

線形演算子と行列

線形演算子の表現行列を求めます。ここでは実数のみを扱い、ベクトル空間は有限次元とします。

ベクトルは太字、スカラーはギリシャ文字か小文字のローマ文字、線形演算子は T 、 T 以外の大文字のローマ文字は行列です。

ここでは実数の数ベクトル空間のベクトルを文章中では $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)$ と表記しますが、 $1 \times m$ 行列、 $m \times 1$ 行列のどちらの意味でも使ってしまいます (いちいち転置の記号を書くのが面倒だから)。

$n \times m$ 行列は m 次元実数空間 $\mathbb{R}^m$ から n 次元実数空間 $\mathbb{R}^n$ への線形演算子なのはすぐにわかります。行列の積の線形性は、 M を $n \times m$ 行列、 c をスカラーとすれば

$$M(\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2) = M\boldsymbol{x}_1 + M\boldsymbol{x}_2, \quad M(c\boldsymbol{x}) = cM\boldsymbol{x}$$

となります。

線形演算子は基底によって行列にできることを見ていきます。 m 次元ベクトル空間 $\mathcal{V}^m$ と n 次元ベクトル空間 $\mathcal{W}^n$ を用意し、 $\mathcal{V}^m$ から $\mathcal{W}^n$ への線形演算子を T とします。 $\mathcal{V}^m, \mathcal{W}^n$ の基底は $\{\boldsymbol{e}_i\}_{i=1}^m, \{\boldsymbol{g}_i\}_{i=1}^n$ とします。行列にするので次元をはっきりさせるために $\mathcal{V}^m$ のように書いています。

$\boldsymbol{v} \in \mathcal{V}^m$ を基底によって

$$\boldsymbol{v} = v_1\boldsymbol{e}_1 + v_2\boldsymbol{e}_2 + \dots + v_m\boldsymbol{e}_m$$

とすれば、 $T(\boldsymbol{v})$ は線形性によって

$$T(\boldsymbol{v}) = T(v_1\boldsymbol{e}_1 + v_2\boldsymbol{e}_2 + \dots + v_m\boldsymbol{e}_m) = v_1T(\boldsymbol{e}_1) + v_2T(\boldsymbol{e}_2) + \dots + v_mT(\boldsymbol{e}_m) = \sum_{j=1}^m v_jT(\boldsymbol{e}_j)$$

$T(\boldsymbol{e}_j)$ は $\mathcal{W}^n$ のベクトルなので、 $\{\boldsymbol{g}_i\}$ で展開されて

$$T(\boldsymbol{e}_j) = \sum_{i=1}^n a_{ij}\boldsymbol{g}_i \tag{1}$$

左辺で指定された j が右辺でも使われ、それに対して i で和を取るので展開の係数は a_{ij} として添え字を 2 つ付けています。例えば

$$T(\boldsymbol{e}_1) = \sum_{i=1}^n a_{i1}\boldsymbol{g}_i = a_{11}\boldsymbol{g}_1 + a_{21}\boldsymbol{g}_2 + \dots + a_{n1}\boldsymbol{g}_n$$

のようになっています。

線形演算子の基底への作用の式に現れる a_{ij} を成分とする $n \times m$ 行列は線形演算子 T の表現行列と呼ばれます。より正確に言うなら、基底 $\{\boldsymbol{e}_i\}_{i=1}^m, \{\boldsymbol{g}_i\}_{i=1}^n$ での線形演算子 T の表現行列です。

このように言える理由は少し変形するとはっきりします。 $T(\boldsymbol{v})$ は

$$T(\boldsymbol{v}) = \sum_{j=1}^m v_jT(\boldsymbol{e}_j) = \sum_{j=1}^m v_j \sum_{i=1}^n a_{ij}\boldsymbol{g}_i = \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n a_{ij}v_j\boldsymbol{g}_i$$

$T(v) = w \in \mathcal{W}$ として

$$\begin{aligned} w &= \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n a_{ij} v_j g_i \\ \sum_{i=1}^n w_i g_i &= \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m a_{ij} v_j \right) g_i \end{aligned} \quad (2)$$

から

$$w_i = \sum_{j=1}^m a_{ij} v_j \quad (3)$$

これは $\mathcal{V}^m$ のベクトルの成分が a_{ij} によって $\mathcal{W}^n$ のベクトルの成分に変換されています。このように、 $\mathcal{V}^m$ から $\mathcal{W}^n$ への線形演算子に対応するように、 v_j から w_i への行列として a_{ij} が出てきます。なので、 a_{ij} を成分とする $n \times m$ 行列 A は、基底を $\{e_i\}_{i=1}^m, \{g_i\}_{i=1}^n$ として線形演算子 T と対応します。このように、ベクトル空間からベクトル空間への線形演算子という抽象的な対象が数値を持った行列になるので、具体的な量を計算できるようになります。

例えば、 $m = n = 2$ とすると (3) は

$$w_1 = a_{11}v_1 + a_{12}v_2$$

$$w_2 = a_{21}v_1 + a_{22}v_2$$

なので

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

として、行列の積で書けます。

$\mathcal{W}^m = \mathcal{V}^m$ として $\mathcal{V}^m$ から $\mathcal{V}^m$ への線形演算子とし、 $\mathcal{V}^m$ を内積空間としたときでは、線形演算子と行列の対応が分かりやすくなり、物理で出てくるのは大抵がこの場合です。同じ話をこの場合にして繰り返しておきます。 $\mathcal{V}^m$ から $\mathcal{V}^m$ への線形演算子 T によってベクトル v, w を

$$w = T(v)$$

と与えます。基底 $\{e_i\}_{i=1}^m$ によって

$$w = T(v) = T\left(\sum_{i=1}^m v_i e_i\right) = \sum_{i=1}^m v_i T(e_i)$$

今は同じベクトル空間への線形演算子なので $T(e_i)$ は $\mathcal{V}^m$ にいます。このため、同じ基底で展開できて

$$T(e_j) = \sum_{i=1}^m a_{ij} e_i$$

これから

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^m w_i \boldsymbol{e}_i = \sum_{i=1}^m v_i T(\boldsymbol{e}_i) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m v_i a_{ji} \boldsymbol{e}_j = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^m v_j a_{ij} \right) \boldsymbol{e}_i \quad (4)$$

となるので

$$w_i = \sum_{j=1}^m a_{ij} v_j$$

として、表現行列 a_{ij} が出てきます。そして、この場合では、基底を正規直交基底として基底と $T(\boldsymbol{e}_i)$ の内積 $\langle, \rangle$ を取ると

$$\langle \boldsymbol{e}_k, T(\boldsymbol{e}_j) \rangle = \langle \boldsymbol{e}_k, \sum_{i=1}^m a_{ij} \boldsymbol{e}_i \rangle = \sum_{i=1}^m a_{ij} \langle \boldsymbol{e}_k, \boldsymbol{e}_i \rangle = \sum_{i=1}^m a_{ij} \delta_{ik} = a_{kj}$$

となり、基底 $\{\boldsymbol{e}_i\}$ での表現行列 a_{ij} を取り出せます。 δ_{ik} はクロネッカーデルタです。このように、内積 $\langle \boldsymbol{e}_k, T(\boldsymbol{e}_j) \rangle$ の値を成分とする行列になるという分かりやすい形になっています。

線形演算子と行列を対応させるときに出てくる表記を導入しておきます。分かりやすくするために、まずは2次元にします。基底 $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2$ を組にして $(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2)$ と書き、 T はそれぞれに作用するとして

$$T(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2) = (T(\boldsymbol{e}_1), T(\boldsymbol{e}_2)) = \left(\sum_{i=1}^2 a_{i1} \boldsymbol{g}_i, \sum_{i=1}^2 a_{i2} \boldsymbol{g}_i \right) = (a_{11} \boldsymbol{g}_1 + a_{21} \boldsymbol{g}_2, a_{12} \boldsymbol{g}_1 + a_{22} \boldsymbol{g}_2)$$

と表記したとき、これは行列の積の形なので a_{ij} を成分とする 2×2 行列を A として

$$T(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2) = (\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = (\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2) A$$

と書けます。これはそのまま任意の m, n に一般化できて、 a_{ij} を成分とする $n \times m$ 行列 A として、行列の積の規則によって

$$T(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \dots, \boldsymbol{e}_m) = (T(\boldsymbol{e}_1), T(\boldsymbol{e}_2), \dots, T(\boldsymbol{e}_m)) = \left(\sum_{i=1}^n a_{i1} \boldsymbol{g}_i, \sum_{i=1}^n a_{i2} \boldsymbol{g}_i, \dots, \sum_{i=1}^n a_{im} \boldsymbol{g}_i \right) = (\boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{g}_2, \dots, \boldsymbol{g}_n) A \quad (5)$$

となります。これは (1) を行列の形にしたものなので、 A は今の基底での T の表現行列です。

また、この表記を使うと、ベクトル $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_n$ による線形結合は、 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ を定数として

$$(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_n) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \boldsymbol{v}_i$$

と書けます。

(5) を $\mathcal{W}^m = \mathcal{V}^m$ の場合にします。 $\mathcal{V}^m$ の基底を $\{e_i\}_{i=1}^m$ とします。このとき、 $T(v)$ は

$$\begin{aligned} T(v) &= \sum_{j=1}^m v_j T(e_j) = v_1 T(e_1) + v_2 T(e_2) + \cdots + v_m T(e_m) \\ &= (T(e_1), T(e_2), \cdots, T(e_m))v \end{aligned}$$

$T(e_i)$ は $\mathcal{V}^m$ のベクトルなので

$$T(e_j) = \sum_{i=1}^m a_{ij} e_i$$

これを使えば、(5) と同じように

$$T(v) = (T(e_1), \cdots, T(e_m))v = \left(\sum_{i=1}^m a_{i1} e_i, \cdots, \sum_{i=1}^m a_{im} e_i \right) v = (e_1, \cdots, e_m) A v \quad (6)$$

として、 T の表現行列 A を与えられます。

特に、ベクトル空間 $\mathcal{V}^m = \mathcal{W}^m$ が m 次元ベクトル空間 $\mathbb{R}^m$ であるなら、 $v = (v_1, v_2, \dots, v_m)$ の $m \times 1$ 行列であり、 $T(e_i)$ も $m \times 1$ 行列です。このため、 $(T(e_1), \cdots, T(e_m))$ を $m \times m$ 行列 M と見なして ($m \times 1$ 行列が横に m 個並んで $m \times m$ 行列になっていると見る)、

$$(T(e_1), T(e_2), \cdots, T(e_m)) = M$$

と与えられます。さらに、標準基底のとき ($e_1 = (1, 0, 0, \dots, 0)$ のように e_i は i 成分だけが 1 で残りが 0)、 $(e_1, \cdots, e_m)$ (e_i は $m \times 1$ 行列) は単位行列になるので、(6) は

$$T(v) = Av, \quad A = M = (T(e_1), T(e_2), \cdots, T(e_m))$$

となり、線形演算子 T はその表現行列である $m \times m$ 行列 A にそのまま対応します (「線形演算子」参照)。

物理で出てくるのはこの段階です。例えば、2次元デカルト座標での2次元回転は標準基底 e_1, e_2 を左回りに θ 回転させて

$$e_1 = (1, 0) \Rightarrow (\cos \theta, \sin \theta), \quad e_2 = (0, 1) \Rightarrow (-\sin \theta, \cos \theta)$$

とすることなので (「極座標」参照)、回転の線形演算子 T の作用は

$$T(e_1) = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}, \quad T(e_2) = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

これらから、2次元回転を起こす線形演算子の表現行列としての2次元回転行列が

$$A = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

と求まります。

表現行列は基底に依存しているので、 $\mathcal{V}^m$ の基底を別の基底に変えるとどうなるかを見ます。 $\mathcal{V}^m$ の別の基底を $\{e'_i\}_{i=1}^m$ として、 $m \times m$ 行列 S によって

$$(e_1, e_2, \dots, e_m) = (e'_1, e'_2, \dots, e'_m)S$$

と変換されるとします。 S は $\mathcal{V}^m$ 上の線形独立な集合の変換 (線形演算子) なので、逆行列 S^{-1} が存在する正則行列です。そうすると、(6) から

$$\begin{aligned} T(e'_1, e'_2, \dots, e'_m) &= T((e_1, e_2, \dots, e_m)S^{-1}) \\ &= (T(e_1), T(e_2), \dots, T(e_m))S^{-1} \\ &= (e_1, e_2, \dots, e_m)AS^{-1} \\ &= (e'_1, e'_2, \dots, e'_m)SAS^{-1} \end{aligned}$$

となるので、基底 $\{e_i\}$ での表現行列 A は基底 $\{e'_i\}$ では SAS^{-1} になります。 SAS^{-1} は相似変換 (similarity transformation) と呼ばれ、 A と SAS^{-1} は相似 (similar) と言われます。このように、基底の変換を与える正則行列 S によって表現行列は変換され、線形演算子 T の基底が異なるだけの表現行列は同値 (equivalent) と言われます。また、今は $\{e'_i\}$ を右から変換する S として与えましたが、 $\{e_i\}$ を右から変換するとして S を与えれば S, S^{-1} が入れ替わります。

基底の変換に対する表現行列の変換は成分で書いたほうが分かりやすいので、それもついでに示しておきます。基底 $\{e_i\}$ があり、別の基底 $\{e'_i\}$ がその線形結合によって

$$e'_i = \sum_{j=1}^m e_j (S^{-1})_{ji}, \quad e_i = \sum_{j=1}^m e'_j S_{ji}$$

と与えられているとします。線形結合の係数を行列 S で表し、その成分を S_{ij} と書いています。ベクトル v をそれぞれの基底に対して

$$v = v_i e_i = v'_i e'_i$$

とすれば

$$v = \sum_{i=1}^m v_i e_i = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m v_i e'_j S_{ji} = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^m S_{ij} v_j \right) e'_i = v'_i e'_i$$

から

$$v'_i = \sum_{j=1}^m S_{ij} v_j, \quad v_i = \sum_{j=1}^m (S^{-1})_{ij} v'_j$$

$\mathcal{V}^m$ から $\mathcal{V}^m$ への線形演算子 T による $w = T(v)$ が基底に対して

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^m w_i \boldsymbol{e}_i, \quad \boldsymbol{w}' = \sum_{i=1}^m w'_i \boldsymbol{e}'_i$$

となっており、表現行列 A によって

$$w_i = \sum_{j=1}^m A_{ij} v_j$$

となっているとき、 w'_i と v'_i は

$$w'_i = \sum_{j=1}^m S_{ij} w_j = \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m S_{ij} A_{jk} v_k = \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m S_{ij} A_{jk} (S^{-1})_{kl} v'_l = \sum_{l=1}^m A'_{il} v'_l$$

と変換されるので、基底の変換に対して表現行列は

$$A' = SAS^{-1} \quad (A'_{ij} = \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m S_{ik} A_{kl} (S^{-1})_{lj})$$

と変換されます。

相似変換の性質として、変換の前後でトレースが同じになります。これは行列を成分で書くと簡単に分かって

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m A'_{ii} &= \sum_{i=1}^m (SAS^{-1})_{ii} \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m S_{ij} A_{jk} (S^{-1})_{ki} \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m (S^{-1})_{ki} S_{ij} A_{jk} \\ &= \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m \delta_{kj} A_{jk} \\ &= \sum_{k=1}^m A_{kk} \end{aligned}$$

このように、相似変換 (基底の変換) に対して行列のトレースは同じです。

最後に、物理でも分野によってはよく出てくる表現行列の性質に触れておきます (「群論」も参照)。ベクトル空間 $\mathcal{V}^n$ があり、 $\mathcal{V}^n$ から $\mathcal{V}^n$ への線形演算子 T があるとします。このとき、 $\mathcal{V}^n$ の部分空間 $\mathcal{W}$ があり、 $\mathcal{W}$ のベクトル $\boldsymbol{w}$ に T を作用させた $T(\boldsymbol{w})$ が $\mathcal{W}$ のベクトルになるとき、 $\mathcal{W}$ は T で不変な部分空間 (不変部分空間、invariant subspace) と言われます。省略して $\mathcal{W}$ は T -不変と言ったりもします。

T で不変な部分空間のみでベクトルの変換が成立するので、 T は $\mathcal{V}^n$ を無視すれば $\mathcal{W}$ での線形演算子として見れます。その $\mathcal{W}$ のみに制限された T を $T_{\mathcal{W}}$ とします (例えば、3次元ベクトル空間の線形演算子 T_3 による変換が2次元ベクトル部分だけで成立しているなら、2次元ベクトル空間に制限された線形演算子 T_2 になる)。このときに重要なのは、 $\mathcal{V}^n$ が不変部分空間の直和 $\mathcal{V}^n = \mathcal{W}_1 \oplus \mathcal{W}_2 \oplus \cdots \oplus \mathcal{W}_k$ になっているときです。 $\mathcal{W}_\alpha$ ($\alpha = 1, 2, \dots, k$) はそれぞれが T で不変な部分空間です ($\boldsymbol{w}^{(\alpha)} \in \mathcal{W}_\alpha$, $T(\boldsymbol{w}^{(\alpha)}) \in \mathcal{W}_\alpha$)。

直和は簡単に言ってしまうと、各ベクトル空間のベクトルを並べたものをベクトルとするベクトル空間です。なので、 $\mathcal{W}_\alpha$ の次元を d_α とすれば

$$n = d_1 + d_2 + \cdots + d_k$$

となっており、 $\mathcal{W}_\alpha$ の基底 $\{e_i^{(\alpha)}\}$ ($i = 1, 2, \dots, d_\alpha$) を並べて

$$\{e_1^{(1)}, e_2^{(1)}, \dots, e_{d_1}^{(1)}, e_1^{(2)}, e_2^{(2)}, \dots, e_{d_2}^{(2)}, \dots, e_1^{(k)}, e_2^{(k)}, \dots, e_{d_k}^{(k)}\} \quad (7)$$

としたものは $\mathcal{V}^n$ の基底です。この基底を使った T の表現行列は

$$\begin{pmatrix} A_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_k \end{pmatrix} \quad (8)$$

という形になります。 A_α ($\alpha = 1, 2, \dots, k$) は $\mathcal{M}_\alpha$ の基底 $\{e_i^{(\alpha)}\}$ による $T_{\mathcal{W}_\alpha}$ の表現行列 ($d_\alpha \times d_\alpha$ 行列) で、ブロック行列を成分とする行列の書き方をしています。

こうなる理由は単純です。 m 次元の不変部分空間 $\mathcal{W}^m$ での線形演算子とした T を $T_{\mathcal{W}}$ とします。 w を $\mathcal{W}^m$ のベクトルとして、 $T_{\mathcal{W}}(w)$ は $\mathcal{W}^m$ のベクトルなので、 $\mathcal{W}^m$ の基底を e_i とすれば (4) から

$$T_{\mathcal{W}}(w) = \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^m w_j a_{ij} \right) e_i \quad (w = \sum_{i=1}^m w_i e_i)$$

このため、不変部分空間 $\mathcal{W}^m$ における $T_{\mathcal{W}}$ の $m \times m$ 表現行列 A (成分は a_{ij}) は $\mathcal{W}^m$ でのベクトル成分だけを変換する行列です。そうすると、 $\mathcal{V}^n$ の基底を (7) のように各不変部分空間の基底を並べて書くと、 $\mathcal{V}^n$ の線形演算子 T の表現行列は各不変部分空間のベクトルに対してのみ作用する形でないといけません ($\mathcal{V}^n$ のベクトル成分も基底と同じように各不変部分空間のベクトル成分が並んだ形になる)。そのような形であるためには、各不変部分空間での線形演算子 $T_{\mathcal{W}_\alpha}$ の表現行列が対角的に入っていて、残りの成分が 0 になっている必要があります。よって、 $\mathcal{V}^n = \mathcal{W}_1 \oplus \mathcal{W}_2 \oplus \cdots \oplus \mathcal{W}_k$ となっているとき、基底 (7) での表現行列は (8) になります。