

線形代数入門

平成 21 年 2 月 26 日

目次

- 1 ベクトル空間
- 2 双対基底
- 3 線形変換
- 4 完全性関係
- 5 直和分解
- 6 基底変換
- 7 内積
- 8 正規直交基底
- 9 直交直和分解
- 10 固有値問題

1 ベクトル空間

集合 V の要素 $|u\rangle, |v\rangle$ と複素数の全体 C の要素 c について、和 $|u\rangle + |v\rangle$ とスカラー倍 $|u\rangle c$ が定められているとする。これらが

$$\begin{aligned} |u\rangle + |v\rangle &\in V \\ |u\rangle c &\in V \end{aligned} \tag{1.1}$$

を満たすとき、 V を C 上のベクトル空間といい、 V の要素をベクトルという。 V のベクトル $|u\rangle$ をある基底 $a = \{|a_1\rangle, \dots, |a_n\rangle\}$ によって

$$|u\rangle = |a_1\rangle u_1^a + \dots + |a_n\rangle u_n^a \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} u_1^a \\ \vdots \\ u_n^a \end{bmatrix} \tag{1.2}$$

と展開するとき、係数 u_i^a を縦に並べて得られる縦ベクトル (上式の最右辺) を $|u\rangle$ の基底 a による列ベクトル表示という。 $|u\rangle$ の基底 a による列ベクトル表示は、 $|u\rangle$ のべつの基底 $b = \{|b_1\rangle, \dots, |b_n\rangle\}$ による列ベクトル表示 (次式の最右辺)

$$|u\rangle = |b_1\rangle u_1^b + \dots + |b_n\rangle u_n^b \stackrel{b}{=} \begin{bmatrix} u_1^b \\ \vdots \\ u_n^b \end{bmatrix} \tag{1.3}$$

とは一般に異なる。なお、基底ベクトル $|a_i\rangle$ の基底 a 自身による列ベクトル表示は

$$|a_i\rangle \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \leftarrow i \text{ 番目} \tag{1.4}$$

である。

2 双対基底

ベクトル $|u\rangle$ の基底 $a = \{|a_1\rangle, \dots, |a_n\rangle\}$ による展開

$$|u\rangle = |a_1\rangle u_1^a + \dots + |a_n\rangle u_n^a \quad (2.1)$$

から基底ベクトル $|a_i\rangle$ の係数 u_i^a をとりだす操作を $\langle \bar{a}_i|$ で表す. つまり, $\langle \bar{a}_i|$ を

$$\langle \bar{a}_i|u\rangle = u_i^a \quad (2.2)$$

によって定義する. (2.2) は

$$\langle \bar{a}_i|a_j\rangle = \delta_{ij} \quad (2.3)$$

と同等である. このように定義した $\bar{a}^* = \{\langle \bar{a}_1|, \dots, \langle \bar{a}_n|\}$ を基底 a の双対基底という. $|u\rangle$ の列ベクトル表示を行列とみなせば, その型は $n \times 1$ であるから, $\langle \bar{a}_i|$ の行列としての型は $1 \times n$ であることになる. つまり, 双対基底は横ベクトルであり, 行ベクトルによって表されることがわかる. (2.2), (2.3) から, $\langle \bar{a}_i|$ の基底 a による行ベクトル表示は

$$\langle \bar{a}_i| \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

↑ i 番目

である. したがって, 双対基底 \bar{a}^* は確かに横ベクトルのつくるベクトル空間 V^* の基底となっている. この V^* を V の双対空間という. また,

$$\langle f| = \bar{f}_1^a \langle \bar{a}_1| + \dots + \bar{f}_n^a \langle \bar{a}_n| \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} \bar{f}_1^a & \dots & \bar{f}_n^a \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

のように, 双対基底 \bar{a}^* の一次結合として表される横ベクトルを線形形式という. さらに, 線形形式とベクトルの積

$$\langle f|u\rangle \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} \bar{f}_1^a & \dots & \bar{f}_n^a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^a \\ \vdots \\ u_n^a \end{bmatrix} = \bar{f}_1^a u_1^a + \dots + \bar{f}_n^a u_n^a \quad (2.6)$$

は1つの複素数を与える. この $\langle f|u\rangle$ を線形形式 $\langle f|$ とベクトル $|u\rangle$ の間のスカラー積という.

3 線形変換

ベクトル空間 V において, あるベクトルを別のベクトルへと変換する操作 X がベクトル $|u\rangle, |v\rangle \in V$ と複素数 $c \in \mathbb{C}$ に対し,

$$\begin{aligned} X(|u\rangle + |v\rangle) &= X|u\rangle + X|v\rangle \\ X(|u\rangle c) &= (X|u\rangle) c \end{aligned} \tag{3.1}$$

を満たすとき, X を V の線形変換という. 線形変換 X を基底 a のそれぞれの基底ベクトルに作用させた結果を

$$\begin{aligned} X|a_1\rangle &= |a_1\rangle X_{11}^a + \cdots + |a_n\rangle X_{n1}^a \\ &\vdots \\ X|a_n\rangle &= |a_1\rangle X_{1n}^a + \cdots + |a_n\rangle X_{nn}^a \end{aligned} \tag{3.2}$$

とおこう. このとき (3.2) の右辺に現れる X_{ij}^a を並べて

$$X \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} X_{11}^a & \cdots & X_{1n}^a \\ \vdots & & \vdots \\ X_{n1}^a & \cdots & X_{nn}^a \end{bmatrix} \tag{3.3}$$

と書き, これを線形変換 X の基底 a による行列表示という. ベクトルの列ベクトル表示のときと同じく, 基底が異なれば線形変換の行列表示も一般には異なる. ただし, 恒等変換 I , つまり, 何もしない線形変換についてはその行列表示は基底によらずいつも単位行列

$$I \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} 1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & 1 \end{bmatrix} \tag{3.4}$$

である. なお, 双対基底 \bar{a}^* を用いると線形変換 X の基底 a による行列表示の (i, j) 成分は

$$X_{ij}^a = \langle \bar{a}_i | X | a_j \rangle \tag{3.5}$$

と表される.

4 完全性関係

基底ベクトル $|a_i\rangle$ とその双対基底 $\langle \bar{a}_i|$ の積 $|a_i\rangle\langle \bar{a}_i|$ を考える. $|a_i\rangle\langle \bar{a}_i|$ の行列としての型は $n \times n$ であるから, これは1つの線形変換である. 実際, $|a_i\rangle\langle \bar{a}_i|$ をベクトル $|u\rangle$ に作用させると

$$|a_i\rangle\langle \bar{a}_i|u\rangle = |a_i\rangle u_i^a \quad (4.1)$$

となるから, $|a_i\rangle\langle \bar{a}_i|$ は $|u\rangle$ の基底 a による展開において基底ベクトル $|a_i\rangle$ の部分を取り出す線形変換である. $|a_i\rangle\langle \bar{a}_i|$ を V から $|a_i\rangle$ を基底とする1次元部分ベクトル空間への射影という. 射影については

$$(|a_i\rangle\langle \bar{a}_i|)^2 = |a_i\rangle\langle \bar{a}_i| \quad (4.2)$$

$$|a_i\rangle\langle \bar{a}_i| \cdot |a_j\rangle\langle \bar{a}_j| = 0 \quad (i \neq j) \quad (4.3)$$

という重要な関係が成り立つ. また, $i \neq j$ のとき, 2つの射影の和 $|a_i\rangle\langle \bar{a}_i| + |a_j\rangle\langle \bar{a}_j|$ を $|u\rangle$ に作用させると,

$$(|a_i\rangle\langle \bar{a}_i| + |a_j\rangle\langle \bar{a}_j|)|u\rangle = |a_i\rangle u_i^a + |a_j\rangle u_j^a \quad (4.4)$$

となるから, $|a_i\rangle\langle \bar{a}_i| + |a_j\rangle\langle \bar{a}_j|$ は $|u\rangle$ から i 番目と j 番目の基底ベクトルの部分を取り出す線形変換である. つまり, $|a_i\rangle\langle \bar{a}_i| + |a_j\rangle\langle \bar{a}_j|$ は V から $|a_i\rangle, |a_j\rangle$ を基底とする2次元部分ベクトル空間への射影である. さらに, 完全性関係とよばれる重要な関係式

$$I = |a_1\rangle\langle \bar{a}_1| + \cdots + |a_n\rangle\langle \bar{a}_n| \quad (4.5)$$

が成り立つ. 完全性関係の意味は, 「すべての基底ベクトルへ射影を行った結果をさらにすべて加えることは, 何もしないこと, つまり, 恒等変換 I と同じである」ということである. なお, 完全性関係 (4.5) を基底 a 自身で表示すると

$$\begin{bmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} + \cdots + \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

である.

5 直和分解

V の n 個の基底ベクトル $|a_i\rangle$ を $i \in \spadesuit$ の組と $i \in \heartsuit$ の組の 2 組に分ける. この組分けにより完全性関係を

$$I = \sum_{i=1}^n |a_i\rangle\langle\bar{a}_i| = I_{\spadesuit} + I_{\heartsuit} \quad (5.1)$$

と分解しよう. ここで,

$$\begin{aligned} I_{\spadesuit} &= \sum_{i \in \spadesuit} |a_i\rangle\langle\bar{a}_i| \\ I_{\heartsuit} &= \sum_{i \in \heartsuit} |a_i\rangle\langle\bar{a}_i| \end{aligned} \quad (5.2)$$

である. I_{\spadesuit} , I_{\heartsuit} はそれぞれ $i \in \spadesuit$, $i \in \heartsuit$ の基底ベクトルの部分を取りだす射影であり,

$$\begin{aligned} I_{\spadesuit}^2 &= I_{\spadesuit} \\ I_{\heartsuit}^2 &= I_{\heartsuit} \\ I_{\spadesuit} I_{\heartsuit} &= 0 \end{aligned} \quad (5.3)$$

を満たす. さらに, V の任意のベクトル $|u\rangle$ を I_{\spadesuit} , I_{\heartsuit} によって射影して得られるベクトル $|u_{\spadesuit}\rangle = I_{\spadesuit}|u\rangle$, $|u_{\heartsuit}\rangle = I_{\heartsuit}|u\rangle$ のそれぞれの全体は V の部分ベクトル空間 V_{\spadesuit} , V_{\heartsuit} となる. このとき, ベクトル空間 V は部分ベクトル空間 V_{\spadesuit} と V_{\heartsuit} に直和分解されるといい,

$$V = V_{\spadesuit} \dot{+} V_{\heartsuit} \quad (5.4)$$

と表す. また, V_{\heartsuit} は V_{\spadesuit} の余空間であるという. このとき逆に, V_{\spadesuit} は V_{\heartsuit} の余空間である. また, 直和条件

$$V_{\spadesuit} \cap V_{\heartsuit} = \{0\} \quad (5.5)$$

が成り立つため, V の任意のベクトル $|u\rangle$ は

$$|u\rangle = |u_{\spadesuit}\rangle + |u_{\heartsuit}\rangle \quad (5.6)$$

と一意的に分解される.

6 基底変換

ベクトル空間 V の基底を a から b に変換する線形変換 P を基底変換といい,

$$\begin{aligned} P|a_1\rangle &= |b_1\rangle \\ &\vdots \\ P|a_n\rangle &= |b_n\rangle \end{aligned} \tag{6.1}$$

によって定義する. P の右側に基底 a についての完全性関係を用いると

$$P = |b_1\rangle\langle\bar{a}_1| + \cdots + |b_n\rangle\langle\bar{a}_n| \tag{6.2}$$

が得られる. また, P の逆変換 P^{-1} については

$$\begin{aligned} P^{-1}|b_1\rangle &= |a_1\rangle \\ &\vdots \\ P^{-1}|b_n\rangle &= |a_n\rangle \end{aligned} \tag{6.3}$$

であるから, P^{-1} の右側に基底 b についての完全性関係を用いると

$$P^{-1} = |a_1\rangle\langle\bar{b}_1| + \cdots + |a_n\rangle\langle\bar{b}_n| \tag{6.4}$$

が得られる. また, (6.2), (6.4) の基底 a による表示から

$$\begin{bmatrix} P^a & & P^a \\ \text{の} & \cdots & \text{の} \\ \text{第} & & \text{第} \\ 1 & & n \\ \text{列} & & \text{列} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |b_1\rangle & & |b_n\rangle \\ \text{の} & \cdots & \text{の} \\ a & & a \\ \text{表} & & \text{表} \\ \text{示} & & \text{示} \end{bmatrix} \tag{6.5}$$

$$\begin{bmatrix} P^{-1a} \text{の第1行} \\ \vdots \\ P^{-1a} \text{の第}n\text{行} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle\bar{b}_1| \text{の}a\text{表示} \\ \vdots \\ \langle\bar{b}_n| \text{の}a\text{表示} \end{bmatrix} \tag{6.6}$$

であることがわかる. ここで, P^a, P^{-1a} は P, P^{-1} の基底 a による行列表示である.

7 内積

ベクトル空間 V の2つのベクトル $|u\rangle$ と $|v\rangle$ に対して1つの複素数 $(|u\rangle, |v\rangle)$ を対応させる規則

$$\begin{aligned}(|u\rangle, |v\rangle + |w\rangle) &= (|u\rangle, |v\rangle) + (|u\rangle, |w\rangle) \\ (|u\rangle, |v\rangle)c &= (|u\rangle, |v\rangle)c \\ (|u\rangle, |v\rangle) &= (|v\rangle, |u\rangle)^* \\ (|u\rangle, |u\rangle) &\geq 0 \text{ (等号は } |u\rangle = 0 \text{ のときに限る)}\end{aligned}\tag{7.1}$$

が与えられているとき, V に内積が定義されているという. (7.1) より,

$$\begin{aligned}(|v\rangle + |w\rangle, |u\rangle) &= (|v\rangle, |u\rangle) + (|w\rangle, |u\rangle) \\ (|v\rangle)c, |u\rangle &= c^* (|v\rangle, |u\rangle)\end{aligned}\tag{7.2}$$

が導かれる. 内積が与えられたベクトル空間を計量ベクトル空間という. 計量ベクトル空間では

$$\| |u\rangle \| = \sqrt{(|u\rangle, |u\rangle)}\tag{7.3}$$

をベクトル $|u\rangle$ の長さといい, 長さが1のベクトルは正規化されているという. また, 2つのベクトル $|u\rangle, |v\rangle$ の内積 $(|u\rangle, |v\rangle)$ が0のとき $|u\rangle$ と $|v\rangle$ は互いに直交するという. さらに, ベクトル $|u\rangle$ のエルミート共役 $\langle u|$ を

$$\langle u|v\rangle = (|u\rangle, |v\rangle)\tag{7.4}$$

が任意の $|v\rangle$ について成り立つような線形形式として定義し,

$$\langle u| = (|u\rangle)^\dagger\tag{7.5}$$

と表す. 具体的には, 基底 a と双対基底 \bar{a}^* を用いて

$$\langle u| = (|u\rangle, |a_1\rangle)\langle \bar{a}_1| + \cdots + (|u\rangle, |a_n\rangle)\langle \bar{a}_n|\tag{7.6}$$

である.

8 正規直交基底

基底ベクトルの間の内積 $\langle a_i | a_j \rangle$ が

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij} \quad (8.1)$$

を満たすとき、基底 a は正規直交基底であるという。このとき、すべての基底ベクトルの長さは1に正規化されており、また、それぞれの基底ベクトルは互いに直交している。正規直交基底 a を基底として選んだときは、 $\langle a_i |$ の右側に完全性関係を用いると

$$\langle a_i | = \langle \bar{a}_i | \quad (8.2)$$

であることがわかる。したがって、正規直交基底についての完全性関係は

$$I = |a_1\rangle\langle a_1| + \cdots + |a_n\rangle\langle a_n| \quad (8.3)$$

である。また、正規直交基底によるベクトル $|u\rangle$ のエルミート共役 $\langle u |$ の行ベクトル表示は

$$\langle u | \stackrel{a}{=} \left[u_1^{a*} \quad \cdots \quad u_n^{a*} \right] \quad (8.4)$$

となる。その結果、ベクトル $|u\rangle$ と $|v\rangle$ の内積は

$$\langle u | v \rangle \stackrel{a}{=} \left[u_1^{a*} \quad \cdots \quad u_n^{a*} \right] \begin{bmatrix} v_1^a \\ \vdots \\ v_n^a \end{bmatrix} = u_1^{a*} v_1^a + \cdots + u_n^{a*} v_n^a \quad (8.5)$$

と与えられる。さらに、一般の線形変換 X のエルミート共役 X^\dagger を正規直交基底によって行列表示したものは、 X の行列表示を転置して複素共役をとったものとなる。つまり、

$$X^\dagger \stackrel{a}{=} \begin{bmatrix} X_{11}^{a*} & \cdots & X_{n1}^{a*} \\ \vdots & & \vdots \\ X_{1n}^{a*} & \cdots & X_{nn}^{a*} \end{bmatrix} \quad (8.6)$$

である。これより、 $(X|u\rangle, |v\rangle) = (|u\rangle, X^\dagger|v\rangle)$ であることがわかる。特に、 $H^\dagger = H$ を満たす線形変換をエルミート変換といい、 $(H|u\rangle, |v\rangle) = (|u\rangle, H|v\rangle)$ が成り立つ。また、 $U^\dagger = U^{-1}$ を満たす線形変換をユニタリ変換といい、 $(U|u\rangle, U|v\rangle) = (|u\rangle, |v\rangle)$ が成り立つ。なお、正規直交基底 a を正規直交基底 b に換える基底変換はユニタリ変換である。

9 直交直和分解

V の基底 a として正規直交基底を採用するとき, $|a_i\rangle$ への射影

$$|a_i\rangle\langle a_i| \quad (9.1)$$

を特に正射影という. 正射影の最も重要な性質は, それがエルミート変換であるという点である. さらに一般に, 複数の $|a_i\rangle\langle a_i|$ の和も正射影という. つまり,

$$I_\spadesuit = \sum_{i \in \spadesuit} |a_i\rangle\langle a_i| \quad (9.2)$$

は V から $\{|a_i\rangle \mid i \in \spadesuit\}$ を基底とする部分ベクトル空間 V_\spadesuit への正射影である. I_\spadesuit もエルミート変換であり, $I_\spadesuit^\dagger = I_\spadesuit$ を満たす. V が正射影によってその部分ベクトル空間に直和分解されるとき, これを直交直和分解といい記号として \oplus を用いて表す. このとき異なる部分ベクトル空間のベクトルは互いに直交する. 特に, V が I_\spadesuit と $I_\heartsuit = I - I_\spadesuit$ により

$$V = V_\spadesuit \oplus V_\heartsuit \quad (9.3)$$

と2つの部分ベクトル空間 $V_\spadesuit, V_\heartsuit$ に直交直和分解されるとき, V_\heartsuit は V_\spadesuit の直交余空間であるといい $V_\heartsuit = V_\spadesuit^\perp$ と表す. I_\spadesuit と同様に, I_\heartsuit もエルミート変換であり, $I_\heartsuit^\dagger = I_\heartsuit$ を満たす. このとき逆に, V_\spadesuit は V_\heartsuit の直交余空間である. 次に, 正射影を用いて非正規直交基底 b から正規直交基底 a をつくる方法について述べる. これは, グラム-シュミットの直交化法と呼ばれる. まず, $|a_1\rangle$ として $|b_1\rangle$ を正規化したものを選ぶ. つまり,

$$|a_1\rangle = \frac{|b_1\rangle}{\| |b_1\rangle \|} \quad (9.4)$$

である. 次に, $|a_2\rangle$ については

$$|a_2\rangle = \frac{|b_2\rangle - |a_1\rangle\langle a_1|b_2\rangle}{\| |b_2\rangle - |a_1\rangle\langle a_1|b_2\rangle \|} \quad (9.5)$$

と選べば, これは $\langle a_1|a_2\rangle = 0, \langle a_2|a_2\rangle = 1$ を満たす. 同様の手順で,

$$|a_k\rangle = \frac{|b_k\rangle - |a_1\rangle\langle a_1|b_k\rangle - \cdots - |a_{k-1}\rangle\langle a_{k-1}|b_k\rangle}{\| |b_k\rangle - |a_1\rangle\langle a_1|b_k\rangle - \cdots - |a_{k-1}\rangle\langle a_{k-1}|b_k\rangle \|} \quad (9.6)$$

と選べば, これは $\langle a_1|a_k\rangle = \cdots = \langle a_{k-1}|a_k\rangle = 0, \langle a_k|a_k\rangle = 1$ を満たす. このような操作によって最終的に正規直交基底 a を得ることができる.

10 固有値問題

線形変換 X について, 零ベクトルでないベクトル $|b\rangle$ が

$$X|b\rangle = |b\rangle\xi \quad (10.1)$$

を満たすとき, ξ を X の固有値, $|b\rangle$ を固有値 ξ に属する X の固有ベクトルという. ある固有値 ξ に属する固有ベクトルの一次結合の全体は V の部分ベクトル空間をつくる. これを固有値 ξ に対応する X の固有空間という. 固有値, 固有ベクトルを具体的に求めるには

$$\det(X - \xi I) \stackrel{a}{=} \begin{vmatrix} X_{11}^a - \xi & \cdots & X_{1n}^a \\ \vdots & & \vdots \\ X_{n1}^a & \cdots & X_{nn}^a - \xi \end{vmatrix} = 0 \quad (10.2)$$

を解く必要がある. (10.2) を X の固有方程式という. 線形変換 X の固有ベクトルから V の基底をつくることができるとき, X は対角化可能であるという. 固有ベクトルからつくった基底を $b = \{|b_1\rangle, \dots, |b_n\rangle\}$ とする. このとき, $X|b_i\rangle = |b_i\rangle\xi_i$ であるから

$$X \stackrel{b}{=} \begin{bmatrix} \xi_1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & \xi_n \end{bmatrix} \quad (10.3)$$

となる. つまり, X の基底 b による行列表示は対角行列となる. さらに, 双対基底を $\bar{b}^* = \{\langle\bar{b}_1|, \dots, \langle\bar{b}_n|\}$ として X の右側に基底 b についての完全性関係を用いると

$$X = |b_1\rangle\xi_1\langle\bar{b}_1| + \cdots + |b_n\rangle\xi_n\langle\bar{b}_n| \quad (10.4)$$

である. X を (10.4) の形に表すことを X をスペクトル分解するという. なお, エルミート変換の固有値はすべて実数であり, その固有ベクトルから正規直交基底を必ずつくることができる. また, ユニタリ変換の固有値はすべて絶対値が 1 の複素数であり, その固有ベクトルから正規直交基底を必ずつくることができる. したがって, X がエルミート変換やユニタリ変換の場合はその固有ベクトルからつくった正規直交基底 b によって

$$X = |b_1\rangle\xi_1\langle b_1| + \cdots + |b_n\rangle\xi_n\langle b_n| \quad (10.5)$$

とスペクトル分解できる.