式の証明には (5) が有用。

D　行列の成分による微分 (出典:@@@ちゃん)

n 次の正則行列 A の成分 A_{ij} に対して演算子 ∇_A を以下で定義:

$$\nabla_A=\begin{pmatrix}\frac{\partial}{\partial A_{11}} & \frac{\partial}{\partial A_{12}} & \cdots & \frac{\partial}{\partial A_{n1}}\\ \frac{\partial}{\partial A_{21}} & \frac{\partial}{\partial A_{22}} & \cdots & \frac{\partial}{\partial A_{n2}}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ \frac{\partial}{\partial A_{n1}} & \frac{\partial}{\partial A_{n2}} & \cdots & \frac{\partial}{\partial A_{nn}}\end{pmatrix} \tag{20}$$

このとき、演算子 ∇_A は次の式を満たす。

$$\nabla_A\log\det A=A^{-1} \tag{21}$$

また、任意の n 次元ベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して以下の式が成立:

$$\nabla_A\left(\boldsymbol{x}^TA^{-1}\boldsymbol{x}\right)=-\left[A^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^TA^{-1}\right]^T \tag{22}$$

まず最初の式を示す。左辺の各成分に対して示せば良い:

$$\begin{aligned}[\nabla_A\log\det A]_{ij} =& \frac{\partial}{\partial A_{ij}}\log\det A && (23)\\ =& \frac{1}{\det A}\frac{\partial\det A}{\partial A_{ij}} && (24)\end{aligned}$$

行列式の偏微分に関しては上の方で既に計算してある結果が使える。

$$\begin{aligned}[\nabla_A\log\det A]_{ij} =& \frac{1}{\det A}\left(\det A\operatorname{tr}\left[A^{-1}\frac{\partial A}{\partial A_{ij}}\right]\right) && (25)\\ =& \left[A^{-1}\frac{\partial A}{\partial A_{ij}}\right]_{kk} && (26)\\ =& V_{kl}\frac{\partial A_{lk}}{\partial A_{ij}} && (27)\\ =& V_{kl}\delta_{il}\delta_{jk} && (28)\\ =& V_{ij} && (29)\end{aligned}$$

したがって各成分に対して $[\nabla_A\log\det A]_{ij}=V_{ij}$ が成立することから最初の式が示された。

次に二つ目の式を示す。これも各成分を表示して変形していけば良い:

$$\begin{aligned}\left[\nabla_A\left(\boldsymbol{x}^TA^{-1}\boldsymbol{x}\right)\right]_{ij} =& \frac{\partial}{\partial A_{ij}}(x_kV_{kl}x_l) && (30)\\ =& x_k\frac{\partial V_{kl}}{\partial A_{ij}}x_l && (31)\end{aligned}$$

この逆行列の微分は (11) が使える:

$$\left[\nabla_A\left(\boldsymbol{x}^TA^{-1}\boldsymbol{x}\right)\right]_{ij} = x_k\left(-\forall_{kn}\frac{\partial A_{nm}}{\partial A_{ij}}\forall_{ml}\right)x_l \tag{32}$$

$$= x_k\left(-\forall_{kn}\delta_{in}\delta_{jm}\forall_{ml}\right)x_l \tag{33}$$

$$= -x_k\forall_{ki}\forall_{jl}x_l \tag{34}$$

あとは式を整理していく。任意のベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ に対して、a_ib_j を成分に持つ行列が $\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{b}$ と表せることを用いると以下の変形ができる:

$$\left[\nabla_A\left(\boldsymbol{x}^TA^{-1}\boldsymbol{x}\right)\right]_{ij} = -\left\{\left(A^{-1}\right)^T\right\}_{ik}x_kx_l\left\{\left(A^{-1}\right)^T\right\}_{lj} \tag{35}$$

$$= -\left\{\left(A^{-1}\right)^T\boldsymbol{x}\right\}_i\left\{\boldsymbol{x}^T\left(A^{-1}\right)^T\right\}_j \tag{36}$$

$$= -\left[\left\{\left(A^{-1}\right)^T\boldsymbol{x}\right\}^T\left\{\boldsymbol{x}^T\left(A^{-1}\right)^T\right\}\right]_{ij} \tag{37}$$

$$= -\left[\left\{A^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^TA^{-1}\right\}^T\right]_{ij} \tag{38}$$

これを行列表示すると示したかった式になる。

References