すなわち、頂点のみ。それ以外は、固有値 $-1/2$ の対角化できない 2 次行列であるから、基底を取り替えて、

$$\begin{pmatrix} -1/2 & 1 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$$

という表示を得る。したがって、

$$\begin{pmatrix} -1/2 & 1 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}^n = \begin{pmatrix} (-1/2)^n & n(-1/2)^{n-1} \\ 0 & (-1/2)^n \end{pmatrix} \to 0 \ (n \to \infty)$$

に注意すれば、$0 < \sigma < 1$ のとき、

$$\lim_{n\to\infty} \begin{pmatrix} 0 & 1-b & c \\ a & 0 & 1-c \\ 1-a & b & 0 \end{pmatrix}^n = \frac{1}{ab+bc+ca-a-b-c+3} \begin{pmatrix} bc-b+1 \\ ac-c+1 \\ ab-a+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

これは、初期分布 ${}^t(x,y,z)$ のとり方に係わらず、時間が経過すると、確率分布

$$\frac{1}{ab+bc+ca-a-b-c+3} \begin{pmatrix} bc-b+1 \\ ac-c+1 \\ ab-a+1 \end{pmatrix}$$

に急速に近づくことを意味する。

問 12.10. ($\sharp$) 細部を検証せよ。また、$c = 1/2$, $\sigma = 2/9$ の場合を詳しく調べよ。

問 12.11. 3 次の確率行列で、すべての固有値が有理数で互いに異なるものを具体的に一つ作れ。

Remark 5. 同様の結果が、正成分をもつ正方行列について広くなりたつ (Perron-Frobenius の定理)。

13 内積空間

ここからは純粋の代数（＝等号の数学）から離れることになるが、現代物理の根幹をなす量子論を定量的に記述する上でも欠かせない内積の数学について、その基礎的な部分を見ていこう。以下、数の範囲としては $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ または $\mathbb{C}$ のいずれかとし、$\mathbb{C}$ における複素共役を $\overline{z}$ のように表す。$\mathbb{K}$ 上のベクトル空間 V における**内積** (inner product) とは、2 つのベクトル $v, w \in V$ に数 $(v|w) \in \mathbb{K}$ を対応させる関数で、以下の条件を満たすものをいう。

(i) $(v|w)$ は w について線型。
(ii) $(v|w) = \overline{(w|v)}$.
(iii) $(v|v) \geq 0$ であり (正値性)、$(v|v) = 0$ となるのは $v = 0$ の場合に限る (定値性)。

(i) と (ii) から、内積 $(v|w)$ は v について共役線型[*83](conjugately linear) であることがわかる。

内積が指定されたベクトル空間を**内積空間** (inner product space) と称する。

問 13.1. 複素ベクトル空間の場合に、内積の性質 (ii), (iii) を、(ii)' $(v|w)$ は v についても線型、(iii)' $(v|v) \geq 0$、で置き換えると、$(v|w) = -(w|v)$ $(v, w \in V)$ がしたがう。

[*83] $(v' + \alpha v|w) = (v'|w) + \overline{\alpha}(v|w)$ が成り立つこと。反線型 (anti-linear) ともいう。

ここで、行列に対する操作で残っていたものを説明しておこう。行列 $A \in M_{m,n}(\mathbb{C})$ に対して、その複素共役 (complex conjugate[*84]) $\overline{A} \in M_{m,n}(\mathbb{C})$ を $\overline{A} = (\overline{a_{j,k}})$ で、**エルミート共役** (Hermitian[*85] conjugate) $A^* \in M_{n,m}(\mathbb{C})$ を $A^* = {}^t\overline{A} = \overline{{}^tA}$ で定める。$\overline{AB} = \overline{A}\,\overline{B}$, $(AB)^* = B^*A^*$ に注意。ついでに、n 次正方行列 $A = (a_{jk})$ の**跡** (trace) が対角成分の和 $\mathrm{tr}(A) = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn}$ であったことを思い出しておく。

例 13.1.

(i) 行列空間 $M_{m,n}(\mathbb{K})$ の標準内積を $(A|B) = \mathrm{tr}(A^*B) = \mathrm{tr}(BA^*) = \sum_{j,k} \overline{a_{j,k}} b_{j,k}$ で定める。
(ii) とくに、列ベクトル空間 $\mathbb{K}^n$ の標準内積は $(v|w) = v^*w = \sum_j \overline{v_j} w_j$ で与えられる。

例 13.2.

(i) 有界閉区間 $[a, b]$ 上の複素数値連続関数全体のつくるベクトル空間 V において、
$$(f|g) = \int_a^b \overline{f(t)} g(t)\, dt$$
は V における内積を定める。
(ii) 多項式ベクトル空間 $\mathbb{C}[t]$ における内積を
$$(f|g) = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(t)} g(t) e^{-t^2/2}\, dt$$
で定めることができる。

定理 13.3 (内積の不等式[*86])**.** 内積に関して、不等式 $|(v|w)|^2 \leq (v|v)(w|w)$ が成り立ち、等号は $\{v, w\}$ が一次従属の場合に限っておこる。

Proof. v, w のいずれかが零ベクトルの時に正しいことは明らかなので、$v \neq 0$, $w \neq 0$ の場合を考える。複素数 λ をパラメータとした等式
$$(\lambda v + w|\lambda v + w) = |\lambda|^2(v|v) + \overline{\lambda}(v|w) + \lambda(w|v)) + (w|w)$$
において、$\lambda = -(w|v)/(v|v)$ を代入すると、右辺は $(w|w) - |(v|w)|^2/(v|v)$ となる一方で、左辺は ≥ 0 であることから内積の不等式を得る。さらに内積の不等式で等号が成り立てば、左辺 $= 0$ より、$w = -\lambda v$ となって、$\{v, w\}$ は一次従属。逆に $\{v, w\}$ が一次従属、すなわち $v = \alpha w$ または $w = \beta v$ であれば、$|(v|w)|^2 = (v|v)\,(w|w)$ となることはすぐに分かる。 □

Remark 6. 証明をたどれば分かるように、内積の不等式自体は正値性だけから出る。

内積空間において、ベクトル v の**大きさ**[*87] (magnitude) を $\|v\| = \sqrt{(v|v)}$ で定めると、$\|\alpha v\| = |\alpha|\,\|v\|$ $(\alpha \in \mathbb{K})$ であり、内積の不等式から**三角不等式** (triangle inequality) $\|v + w\| \leq \|v\| + \|w\|$ がしたがう。

[*84] ラテン語の con (ともに) と jugum（くびき）に由来する。文法用語としては活用の意味もある。くだけて「芋づる式」であるか。

[*85] フランスの数学者 Charles Hermite (1822–1901) が、実数と似た性質を行列に見い出したことにちなむ。英語では、はーみっしゃん、のように発音するのだが、これを嫌う人もいるようで、昔々、物理の先生が量子力学の授業で、エルミッチャン、エルミッチャンと連呼していたのが、今に懐かしい。

[*86] 通常、Cauchy-Schwarz の不等式あるいは Schwarz の不等式と呼ばれる。元々は数列あるいは積分についての不等式で、この二人以外にもいろいろな人たちが関係している。ということで、ここでは中立的な名称にしておく。ちなみに、この洒落た証明は Schwarz によるものらしい。

[*87] 大きさの他に、長さ (length)、ノルム (norm) もよく使われる。高校でのように絶対値記号を流用することもあるが、ここでは混乱を避けるためにノルムの記号で表す。

問 13.2. 内積の不等式から三角不等式を、三角不等式から内積の不等式を、互いに導け。

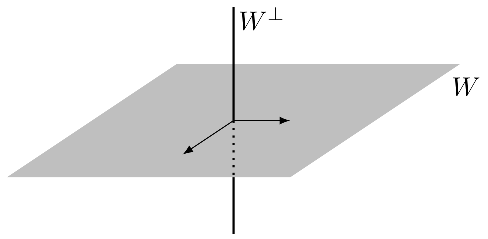
実内積空間においては、余弦定理がなりたつように、2つのベクトルの成す角度 θ ($0 \leq \theta \leq \pi$) を

$$\cos\theta = \frac{(v|w)}{\|v\|\,\|w\|}$$

で定義する。この解釈に準じて、複素内積空間においても、$(v|w) = 0$ である2つのベクトルは**直交する**という言い方をする。内積空間の部分集合 S に対して、V の部分空間 $S^\perp$ を

$$S^\perp = \{v \in V; (v|w) = 0 \text{ for all } w \in S\}$$

で定める。定義から $S \subset (S^\perp)^\perp$ である。S が部分空間 W であるとき、$W^\perp$ を W の**直交補空間** (orthogonal complement) とよぶ。このとき、内積の正定値性から $W \cap W^\perp = \{0\}$ が成り立つ。



問 13.3. (♯) $S^\perp$ が部分空間であることと $S \subset (S^\perp)^\perp$ および $W \cap W^\perp = \{0\}$ を確かめよ。

零でないベクトルの集まり $e_1, \cdots, e_m$ は、$(e_j|e_k) = 0$ ($j \neq k$) であるとき**直交系** (orthogonal system)、より限定的に $(e_j|e_k) = \delta_{j,k}$ であるとき**正規直交系** (orthonormal[*88] system) という。大きさが 1 のベクトルを**単位ベクトル** (unit vector) と呼ぶ習慣に従えば、正規直交系とは、互いに直交する単位ベクトルの集まりに他ならない。正規直交系で基底になっているものを**正規直交基底** (orthonormal basis) とよぶ。

直交系 $e_1, \cdots, e_m$ から正規直交系を作るのは簡単で、それぞれのベクトルを $e_1/\|e_1\|, \cdots, e_m/\|e_m\|$ のように規格化 (normalization) すればよい。

例 13.4.

(i) 3次元幾何ベクトル空間において、直交座標系に付随した単位ベクトル $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ は正規直交基底。
(ii) $\mathbb{K}^n$ において、基本ベクトル $\{\delta_j\}$ は正規直交基底を成す。
(iii) ${}^t\mathbb{C}^n$ において、$f_j = \frac{1}{\sqrt{n}}(1, e^{2\pi ij/n}, e^{2\pi i2j/n}, \cdots, e^{2\pi i(n-1)j/n})$ ($j = 1, \cdots, n$) は正規直交基底をなす。
(iv) 閉区間 $[0, 2\pi]$ の上で定義された連続関数の作る内積空間において、三角関数系

$$\{\cos(nx)/\sqrt{\pi}, \sin(nx)/\sqrt{\pi}; n = 1, 2, \dots\}$$

に定数関数 $1/\sqrt{2\pi}$ を付け加えたものは正規直交系を成す。

問 13.4. (♯) 上の例の (iii), (iv) を確かめよ。

[*88] normal は、様々な場面で「具合がよい」ぐらいの意味合いで使われる響きのよい言葉である一方で、情報に乏しい。その訳語である正規は、それに拍車をかけた権威付けの風合いまである。物理では orthonormal に直交規格化という訳を当てていて、こちらの方がまだしもながら、五十歩百歩といったところ。単位ベクトルに合わせた単位直交系 (orthounital) でよかったものを。

正規直交系 $e_1, \cdots, e_m$ があると、ベクトルを $e_1, \cdots, e_m$ の一次結合で表す際の係数が簡単に計算できる。実際 $v = \sum_{j=1}^m \lambda_j e_j$ と e_k との内積を計算すれば、

$$(e_k|v) = \sum_{j=1}^n \lambda_j (e_k|e_j) = \lambda_k$$

となるので、$v = \sum_{j=1}^m (e_j|v)e_j$ を得る。とくに $v = 0$ の場合は $\lambda_k = 0$ を意味するので、$e_1, \cdots, e_m$ の一次独立性もわかる。また、この表示から、

$$(w|v) = \sum_{j=1}^m (w|e_j)(e_j|v) \quad \text{および} \quad (v|v) = \sum_{j=1}^m |(e_j|v)|^2$$

もわかる。

次に $e_1, \cdots, e_m$ が部分空間 $W \subset V$ の正規直交基底であったとしよう。ベクトル $v \in V$ に対して、$v_\perp = v - \sum_j (e_j|v)e_j$ とおけば、$(e_k|v_\perp) = (e_k|v) - \sum_j (e_j|v)(e_k|e_j) = 0$ $(1 \leq k \leq m)$ となることから、$v_\perp \in W^\perp$ である。これは、v が W のベクトル $\sum_j (e_j|v)e_j$ と $W^\perp$ のベクトル $v^\perp$ の和で書き表されることを意味するので、$W \cap W^\perp = \{0\}$ に注意すれば、$V = W \oplus W^\perp$ が示された。

このことから、すべての有限次元内積空間 V が正規直交基底をもつことがわかる。実際、基底ではない正規直交系 $e_1, \cdots, e_m$ に対して、$W = \mathbb{K}e_1 + \cdots + \mathbb{K}e_m$ に上の議論を適用すれば、$v \notin W$ であるベクトルに対して、$0 \neq v_\perp = v - \sum (e_j|v)e_j \in W^\perp$ に注意して $e_{m+1} = v_\perp / \|v_\perp\|$ とおくと、$e_1, \cdots, e_m, e_{m+1}$ は正規直交系となる。以下、これを繰り返すと、V は有限次元であるから、いつかは基底に到達する。この正規直交基底を作るアルゴリズムを **Gram-Schmidt の直交化** (Gram-Schmidt' orthogonalization) という。もう少し限定的に、一次独立なベクトルの列 $v_1, v_2, \cdots$ があるとき、部分空間の増大列

$$\langle v_1 \rangle \subset \langle v_1, v_2 \rangle \subset \langle v_1, v_2, v_3 \rangle \subset \cdots$$

に上の方法を適用することで、正規直交系 $e_1, e_2, \cdots$ を、$\langle v_1, \cdots, v_k \rangle = \langle e_1, \cdots, e_k \rangle$ $(k = 1, 2, \cdots)$ かつ e_{k+1} が

$$v_{k+1} - (e_1|v_{k+1})e_1 - \cdots - (e_k|v_{k+1})e_k$$

の単位ベクトル化に一致するように、順次求めることができる。こちらをグラム・シュミットの直交化と呼ぶことも多い。

Remark 7. 実際の計算では、次のような直交系 $f_1, f_2, \cdots$ をまず求め、しかる後に $e_k = f_k / \|f_k\|$ と置く方が効率的である。むしろ、これをグラム・シュミットの直交化と呼ぶべきか。

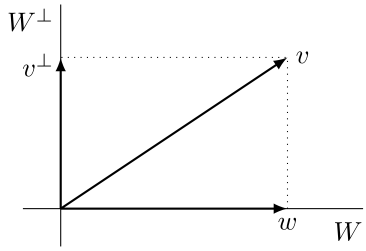
$$f_{k+1} = v_{k+1} - \sum_{j=1}^k \frac{(f_j|v_{k+1})}{(f_j|f_j)} f_j$$

以上をまとめて、以下の定理と定義を得る[*89]。

定理 13.5. 有限次元内積空間 V においては、与えられた正規直交系にベクトルを何個か追加することで正規直交基底にすることができる。とくに、正規直交基底がつねに存在する。

[*89] 世間の教科書では、アルゴリズムの部分が必要以上に強調されていて、この大事な点がおろそかになっていることが多い。

定義 13.6. 内積空間 V の部分空間を W とする。ベクトル $v \in V$ に対して、$v - w \in W^\perp$ となる $w \in W$ を v の W への**正射影** (orthogonal*[90] projection) とよぶ。正射影は、存在すれば一つしかない。実際、$w' \in W$ をもう一つの正射影とすると、$w - w' = (v - w') - (v - w)$ は $W \cap W^\perp$ に属し、0 となる。



定理 13.7 (射影定理)**.** 内積空間 V の有限次元部分空間 W に対して、$V = W \oplus W^\perp$ のように直交分解される。すなわち、V のすべてのベクトルは W への正射影をもつ。具体的に、$v \in V$ の W への正射影 w は、W の正規直交基底 $e_1, \cdots, e_m$ を使って、

$$w = \sum_{j=1}^{m} (e_j|v)e_j$$

と表示される (射影公式)。正規直交系のありがたさ。

系 13.8. 内積空間の有限次元部分空間 W に対して、$(W^\perp)^\perp = W$ が成り立つ。

Proof. $v \in (W^\perp)^\perp$ に対して、$0 = (v_\perp|v) = (v_\perp|v_\perp)$ より $v_\perp = 0$、すなわち、$v = \sum_j (e_j|v)e_j \in W$ である。 □

Remark 8. 上で述べた基本定理の証明に必要となる前提結果は基底の存在と次元の確定 (定理 11.4) のみで、したがって、内積空間についての多くは行列代数と独立に展開することができる。射影公式はまた、無限次元にまで拡張できて、とくに三角関数系の場合はフーリエ級数展開というものになる。

例 13.9. $\mathbb{R}^3$ の基底 $v_1 = {}^t(1,1,1), v_2 = {}^t(1,0,0), v_3 = {}^t(0,1,1)$ にグラム・シュミットの直交化を実行してみる。

例 13.10. $\mathbb{R}^3$ の自明でない部分空間は 1 次元または 2 次元で、それぞれに 2 次元または 1 次元の直交補空間が付随する。したがって、$\mathbb{R}^3$ を 2 つの部分空間に直交分解する方法は、原点を通る直線の数だけある。

問 13.5. ($\sharp$) ベクトル ${}^t(1,-2,2) \in \mathbb{R}^3$ の、部分空間 $W = \{{}^t(x,y,z) \in \mathbb{R}^3; x + y + z = 0\}$ およびその直交補空間 $W^\perp$ への正射影をそれぞれ求めよ。

例 13.11. 正射影を使って内積の不等式を導くこともできる。$w \neq 0$ に対して、一次元ベクトル空間 $W = \mathbb{K}w$ への $v \in V$ の正射影が $v_W = \frac{(v|w)}{(w|w)}w$ で与えられるので、$v_\perp = v - v_W \in W^\perp$ に注意すれば、

$$(v|v) = (v_W|v_W) + (v_\perp|v_\perp) \geq (v_W|v_W) = \frac{|(v|w)|^2}{(w|w)}.$$

問 13.6. 内積空間の一般の基底 $f = (f_1, \cdots, f_n)$ に Gram-Schmidt 直交化を施して得られる正規直交基底を $e = (e_1, \cdots, e_n)$ とすれば、e と f を結ぶ基底取替行列 $e^{-1}f$, $f^{-1}e$ は、上三角行列である。

*[90] ortho は「直立」を意味する古代ギリシャ語に由来し、垂直な、真っ直ぐな、正しい、を表す接頭辞。角 (gon) はどこに行った？

問 13.7. ($\sharp$) ガウス積分を復習 (予習？) した上で、例 13.2 で与えた多項式内積空間 $\mathbb{C}[t]$ において、$1, t, t^2, \cdots$ に Gram-Schmidt の直交化を適用してみよ。出現する多項式（エルミート多項式という）に規則性を見出せるか。

V のベクトル v から W への正射影を取り出す写像 $P : v \mapsto \sum_j (e_j|v)e_j$ は V における線型作用素になっていて、これも**正射影**あるいは単に**射影** (projection) と呼ばれる。ちなみに、物理では $P = \sum_j |e_j)(e_j|$ のように書き表す (Dirac の記法)[*91]。とくに $W = V$ であれば、P は V の恒等作用素 I に一致し、$I = \sum_j |e_j)(e_j|$ は単位の分解 (resolution of identity) と称される。

例 13.12. $\mathbb{C}^n$ の正規直交系 $e_1, \cdots, e_m$ に対して、部分空間 $W = \mathbb{C}e_1 + \cdots + \mathbb{C}e_m$ への正射影は、行列 $e_1e_1^* + \cdots + e_me_m^*$ によって表される。とくに、$\mathbb{C}^2$ の単位ベクトル ${}^t(e^{i\varphi/2}\cos\theta, e^{-i\varphi/2}\sin\theta)$ の張る部分空間への正射影は、次の行列で表される。**オイラーの公式**[*92](Euler's formula) $e^{it} = \cos t + i \sin t$ に注意。

$$\begin{pmatrix} e^{i\varphi/2}\cos\theta \\ e^{-i\varphi/2}\sin\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2}\cos\theta & e^{i\varphi/2}\sin\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\theta & e^{i\varphi}\cos\theta\sin\theta \\ e^{-i\varphi}\cos\theta\sin\theta & \sin^2\theta \end{pmatrix}.$$

例 13.13. $\mathbb{R}^3$ から、その部分空間 $W = \langle x - y + 2z = 0 \rangle$ への射影を表す行列を求める。

定理 13.14 (変分原理)**.** 内積空間 V において、$v \in V$ の有限次元部分空間 W への正射影 $Pv = \sum (e_j|v)e_j$ は、関数 $W \ni w \mapsto \|v - w\|$ の値を最小にするベクトルとして特徴づけられる。

有限個のパラメータ $\alpha_1, \cdots, \alpha_l$ をもつ関数 $y = f(x) = \sum_j \alpha_j f_j(x)$ を実際の観測値 (x_k, y_k) $(k = 1, \cdots, n)$ に当てはめる際に多用される方法として**最小二乗法** (the method of least squares) がある。これは、

$$\sum_k \left(y_k - \sum_j \alpha_j f_j(x_k) \right)^2$$

が最小となるようにパラメータ α を決めるというもので、ベクトル ${}^t(y_1, \cdots, y_n)$ をデータ空間 ${}^n\mathbb{R}$ の中の部分空間

$$W = \sum_j \mathbb{R} \begin{pmatrix} f_j(x_1) \\ \vdots \\ f_j(x_n) \end{pmatrix}$$

へ（標準内積に関して）正射影したものに一致するように α_j を選ぶという幾何学的意味をもつ。ただし、パラメータの数 l に比べて観測データの数 n は十分大きく、$\dim W = l$ であるものとする。具体的な計算は、Gram-Schmidt の直交化を経由しなくても、パラメータ α_i についての微分を 0 とおいて得られる連立一次方程式

$$\sum_k \left(y_k - \sum_j \alpha_j f_j(x_k) \right) f_i(x_k) = 0 \quad (i = 1, \cdots, l)$$

を α_j について解けばよい。ここでの大事な点は、このようにして求めた α_j が実際に最小値を与えることで、それを射影定理が保証してくれるところにある。

問 13.8. $f(x) = \alpha x + \beta$ の場合に、最小二乗法を使って α, β を定めよ。

[*91] 意外にも数学における定まった書き方がない。これは $\sum_j e_j e_j^*$ 以外に書きようはないと思うのだが、皆さん好き勝手してます。

[*92] なぜこのように書くかについては色々な説明が可能で、両辺を t で微分した結果を見比べるのが一つの方法。他に、Taylor 展開 $e^x = 1 + x + x^2/2 + x^3/3! + \cdots$ で $x = it$ を形式的に代入してみるとか。