

幾何数理工学ノート

テンソル：テンソルの定義

平井広志

東京大学工学部 計数工学科 数理情報工学コース

東京大学大学院 情報理工学系研究科 数理情報学専攻

hirai@mist.i.u-tokyo.ac.jp

協力：池田基樹（数理情報学専攻 D1）

テンソルの考え方は物理現象や法則のモデリングに用いられる。また，多様体論への準備でもあり，4年科目「応用空間論」にも用いられる。

9 テンソル

9.1 ベクトル空間（復習）

定義 9.1 (ベクトル空間). V が体 \mathbb{K} (ここでは $\mathbb{Q}, \mathbb{R}, \mathbb{C}$ を想定している) 上のベクトル空間とは, $u, v \in V, \alpha, \beta \in \mathbb{K}$ に対し, 和 $u + v \in V$ とスカラー倍 $\alpha u \in V$ が定まっており, V は $+$ を積とするアーベル群 (単位元は $0, v$ の逆元は $-v$) で, スカラー倍は

1. $(\alpha + \beta)v = \alpha u + \beta v$,
2. $\alpha(u + v) = \alpha u + \alpha v$,
3. $(\alpha\beta)v = \alpha(\beta v)$,
4. $1v = v$ (1 は \mathbb{K} の単位元)

を満たすことをいう。

例 9.1. \mathbb{R}^n は \mathbb{R} 上のベクトル空間。 \mathbb{C}^n は \mathbb{C} 上のベクトル空間であるが、 \mathbb{R} 上のベクトル空間でもある。

定義 9.2 (基底). $B \subseteq V$ が基底 (basis)

$\stackrel{\text{def}}{\iff}$ 任意の $v \in V$ を $v = \sum_{u \in B} \alpha_u u$ ($\alpha_u \in \mathbb{K}$) と一意に表すことができる

\iff 任意の $v \in V$ を $v = \sum_{u \in B} \alpha_u u$ ($\alpha_u \in \mathbb{K}$) と表せて、任意の有限部分集合 $B' \subseteq B$ が一次独立。

ここで、 $\alpha_u \neq 0$ となる u の個数は有限とする。

補題 9.3. 基底は存在する。

証明にはツオルンの補題を用いる。

演習 9.1. 証明せよ。

定義 9.4 (次元). n 個の元からなる基底が存在するとき (n は基底の取り方によらない), V は n 次元といい, $\dim V = n$ とかく。このとき $V \simeq \mathbb{K}^n$ である。有限個からなる基底が存在しないとき V は無限次元といい, $\dim V = \infty$ とかく。

例 9.2. \mathbb{R}^n は (\mathbb{R} 上のベクトル空間として) n 次元.

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \text{ が}$$

基底.

例 9.3. \mathbb{R} 係数の多項式の集合は \mathbb{R} -ベクトル空間であり, $\mathbb{R}[x]$ で表す. これは $1, x, x^2, x^3, \dots$ は $\mathbb{R}[x]$ の基底 (多項式はこの中から有限個選んで表すことができる) で, $\mathbb{R}[x]$ は無限次元.

注意 9.5. $[0, 1]$ 上で 2 乗可積分な関数のなす集合は \mathbb{R} -ベクトル空間であり, $L^2[0, 1]$ で表す. このとき任意の $f \in L^2[0, 1]$ は $f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \sin 2\pi kx + \sum_{k=0}^{\infty} \beta_k \cos 2\pi kx$ と一意に書けるが, $\sin 2\pi kx$ ($k = 1, 2, \dots$), $\cos 2\pi kx$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) は上の意味での基底*1ではないことに注意する.

9.2 双対空間

V は, 体 \mathbb{K} 上の n 次元ベクトル空間と仮定する. V の双対空間の概念を導入する.

定義 9.6. $f: V \rightarrow \mathbb{K}$ が線形 (汎関数) $\stackrel{\text{def}}{\iff} f(\alpha u + \beta v) = \alpha f(u) + \beta f(v)$ ($\forall u, v \in V, \alpha, \beta \in \mathbb{K}$).

定義 9.7 (双対空間). V 上の線形汎関数全体の集合 $V^* := \{f: V \rightarrow \mathbb{K}, \text{線形}\}$ を

*1 代数基底, ハメル基底という用語を使うことがある

V の双対空間という. V^* には足し算 $(f+g)(v) := f(v) + g(v)$ と α 倍 $(\alpha f)(v) := \alpha f(v)$ が定義され, V^* 自体も \mathbb{K} 上のベクトル空間になる. V^* の単位元はゼロ写像になる.

直感的には, V は n 次元のタテベクトル空間に, V^* は n 次元のヨコベクトル空間に対応する. すなわち, $v \in V, f \in V^*$ に対して

$$f(v) = \begin{pmatrix} f_1 & f_2 & \cdots & f_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}.$$

注意 9.8. この V と V^* の間にある「内積」 $(v, f) \mapsto f(v)$ をペアリングと呼ぶことがある.

定義 9.9 (双対基底). e_1, e_2, \dots, e_n を V の基底とする. $e^1, e^2, \dots, e^n : V \rightarrow \mathbb{K}$ を以下の関数として定義する (δ_i^j はクロネッカーのデルタと呼ばれる):

- e_i に対しては

$$e^j(e_i) := \delta_i^j := \begin{cases} 1 & \text{if } i = j, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

- $v = \sum_{i=1}^n \alpha^i e_i \in V$ に対しては

$$e^j(v) = \sum_{i=1}^n \alpha^i e^j(e_i) = \alpha^j.$$

補題 9.10. $e^j \in V^*$.

命題 9.11. e^1, e^2, \dots, e^n は V^* の基底.

証明. $\sum_i \beta_i e^i = 0$ (ゼロ写像) ならば, 両辺に e_j を作用させると

$$0 = \sum_i \beta_i e^i(e_j) = \sum_i \beta_i \delta_j^i = \beta_j \quad (\forall j)$$

を得るから, e^1, \dots, e^n は一次独立である.

任意の $f \in V^*$ について, $f = \sum_i f(e_i) e^i$ が成り立つ. 実際, 任意の $v = \sum_i \alpha^i e_i$ に対して

$$\sum_i f(e_i) e^i(v) = \sum_i \sum_j f(e_i) \alpha^j e^i(e_j) = \sum_i \sum_j f(e_i) \alpha^j \delta_j^i = \sum_i \alpha^i f(e_i) = f(v)$$

となる. □

系 9.12. $\dim V = n$ なら $\dim V^* = n$.

命題 9.13. $V^{**} \simeq V$ (カノニカルな同型).

証明. $v \in V$ は $f \in V^*$ を $f(v) \in \mathbb{K}$ に写す写像 $v: V^* \rightarrow \mathbb{K}$ と見なせる. $u, v \in V$ は $u \neq v$ なら写像 $V^* \rightarrow \mathbb{K}$ としても異なる. $f, g \in V^*$, $\alpha, \beta \in \mathbb{K}$ とすると

$$v(\alpha f + \beta g) = (\alpha f + \beta g)(v) = \alpha f(v) + \beta g(v) = \alpha v(f) + \beta v(g)$$

となるから, これは線形写像である. よって V は V^{**} の部分ベクトル空間であり, $\dim V = \dim V^* = \dim V^{**} = n$ より $V = V^{**}$. □

問題 9.1. 無限次元ベクトル空間では $V = V^{**}$ とならない. これを調べよ.

U, V を (有限次元) ベクトル空間とする. 線形写像 $A : U \rightarrow V$ は U と V の基底を用いることで行列として表示できることを復習する. $e_1, e_2, \dots, e_n \in U$ を U の基底, $e^1, e^2, \dots, e^n \in U^*$ を U の双対基底, $f_1, f_2, \dots, f_m \in V$ を V の基底, $f^1, f^2, \dots, f^m \in V^*$ を V の双対基底とする. $A_j^i := f^i(A(e_j))$ とおくと $A(e_j) = \sum_{k=1}^m A_j^k f_k$ となる (両辺に f^i を作用させると確かめられる). $x = \sum_{j=1}^n \alpha^j e_j$ とおくと $A(x) = \sum_{j=1}^n \alpha^j A(e_j) = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^m f_i A_j^i \alpha^j$ であるから, 行列表示すると

$$\begin{bmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha^1 \\ \alpha^2 \\ \vdots \\ \alpha^n \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} f_1 & f_2 & \cdots & f_m \end{bmatrix} \begin{matrix} j \\ i \\ A_j^i \end{matrix} \begin{bmatrix} \alpha^1 \\ \alpha^2 \\ \vdots \\ \alpha^n \end{bmatrix}$$

となる. そこで, $U \simeq \mathbb{K}^n$, $V \simeq \mathbb{K}^m$ と見なしたときは

$$U \simeq \mathbb{K}^n \ni \begin{bmatrix} \alpha^1 \\ \alpha^2 \\ \vdots \\ \alpha^n \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} A_j^i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha^1 \\ \alpha^2 \\ \vdots \\ \alpha^n \end{bmatrix} \in \mathbb{K}^m \simeq V$$

と書ける. この行列 (a_j^i) を基底 $(e_i), (f_j)$ に関する A の行列表示という.

A の転置写像 (双対写像, 随伴写像) $A^* : V^* \rightarrow U^*$ を

$$A^*(g) := g \circ A$$

で定義する. なお, $A : U \rightarrow V$, $g : V \rightarrow \mathbb{K}$ であるから $g \circ A : U \rightarrow \mathbb{K}$ で, A, g そ

それぞれの線形性から

$$g \circ A(\alpha x + \beta y) = g(\alpha Ax + \beta Ay) = \alpha g \circ A(x) + \beta g \circ A(y) \quad (x, y \in U, \alpha, \beta \in \mathbb{K})$$

となり, $g \circ A \in U^*$ が確かめられる. $A: U \rightarrow V$ と $A^*: V^* \rightarrow U^*$ は写像の向きが逆方向になっていることに注意する:

$$\begin{array}{ccc} U & \xrightarrow{A} & V \\ U^* & \xleftarrow{A^*} & V^* \end{array}$$

例 9.4. $U \subseteq V$ で $i: U \rightarrow V$ を包含写像とすると, $i^*: V^* \rightarrow U^*$ は, $f: V \rightarrow \mathbb{R}$ の定義域を U に制限する制限写像になる.

A^* を基底 $(e^i), (f^j)$ で行列表示すると,

$$(A^*)^j_i = (f^j \circ A)(e_i) = f^j(A(e_i)) = A^j_i$$

となる. つまり A^* の行列表示は A の行列表示の転置である. (ここで A^j_i において j が列インデックス, i が行インデックスであることに注意する.) また, $g \in V^*$ を横ベクトル $(g_1 \ g_2 \ \cdots \ g_m)$ とみると, A^* は

$$(g_1 \ g_2 \ \cdots \ g_m) \longmapsto (g_1 \ g_2 \ \cdots \ g_m) \begin{bmatrix} A^i_j \end{bmatrix}$$

と A の行列表示を右から掛けることに対応する.

9.2.1 \mathbb{R} 係数のホモロジーとコホモロジー

K を単体的複体, $C_k = C_k(K, \mathbb{R})$ を k -チェインの定義で形式的結合の係数を \mathbb{Z} から \mathbb{R} に変えたものとする, これは C_k 次元の \mathbb{R} 上のベクトル空間になる. 境界作用素 $\partial_k : C_k \rightarrow C_{k-1}$ は \mathbb{Z} 係数のときと同様に定義され, $\partial_k \circ \partial_{k+1} = 0$ を満たし, チェイン複体が得られる:

$$\cdots \xrightarrow{\partial_{k+2}} C_{k+1} \xrightarrow{\partial_{k+1}} C_k \xrightarrow{\partial_k} C_{k-1} \xrightarrow{\partial_{k-1}} \cdots$$

\mathbb{R} 係数ホモロジー $H_k = H_k(K, \mathbb{R})$ は $H_k = \text{Ker } \partial_k / \text{Im } \partial_{k+1}$ と定義される.

C_{k+1}, C_k, C_{k-1} の基底を取り替えることで, $\partial_{k+1}, \partial_k$ の行列表現 $[\partial_{k+1}], [\partial_k]$ を

$$[\partial_{k+1}] = \begin{bmatrix} I_{r_{k+1}} & O \\ O & O \end{bmatrix}, \quad [\partial_k] = \begin{bmatrix} O & O \\ O & I_{r_k} \end{bmatrix}$$

とできる. ここで, r_k は ∂_k のランクである. したがって, $H_k = \mathbb{R}^{C_k - r_k} / \mathbb{R}^{r_{k+1}} = \mathbb{R}^{C_k - r_k - r_{k+1}}$ となる. \mathbb{Z} 係数のときとの違いは, ねじれ成分がなくなって, 自由アーベル群の部分が \mathbb{Z} から \mathbb{R} にかわったことである.

さて, C_k の双対空間 C_k^* を C^k で表す. C^k の元をコチェインという. コ境界作用素 $\delta_k := \partial_{k+1}^* : C^k \rightarrow C^{k+1}$ が定義される. これは $\delta_k \circ \delta_{k-1} = 0$ を満たすので, コチェイン複体

$$\cdots \xleftarrow{\delta_{k+1}} C^{k+1} \xleftarrow{\delta_k} C^k \xleftarrow{\delta_{k-1}} C^{k-1} \xleftarrow{\delta_{k-2}} \cdots$$

を得る. \mathbb{R} 係数コホモロジー群 $H^k = H^k(K, \mathbb{R})$ は $H^k = \text{Ker } \delta_k / \text{Im } \delta_{k-1}$ と定

義される．うえの基底のもとで， δ_{k-1}, δ_k の行列表現 $[\delta_{k-1}], [\delta_k]$ は，それぞれ $[\partial_k], [\partial_{k+1}]$ の転置行列となつて

$$[\delta_{k-1}] = \begin{bmatrix} O & O \\ O & I_{r_k} \end{bmatrix}, \quad [\delta_k] = \begin{bmatrix} I_{r_{k+1}} & O \\ O & O \end{bmatrix}$$

となる．したがつて \mathbb{R} 係数コホモロジー群 $H^k = \mathbb{R}^{c_k - r_{k+1}} / \mathbb{R}^{r_k} = \mathbb{R}^{c_k - r_{k+1} - r_k}$ となり， $H_k \simeq H^k$ である．

この事実は， C_k と C^k の間のペアリング $(\cdot, \cdot) : C_k \times C^k \rightarrow \mathbb{R}$ ， $(x, f) := f(x)$ を考えることで抽象的に証明できる．まず，次に注意する：

$$(\partial_{k+1}y, f) = (y, \delta_k f) \quad (y \in C^{k+1}, f \in C_k) \quad (1)$$

これは， δ_k が ∂_{k+1} の転置行列であることからわかる．すると， $\text{Im } \delta_{k-1}$ の直交空間 $(\text{Im } \delta_{k-1})^\perp = \{x \in C_k \mid (x, f) = 0 \quad (\forall f \in \text{Im } \delta_{k-1})\} = \{x \in C_k \mid (\partial_k x, g) = 0 \quad (\forall g \in C^k)\}$ は， $\text{Ker } \partial_k$ に等しく，同様に， $\text{Im } \partial_{k+1}$ の直交空間は， $\text{Ker } \delta_k$ となる．特に， $\dim \text{Im } \delta_{k-1} = c_n - \dim \text{Ker } \partial_k$ と $\dim \text{Im } \partial_{k+1} = c_n - \dim \text{Ker } \delta_k$ が成り立つ．したがつて， $\dim H^k = \dim \text{Ker } \delta_k - \dim \text{Im } \delta_{k-1} = c_n - \dim \text{Im } \partial_{k+1} - c_n + \dim \text{Ker } \partial_k = \dim H_k$ となる．

また，関係式 (1) によつて， C_k と C^k の間のペアリングは， H_k と H^k の間のペアリング

$$([x], [f]) \mapsto f(x)$$

を誘導することがわかる．Well-definedness を確かめてみると $x - x' = \partial_{k+1}y$ な

ら $f(x) - f(x') = f(x - x') = f(\partial_{k+1}y) = (\delta_k f)(y) = 0$ なので, $f \in \text{Ker } \delta_k$ に注意する. $f - f' = \delta_{k-1}g$ の場合も同様.

さらに, このペアリングは, 非退化である. すなわち H_k の直交空間は 0 のみで, H^k の直交空間も 0 しかない. したがって, H^k は, H_k の双対空間といってよいだろう.

注意 9.14. \mathbb{Z} 係数のコホモロジーも同様に定義されるが, 一般に, (\mathbb{Z} 係数の) ホモロジーとは, 同型にはならない.

問題 9.2. これについて調べよ.

9.3 テンソル

U, V, W を体 \mathbb{K} 上の有限次元のベクトル空間とする.

定義 9.15 (双線形写像). $\Phi : U \times V \rightarrow W$ が双線形写像 (W が \mathbb{K} のときは双線形式という) とは,

$$\begin{aligned} \Phi(\alpha u + \alpha' u', v) &= \alpha \Phi(u, v) + \alpha' \Phi(u', v), \\ \Phi(u, \beta v + \beta' v') &= \beta \Phi(u, v) + \beta' \Phi(u, v') \end{aligned} \quad (u, u' \in U, v, v' \in V, \alpha, \alpha', \beta, \beta' \in \mathbb{K})$$

が成り立つことをいう.

例 9.5. $U = \mathbb{R}^n, V = \mathbb{R}^m, A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ (行列) とすると, $(x, y) \mapsto x^\top A y$ は双線形.

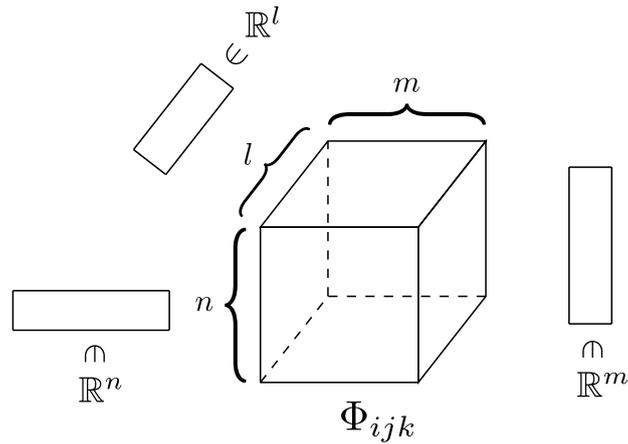


図 1: 多重線形写像のイメージ

U の基底を e_1, e_2, \dots, e_n , V の基底を f_1, f_2, \dots, f_m とすると

$$\Phi \left(\sum_i \alpha^i e_i, \sum_j \beta^j f_j \right) = \sum_i \sum_j \alpha^i \beta^j \Phi(e_i, f_j)$$

となる. $\Phi(e_i, f_j)$ を i, j 成分とする行列を考えると上の例になる.

定義 9.16 (多重線形写像). V_1, V_2, \dots, V_k, W を \mathbb{R} 上のベクトル空間とする.

$\Phi: V_1 \times V_2 \times \dots \times V_k \rightarrow W$ が多重線形写像とは, 各 V_i で線形

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, \alpha x_i + \alpha' x'_i, \dots, x_k) = \alpha \Phi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k) + \alpha' \Phi(x_1, x_2, \dots, x'_i, \dots, x_k)$$

となることをいう.

例 9.6. $V_1 = \mathbb{R}^n$, $V_2 = \mathbb{R}^m$, $V_3 = \mathbb{R}^l$ とし, $\Phi: V_1 \times V_2 \times V_3 \rightarrow \mathbb{R}$ を

$$\Phi(x, y, z) := \sum_{i,j,k} \Phi_{ijk} x_i y_j z_k$$

とすると, Φ は多重線形写像. 写像のイメージを図 1 に示す.

注意 9.17.

- ベクトル $\sim (a_i)$: インデックスが 1 つの数の組 \dots 1 次元配列
- 行列 $\sim (a_{ij})$: インデックスが 2 つの数の組 \dots 2 次元配列
- 多重線形写像・テンソル $\sim (a_{ijk\dots})$: インデックスが k 個の数の組 \dots k 次元配列

9.3.1 テンソル積の定義 1

U, V を体 \mathbb{K} 上の有限次元ベクトル空間とする

定義 9.18 (U と V のテンソル積 $U \otimes V$). U と V のテンソル積 $U \otimes V$ は, ベクトル空間

$$U \otimes V := \{ \Phi : U^* \times V^* \rightarrow \mathbb{K}, \text{ 双線形 } \}.$$

ここで, 双線形写像全体は $(\alpha\Phi + \beta\Psi)(x, y) := \alpha\Phi(x, y) + \beta\Psi(x, y)$ でベクトル空間になることに注意する. また, $U \otimes V$ と $(U^* \times V^*)^*$ の違いにも注意する (どちらかがどちらかに含まれるとも限らない).

$u \in U, v \in V$ のテンソル積 $u \otimes v \in U \otimes V$ は

$$u \otimes v(f, g) := u(f) \cdot v(g) \quad (f \in U^*, g \in V^*)$$

と定義される. ここで $U = U^{**}$ であり, $u(f) = f(u)$ に注意する. また, \cdot は \mathbb{K} に

おける積である。 $u \otimes v$ の双線形性は

$$\begin{aligned} u \otimes v(\alpha f + \alpha' f', g) &= u(\alpha f + \alpha' f') \cdot v(g) \\ &= (\alpha u(f) + \alpha' u(f')) \cdot v(g) \\ &= \alpha u \otimes v(f, g) + \alpha' u \otimes v(f', g') \end{aligned}$$

と確かめられる。

直感的には、 u は n 次の縦ベクトル、 v は m 次の縦ベクトルとみたとき、 $u \otimes v$ は、ランク 1 行列

$$u \otimes v = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_m \end{bmatrix}$$

を表していると考えることができる。このとき

$$u \otimes v(f, g) = \begin{bmatrix} f_1 & f_2 & \cdots & f_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_m \end{bmatrix} \in \mathbb{K}$$

と見ることができる。特に、 $U \otimes V$ は $n \times m$ 行列のなすベクトル空間と見なせる。

下の命題 9.22 も参照のこと。

命題 9.19. e_1, e_2, \dots, e_n を U の基底、 f_1, f_2, \dots, f_m を V の基底とする。このとき $e_i \otimes f_j$ ($i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m$) は $U \otimes V$ の基底。

す。これは,

$$\begin{aligned} & \sum_{i,j} \Phi(e^i, f^j) e_i \otimes f_j \left(\sum_{\nu} \alpha_{\nu} e^{\nu}, \sum_{\mu} \beta_{\mu} f^{\mu} \right) \\ &= \sum_{i,j} \Phi(e^i, f^j) \alpha_i \beta_j \\ &= \Phi \left(\sum_i \alpha_i e^i, \sum_j \beta_j f^j \right) \end{aligned}$$

から従う。 □

系 9.20. $\dim U \otimes V = \dim U \times \dim V$.

定義 9.21. 同様にして, k 個の \mathbb{K} 上のベクトル空間 V_1, \dots, V_k に対してテンソル積

$$V_1 \otimes V_2 \otimes \cdots \otimes V_k = \{ \Phi : V_1^* \times V_2^* \times \cdots \times V_k^* \rightarrow \mathbb{K}, \text{ 多重線形 } \}$$

が定義される。このとき

$$e_{i_1}^1 \otimes e_{i_2}^2 \otimes \cdots \otimes e_{i_k}^k \quad (i_1, i_2, \dots, i_k \text{ はインデックス})$$

は基底。

命題 9.22. $\text{Hom}(U, V)$ を U から V への線形写像全体とする。このとき $U^* \otimes V \simeq$

$\text{Hom}(U, V)$ (カノニカルな同型)。

証明. $\varphi \in \text{Hom}(U, V)$ をとると, 双線形写像 $\Phi : U \times V^* \rightarrow \mathbb{K}$ が

$$\Phi(u, v) = v(\varphi(u))$$

が定義される。逆に、双線形写像 $\Phi : U \times V^* \rightarrow \mathbb{K}$ をとると、 $\varphi : U \rightarrow V = V^{**}$ が

$$\varphi(u) = \Phi(u, \cdot) : V^* \rightarrow \mathbb{K}$$

が定義される。 □

例 9.7 (行列積をテンソルとみる). A, B を \mathbb{K} 上の n 次正方形行列とする。行列積 \bullet は

$$(A \bullet B)_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} B_{kj}$$

と定義される。 Mat を n 次正方形行列全体の集合とすると、 n^2 次元ベクトル空間 ($\simeq \mathbb{K}^{n \times n}$) と見なせる。そこで、行列積 \bullet は $\text{Mat} \times \text{Mat} \rightarrow \text{Mat}$ の双線形写像である。一方、 \bullet は多重線形写像 $\text{Mat} \times \text{Mat} \times \text{Mat}^* \rightarrow \mathbb{K}$ とも見ることができる。

つまり $\bullet \in \text{Mat}^* \otimes \text{Mat}^* \otimes \text{Mat}$ で、基底 $e_{ij} = e_i \otimes e_j$ に対する双対基底 e^{ij}

を用いると $\bullet = \sum_{i,j,k} e^{ik} \otimes e^{kj} \otimes e_{ij}$ と書ける。実際、

$$\begin{aligned} \bullet(A, B, e^{i'j'}) &= \sum_{i,j,k} e^{ik} \otimes e^{kj} \otimes e_{ij}(A, B, e^{i'j'}) \\ &= \sum_{i,j,k} e^{ik}(A) \cdot e^{kj}(B) \cdot e_{ij}(e^{i'j'}) \\ &= \sum_k A_{i'k} B_{kj'} \end{aligned}$$

であり、 $A \bullet B$ の $i'j'$ 成分が出る。

注意 9.23. 実は、行列積テンソル $\sum_{i,j,k} e^{ik} \otimes e^{kj} \otimes e_{ij}$ の「テンソル分解」と行列積の計算複雑度には深い関係がある。 $O(n^3)$ より速い行列積アルゴリズム (例 :

Strassen のアルゴリズム) は, このテンソルの低ランク分解によって設計される.

問題 9.3. これを調べよ.

TODO: テンソル分解について紹介する.

9.3.2 テンソル積の定義 2

U, V を体 \mathbb{K} 上の有限次元ベクトル空間とする. U と V のテンソル積 $U \otimes V$ は, $u_i \otimes v_i$ と書かれる元の形式的結合

$$U \otimes V := \left\{ \sum_{\text{有限和}} \alpha_i u_i \otimes v_i \mid u_i \in U, v_i \in V, \alpha_i \in \mathbb{K} \right\} / \sim$$

で定義される. ただし同値関係 \sim は

$$(u + u') \otimes v \sim u \otimes v + u' \otimes v,$$

$$u \otimes (v + v') \sim u \otimes v + u \otimes v',$$

$$\alpha(u \otimes v) \sim (\alpha u) \otimes v \sim u \otimes (\alpha v)$$

で定義される. **TODO:** 商空間を用いた書き方. これは前の定義によるテンソル積と同型になる. U と V の基底をそれぞれ $(e_i)_i, (f_j)_j$ としたとき, テンソル積 $U \otimes V$ の基底は $(e_i \otimes f_j)_{ij}$ になる.

問題 9.4. ちゃんと定式化せよ.

9.3.3 テンソル積の定義 3

定理 9.24. 以下を満たすベクトル空間 T と双線形写像 $t: U \times V \rightarrow T$ が同型を除いて一意に存在する.

- 任意のベクトル空間 W と双線形写像 $f: U \times V \rightarrow W$ に対し, $f = g \circ t$ となる線形写像 $g: T \rightarrow W$ が唯一存在する.

$$\begin{array}{ccc}
 U \times V & \xrightarrow[t \text{ 双線形}]{} & T \\
 & \searrow [f \text{ 双線形}] & \downarrow [g \text{ ユニーク, 線形}] \\
 & & W
 \end{array}$$

ここで「同型を除いて」とは, 条件を満たす異なる t', T' に対して同型写像 $g: T \rightarrow T'$ で $t' = g \circ t$ なるものが一意に存在することを意味する.

証明. 存在性: T として上の $U \otimes V$ をとる. $t: U \times V \rightarrow U \otimes V$ は $(u, v) \mapsto u \otimes v$ で定義する. W と f が与えられたときに, g として $\sum_i \alpha_i u_i \otimes v_i \mapsto \sum_i \alpha_i f(u_i, v_i)$ ととればよい (well-defined).

一意性: 条件を満たす異なる t', T' があったとすると,

$$\begin{array}{ccc}
 & & T \\
 & \nearrow t & \downarrow g \\
 U \times V & \xrightarrow{t'} & T' \\
 & \searrow t & \downarrow g' \\
 & & T
 \end{array}$$

から $t' = g \circ t$ と $t = g' \circ t'$ を得るので, $t' = g \circ g' \circ t'$ となる. 一方,

$$\begin{array}{ccc} U \times V & \xrightarrow{t'} & T' \\ & \searrow t' & \downarrow \text{id ユニーク} \\ & & T' \end{array}$$

で id の一意性から $g \circ g' = \text{id}$ となる. 同様に $g' \circ g = \text{id}$ を得るので, g, g' は同型写像で $t' = g \circ t$. □

定義 9.25. 上の定理で存在の保証される T を U と V のテンソル積といい, $U \otimes V$ と書く. u と v のテンソル積は $u \otimes v := t(u, v)$ で定義する.

9.3.4 線形写像のテンソル積, 行列のクロネッカー積

線形写像のテンソル積は次のように定義される. U, U', V, V' を \mathbb{K} 上のベクトル空間とし, $\varphi : U \rightarrow U'$, $\psi : V \rightarrow V'$ を線形写像とする. このとき, $\varphi \otimes \psi : U \otimes V \rightarrow U' \otimes V'$ は

$$\begin{cases} \varphi \otimes \psi(u \otimes v) := \varphi(u) \otimes \psi(v), \\ \varphi \otimes \psi\left(\sum_i \alpha_i u_i \otimes v_i\right) := \sum_i \alpha_i \varphi \otimes \psi(u_i \otimes v_i) \end{cases}$$

と定義する.

補題 9.26. これは well-defined.

例 9.8. A, B が 2×2 行列 $A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$ $B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}$ のときは

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B \\ A_{21}B & A_{22}B \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{cc|cc} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & A_{12}B_{11} & A_{12}B_{12} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & A_{12}B_{21} & A_{12}B_{22} \\ \hline A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & A_{22}B_{11} & A_{22}B_{12} \\ A_{21}B_{21} & A_{21}B_{22} & A_{22}B_{21} & A_{22}B_{22} \end{array} \right].$$

9.3.5 テンソル積の定義 4

TODO: 基底の変換に対する変化で定義するやり方を書く. 擬ベクトルなども紹介.

9.4 量子計算

テンソル積・クロネッカー積の使用例として, 量子計算を紹介する. 量子計算では, 1 個の量子ビットの状態は $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$ によって表される. こ

こで $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ は \mathbb{C}^2 の基底で, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ は $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ を満たすものとする. この量子ビットを「観測」すると, 確率 $|\alpha|^2$ で 0 が出力され, 確率 $|\beta|^2$ で 1 が出力される. $|0\rangle, |1\rangle$ の双対基底を $\langle 0|, \langle 1|$ で表す.

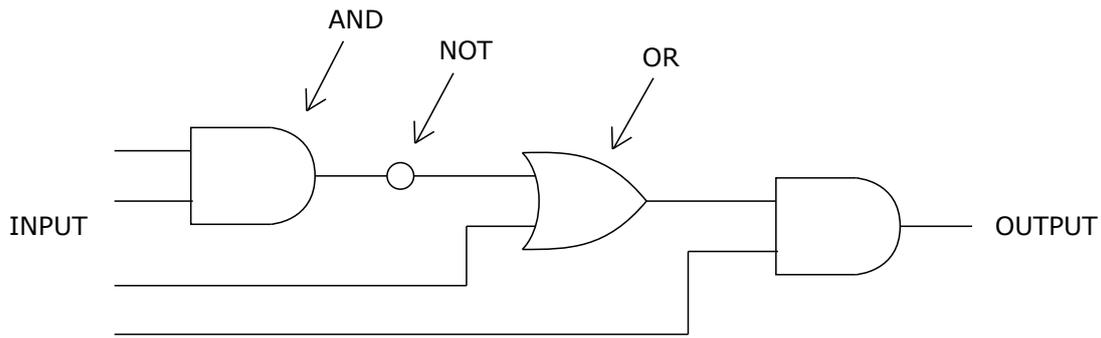


図 2: 論理回路.

N 個の量子ビットの状態は

$$\sum_{i_1, i_2, \dots, i_N \in \{0,1\}} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^2 = \mathbb{C}^{2^N},$$

$$\sum_{i_1, i_2, \dots, i_N \in \{0,1\}} |\alpha_{i_1 i_2 \dots i_N}|^2 = 1$$

で表される. $|i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle$ を $|i_1 i_2 \dots i_N\rangle$ と略記する. この量子ビットの観測により, 確率 $|\alpha_{i_1 i_2 \dots i_N}|^2$ で $i_1 i_2 \dots i_N$ が出力される.

例 9.9. $N = 2$ の場合の量子ビットは

$$\alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{10} |10\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + \alpha_{11} |11\rangle.$$

古典計算では, 計算はブール関数 $\{0,1\}^n \rightarrow \{0,1\}$ を表現する論理回路 (例えば図 2) で表される. 量子回路は図 3 のように, 入力として N -量子ビットを受け取り, N -量子ビットを出力するユニタリ行列 $U : \mathbb{C}^{2^N} \rightarrow \mathbb{C}^{2^N}$ のことである. (ユニタリ性よりノルム $\sum_{i_1, i_2, \dots, i_N \in \{0,1\}} |\alpha_{i_1 i_2 \dots i_N}|^2 = 1$ を保存する.)

典型的には, U は図 4 のように基本的な (小さな) 量子回路の合成で表される.

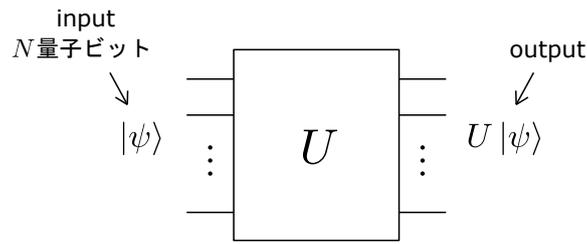


図 3: 量子回路.

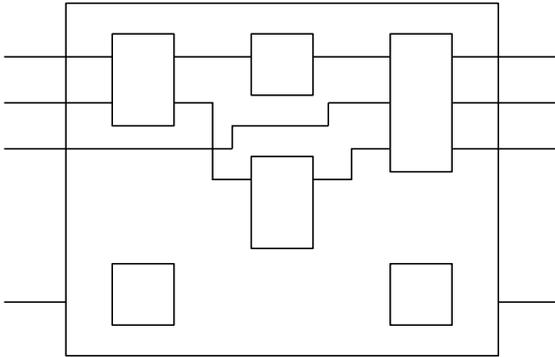


図 4: 量子回路の合成.

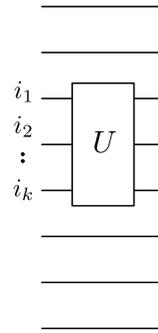


図 5: 小さな量子回路.

なお、図のような量子回路の意味は、量子ビット $|\psi\rangle$ に対して

$$|\psi\rangle = \sum \alpha_j |\psi'_j\rangle \otimes |\psi''_j\rangle \mapsto \sum \alpha_j U |\psi'_j\rangle \otimes |\psi''_j\rangle$$

と作用する回路である。ここで、 $|\psi'_j\rangle$ は $i_1 i_2 \dots i_k$ ビットに対応し、 $|\psi''_j\rangle$ はそれ以外に対応する。つまりこの回路は $U \otimes I$ を意味する。

基本的な量子回路を以下に挙げる。

1. アダマール演算 (図 6). 行列 $H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ で書かれる。すなわち

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle).$$

2. パウリ X (図 7). 行列 $X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ で書かれる. すなわち

$$H|0\rangle = |1\rangle, \quad H|1\rangle = |0\rangle.$$

これは古典回路の NOT に対応している.

3. パウリ Z (図 8). 行列 $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ で書かれる. すなわち

$$H|0\rangle = |0\rangle, \quad H|1\rangle = -|1\rangle.$$

4. $Z(\theta)$ (図 9). 行列 $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}$ で書かれる.

5. CNOT (図 10). 制御ビットとターゲットビットの 2 ビットを入力にとり, 制御ビットが 1 のときターゲットビットを反転し, 制御ビットが 0 のときはそのまま出力する. 行列で表すと

$$\begin{array}{cccc} & |00\rangle & |01\rangle & |10\rangle & |11\rangle \\ \begin{array}{l} |00\rangle \\ |01\rangle \\ |10\rangle \\ |11\rangle \end{array} & \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{array}$$

となる. クロネッカー積を用いて表すと

$$|0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

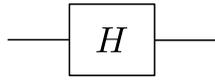


図 6: アダマール演算.

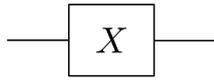


図 7: パウリ X.

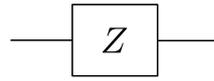


図 8: パウリ Z.

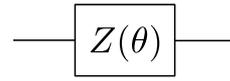


図 9: Z(theta).

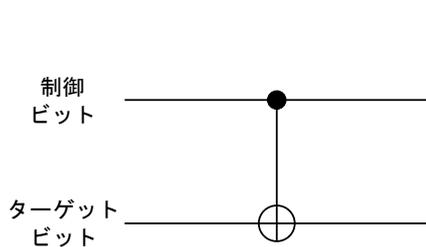


図 10: CNOT.

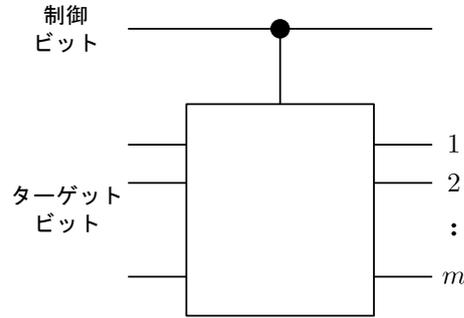


図 11: 制御 U.

6. 制御 U (図 11). 制御ビットが 1 のときに U を作用させ, 制御ビットが 0 のときはそのまま出力する. クロネッカー積を用いて

$$|0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \otimes I + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes U = \begin{bmatrix} I & O \\ O & O \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} O & O \\ O & U \end{bmatrix}$$

で表される.

例 9.10. 図 12 は各ビットにアダマール演算を作用させる回路であり,

$\overbrace{H \otimes H \otimes \dots \otimes H}^N$ で表される. この回路に $|0 \dots 0\rangle$ を作用させると

$$\begin{aligned} H \otimes H \otimes \dots \otimes H |0 \dots 0\rangle &= H |0\rangle \otimes H |0\rangle \otimes \dots \otimes H |0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \dots \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \\ &= \frac{1}{2^{N/2}} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N \in \{0,1\}} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle \end{aligned}$$

となる. すなわち, 全ての状態が等確率 $1/2^N$ で観測される.

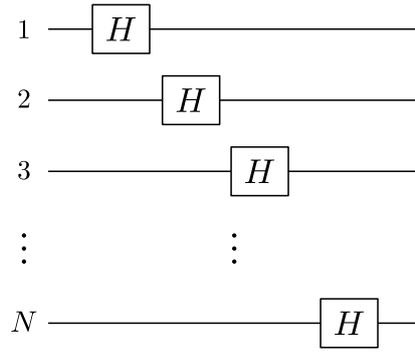


図 12: 量子回路の例.

例 9.11 (アダマールテスト). 図 13 の量子回路をアダマールテストとよぶ. U はユニタリーである. この回路に $|0\rangle \otimes |\psi\rangle$ を入力する. ここで, $|\psi\rangle$ は U の固有ベクトルとする. つまり $U|\psi\rangle = e^{i\lambda}|\psi\rangle$ である. すると, 1 つ目のアダマール回路で

$$|0\rangle \otimes |\psi\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |\psi\rangle$$

と写され, U によって

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |\psi\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |\psi\rangle + e^{i\lambda}|1\rangle \otimes |\psi\rangle)$$

と写され, 2 つ目のアダマール回路によって

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |\psi\rangle + e^{i\lambda}|1\rangle \otimes |\psi\rangle) &\mapsto \frac{1}{2}((|0\rangle + |1\rangle) \otimes |\psi\rangle + e^{i\lambda}(|0\rangle - |1\rangle) \otimes |\psi\rangle) \\ &= \frac{1 + e^{i\lambda}}{2}|0\rangle \otimes |\psi\rangle + \frac{1 - e^{i\lambda}}{2}|1\rangle \otimes |\psi\rangle \end{aligned}$$

と写される. そこで出力の 1 番目のビットを測定すると, 0 が出る確率は

$$\left| \frac{1 + e^{i\lambda}}{2} \right|^2 = \frac{1 + \cos \lambda}{2},$$

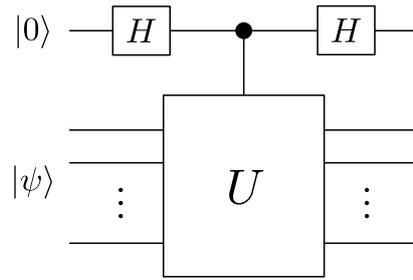


図 13: アダマールテスト.

1 が出る確率は

$$\left| \frac{1 - e^{i\lambda}}{2} \right|^2 = \frac{1 - \cos \lambda}{2}$$

となる．よって，アダマールテストによって $2^N \times 2^N$ サイズの行列の固有値の位相 λ を行列演算なしで推定することができる．