線形代数要綱

線形空間

集合Vの元 $|a\rangle$，$|b\rangle$ について和 $|a\rangle + |b\rangle$ と複素数λによるスカラー倍$\lambda\,|a\rangle$が定められており，$|a\rangle + |b\rangle \in V$ および$\lambda\,|a\rangle \in V$が成り立つとき，Vは**線形空間**または**ベクトル空間**であるという。また，$|a\rangle$，$|b\rangle$ を**ベクトル**という。Vの任意のベクトル $|a\rangle$ は**基底**$e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots, |e_n\rangle\}$ によって $|a\rangle = a_1\,|e_1\rangle + \cdots + a_n\,|e_n\rangle$ と一意的に表される。nをVの**次元**といい，$n = \dim V$ と表す。また，Vの部分集合Wがそれ自身線形空間であるとき，WをVの**部分空間**という。

双対空間

線形空間Vにおいて，基底$e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots, |e_n\rangle\}$ によりベクトル $|a\rangle$ が $|a\rangle = a_1\,|e_1\rangle + \cdots + a_n\,|e_n\rangle$ と表されるとき，$\langle\varepsilon_i|a\rangle = a_i$ によって定義される$\varepsilon = \{\,\langle\varepsilon_1|\,, \cdots, \langle\varepsilon_n|\}$ を基底eの**双対基底**という。このとき，$\langle\varepsilon_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$ である。また，$\langle\alpha| = \alpha_1\,\langle\varepsilon_1| + \cdots + \alpha_n\,\langle\varepsilon_n|$ を**線形形式**といい，線形形式全体のなす線形空間V^*をVの**双対空間**という。$\langle\alpha|a\rangle = \alpha_1 a_1 + \cdots + \alpha_n a_n$ を $\langle\alpha|$ と $|a\rangle$ の**ペアリング**という。$|\,e\,]$ および$[\,\varepsilon\,|$を

$$|\,e\,] = [\ |e_1\rangle \cdots |e_n\rangle\ ] \qquad\qquad [\,\varepsilon\,| = \begin{bmatrix} \langle\varepsilon_1| \\ \vdots \\ \langle\varepsilon_n| \end{bmatrix} \tag{1}$$

とおいて行列記法を用いると，単位行列Iは

$$I = [\,\varepsilon\,|\,e\,] \tag{2}$$

と書ける。

線形変換

Vにおける変換$\hat{X}$が$\hat{X}(\,|a\rangle + |b\rangle) = \hat{X}\,|a\rangle + \hat{X}\,|b\rangle$ および$\hat{X}(\lambda\,|a\rangle) = \lambda\hat{X}\,|a\rangle$ を満たすとき，$\hat{X}$を**線形変換**という。特に，任意のベクトル $|a\rangle$ に対して$\hat{I}\,|a\rangle = |a\rangle$ を満たす線形変換$\hat{I}$を**恒等変換**という。また，$\hat{X}\hat{X}^{-1} = \hat{X}^{-1}\hat{X} = \hat{I}$ を満たす$\hat{X}^{-1}$が存在するとき，$\hat{X}^{-1}$を$\hat{X}$の**逆変換**という。$\hat{X}\,|a\rangle$ の全体を$\hat{X}$の**像**といい，$\operatorname{im}\hat{X}$ と表す。また，$\hat{X}\,|a\rangle = \mathbf{0}$ となる $|a\rangle$ の全体を$\hat{X}$の**核**といい，$\ker\hat{X}$ と表す。像と核はともにVの部分空間であり，$\dim V = \dim\operatorname{im}\hat{X} + \dim\ker\hat{X}$ が成り立つ。$\dim\operatorname{im}\hat{X} = \operatorname{rank}\hat{X}$ と表し，これを$\hat{X}$の**階数**という。

射影と完全性関係

任意のベクトル $|a\rangle = a_1\,|e_1\rangle + \cdots + a_n\,|e_n\rangle$ に対して，$(\,|e_i\rangle\langle\varepsilon_i|)\,|a\rangle = |e_i\rangle\,(\,\langle\varepsilon_i|a\rangle) = a_i\,|e_i\rangle$ によって定義される線形変換$\hat{P}_i = |e_i\rangle\langle\varepsilon_i|$ を$\ker\hat{P}_i$に沿うe_i軸への**射影**という。射影は$\hat{P}_i^2 = \hat{P}_i, \hat{P}_i\hat{P}_j = \hat{0}\ (i \neq j)$ を満たす。さらに，$\hat{I} = |e_1\rangle\langle\varepsilon_1| + \cdots + |e_n\rangle\langle\varepsilon_n|$，つまり，

$$\hat{I} = |\,e\,]\,[\,\varepsilon\,| \tag{3}$$

が成り立つ。これを**完全性関係**という。より一般に，$|e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle$ を r 組に分けて，それぞれの組を基底とする部分空間を $W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ とするとき，$\hat{P}_{(k)} = \sum_{|e_i\rangle \in W_{(k)}} \hat{P}_i$ を $\ker \hat{P}_{(k)}$ に沿う部分空間 $W_{(k)}$ への射影という。$W_{(k)} = \operatorname{im} \hat{P}_{(k)}$ である。また，$\hat{P}_{(k)}^2 = \hat{P}_{(k)}$，$\hat{P}_{(k)} \hat{P}_{(l)} = \hat{0}\ (k \neq l)$，$\hat{I} = \hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(r)}$ が成り立つ。このとき，$V = W_{(1)} \dot{+} \cdots \dot{+} W_{(r)}$ と表し，V は $W_{(1)}, \cdots, W_{(r)}$ の**直和**であるという。

列ベクトル表現と行ベクトル表現

基底 $e = \{\, |e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle \}$ によってベクトル $|a\rangle$ を

$$|a\rangle = a_1 |e_1\rangle + \cdots + a_n |e_n\rangle = |\, e\,] \boldsymbol{a} \qquad \text{ここで，} \boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \tag{4}$$

と表すとき，列ベクトル $\boldsymbol{a}$ を基底 e による $|a\rangle$ の**列ベクトル表現**という。$I = [\,\varepsilon \,|\, e\,]$ より，

$$\boldsymbol{a} = [\,\varepsilon\, |a\rangle \tag{5}$$

と書ける。また，双対基底 $\varepsilon = \{\, \langle \varepsilon_1|, \cdots, \langle \varepsilon_n| \}$ によって線形形式 $\langle \alpha|$ を

$$\langle \alpha| = \alpha_1 \langle \varepsilon_1| + \cdots + \alpha_n \langle \varepsilon_n| = \boldsymbol{\alpha} [\,\varepsilon\,| \qquad \text{ここで，} \boldsymbol{\alpha} = [\, \alpha_1 \cdots \alpha_n \,] \tag{6}$$

と表すとき，行ベクトル $\boldsymbol{\alpha}$ を双対基底 ε による $\langle \alpha|$ の**行ベクトル表現**という。$I = [\,\varepsilon \,|\, e\,]$ より，

$$\boldsymbol{\alpha} = \langle \alpha|\, e\,] \tag{7}$$

と書ける。列ベクトル表現と行ベクトル表現を**数ベクトル表現**という。完全性関係 $\hat{I} = |\, e\,][\,\varepsilon\,|$ を用いると，ペアリングは $\langle \alpha|a\rangle = \langle \alpha|\hat{I}|a\rangle = \langle \alpha|\, e\,][\,\varepsilon\,|a\rangle = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{a}$ と書ける。

行列表現

線形変換 $\hat{X}$ の基底 $e = \{\, |e_1\rangle, \cdots, |e_n\rangle \}$ に対する作用を表す行列 X を

$$\hat{X} |\, e\,] = |\, e\,] X \qquad \text{ここで，} X = \begin{bmatrix} X_{11} & \cdots & X_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n1} & \cdots & X_{nn} \end{bmatrix} \tag{8}$$

によって定義する。X を基底 e による $\hat{X}$ の**行列表現**という。$X_{ij} = \langle \varepsilon_i|\hat{X}|e_j\rangle$ である。$I = [\,\varepsilon\,|\, e\,]$ および $\hat{I} = |\, e\,][\,\varepsilon\,|$ より，

$$X = [\,\varepsilon\, |\hat{X}|\, e\,] \qquad\qquad \hat{X} = |\, e\,] X [\,\varepsilon\,| \tag{9}$$

と表せる。

基底変換

基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots\,, |e_n\rangle\}$ と基底 $e' = \{\,|e'_1\rangle\,, \cdots\,, |e'_n\rangle\}$ が

$$|\,e'\,] = |\,e\,]P \qquad \text{ここで，} P = \begin{bmatrix} P_{11} & \cdots & P_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{n1} & \cdots & P_{nn} \end{bmatrix} \tag{10}$$

の関係にあるとき，これを基底 e から基底 e' への**基底変換**といい，P を**基底変換の行列**という。このとき，基底 e' から基底 e への基底変換は，$|\,e\,] = |\,e'\,]P^{-1}$ である。P と P^{-1} は，

$$P = [\,\varepsilon\,|\,e'\,] \qquad\qquad P^{-1} = [\,\varepsilon'\,|\,e\,] \tag{11}$$

で与えられる。さらに，$[\,\varepsilon'\,| = [\,\varepsilon'\,|\,e\,][\,\varepsilon\,|$ に上の第 2 式を用いると，

$$[\,\varepsilon'\,| = P^{-1}[\,\varepsilon\,| \tag{12}$$

を得る。P の第 i 列は基底 e による $|e'_i\rangle$ の列ベクトル表現 $[\,\varepsilon\,|e'_i\rangle$ であり，これを $\boldsymbol{e}'_i$ と表すと，

$$P = [\,\boldsymbol{e}'_1 \cdots \boldsymbol{e}'_n\,] \tag{13}$$

である。P^{-1} の第 i 行は双対基底 ε による $\langle\varepsilon'_i|$ の行ベクトル表現 $\langle\varepsilon'_i|\,e\,]$ であり，これを $\boldsymbol{\varepsilon}'_i$ と表すと，

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}'_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varepsilon}'_n \end{bmatrix} \tag{14}$$

である。$\boldsymbol{e}'_i$ と $\boldsymbol{\varepsilon}'_i$ を用いると，基底 e による射影 $|e'_i\rangle\langle\varepsilon'_i|$ の行列表現は

$$[\,\varepsilon\ |e'_i\rangle\langle\varepsilon'_i|\ e\,] = \boldsymbol{e}'_i\boldsymbol{\varepsilon}'_i \tag{15}$$

となる。また，完全性関係は

$$I = \boldsymbol{e}'_1\boldsymbol{\varepsilon}'_1 + \cdots + \boldsymbol{e}'_n\boldsymbol{\varepsilon}'_n \tag{16}$$

と書ける。

表現の変換則

基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots\,, |e_n\rangle\}$ から基底 $e' = \{\,|e'_1\rangle\,, \cdots\,, |e'_n\rangle\}$ への基底変換 $|\,e'\,] = |\,e\,]P$ により，表現は以下のように変換される。ベクトルの列ベクトル表現については，$\boldsymbol{a}' = [\,\varepsilon'\,|a\rangle = P^{-1}[\,\varepsilon\,|a\rangle = P^{-1}\boldsymbol{a}$ より，

$$\boldsymbol{a}' = P^{-1}\boldsymbol{a} \tag{17}$$

である。また, 線形形式の行ベクトル表現については, $\boldsymbol{\alpha}' = \langle\alpha|\,e'\,] = \langle\alpha|\,e\,]P = \boldsymbol{\alpha}P$ より,

$$\boldsymbol{\alpha}' = \boldsymbol{\alpha}P \tag{18}$$

である。これらより，$\boldsymbol{\alpha}'\boldsymbol{a}' = \boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{a}$ である。線形変換の行列表現については，$X' = [\,\varepsilon'\,|\hat{X}|\,e'\,] = P^{-1}[\,\varepsilon\,|\hat{X}|\,e\,]P = P^{-1}XP$ より，

$$X' = P^{-1}XP \tag{19}$$

である。

固有値問題
線形変換 $\hat{X}$ について，$\hat{X}\,|p\rangle = \xi\,|p\rangle$ を満たす複素数 ξ と $\mathbf{0}$ でないベクトル $|p\rangle$ が存在するとき，ξ を $\hat{X}$ の**固有値**，$|p\rangle$ を $\hat{X}$ の固有値 ξ に属する**固有ベクトル**という。また，固有値 ξ に属する固有ベクトルの全体と $\mathbf{0}$ をあわせた集合は V の部分空間をなす。これを $\hat{X}$ の固有値 ξ に対応する**固有空間**という。これらを決定する問題を**固有値問題**という。

行列表現の対角化
線形変換 $\hat{X}$ の固有ベクトルからなる基底をとれる場合を考える。つまり，

$$\hat{X}\,|p_i\rangle = \xi_i\,|p_i\rangle \tag{20}$$

を満たす $|p_i\rangle$ からなる基底 $p = \{\,|p_1\rangle\,, \cdots\,, |p_n\rangle\}$ をとれるとする。このとき，基底 p による $\hat{X}$ の行列表現 Ξ は，基底 p の双対基底を $\pi = \{\,\langle\pi_1|\,, \cdots\,, \langle\pi_n|\}$ として，

$$\Xi = [\,\pi\,|\hat{X}|\,p\,] = \begin{bmatrix} \xi_1 & & O \\ & \ddots & \\ O & & \xi_n \end{bmatrix} \tag{21}$$

となる。つまり, Ξ は**対角行列**となる。したがって, 任意の基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,, \cdots\,, |e_n\rangle\}$ から基底 $p = \{\,|p_1\rangle\,, \cdots\,, |p_n\rangle\}$ への基底変換の行列を P とする，つまり，$P = [\,\varepsilon\,|\,p\,] = [\,\boldsymbol{p}_1 \cdots \boldsymbol{p}_n\,]$ とすると，基底 e による $\hat{X}$ の行列表現 X(必ずしも対角行列とは限らない) は，表現の変換 $\Xi = P^{-1}XP$ により，基底 p による $\hat{X}$ の行列表現 Ξ(対角行列) として対角化される。このとき，$\hat{X}$ は**対角化可能**であるという。

スペクトル分解
線形変換 $\hat{X}$ の固有ベクトルからなる基底 $p = \{\,|p_1\rangle\,, \cdots\,, |p_n\rangle\}$ をとれるとき, その双対基底を $\pi = \{\,\langle\pi_1|\,, \cdots\,, \langle\pi_n|\}$ とすると, $\hat{X} = \hat{X}\hat{I} = \hat{X}(\,|p_1\rangle\langle\pi_1| + \cdots + |p_n\rangle\langle\pi_n|) = \hat{X}\,|p_1\rangle\langle\pi_1| + \cdots + \hat{X}\,|p_n\rangle\langle\pi_n|$ であるから，$\hat{X}\,|p_i\rangle = \xi_i\,|p_i\rangle$ より，

$$\hat{X} = \xi_1\,|p_1\rangle\langle\pi_1| + \cdots + \xi_n\,|p_n\rangle\langle\pi_n| \tag{22}$$

と表せる。これを $\hat{X}$ の**スペクトル分解**という。上式より，

$$\langle\pi_i|\,\hat{X} = \xi_i\,\langle\pi_i| \tag{23}$$

および

$$\begin{aligned} \hat{X}^k &= \xi_1^k\,|p_1\rangle\!\langle\pi_1| + \cdots + \xi_n^k\,|p_n\rangle\!\langle\pi_n| \qquad (k=1,2,\cdots) \\ \hat{X}^{-1} &= \frac{1}{\xi_1}\,|p_1\rangle\!\langle\pi_1| + \cdots + \frac{1}{\xi_n}\,|p_n\rangle\!\langle\pi_n| \qquad (\xi_i \neq 0) \end{aligned} \tag{24}$$

が成り立つ。

固有射影

対角化可能な線形変換 $\hat{X}$ の相異なる固有値を $\xi_{(1)},\cdots,\xi_{(r)}$ とする。固有値 $\xi_{(k)}$ に対応する固有空間 $W_{(k)}$ への射影 $\hat{P}_{(k)} = \sum_{|p_i\rangle\in W_{(k)}}|p_i\rangle\!\langle\pi_i|$ を $\hat{X}$ の固有値 $\xi_{(k)}$ に対応する**固有射影**という。固有射影について，$\hat{X}\hat{P}_{(k)} = \hat{P}_{(k)}\hat{X} = \xi_{(k)}\hat{P}_{(k)}$ が成り立つ。完全性関係は $\hat{I} = \hat{P}_{(1)} + \cdots + \hat{P}_{(r)}$ と書ける。また，$\hat{X}$ のスペクトル分解は $\hat{X} = \xi_{(1)}\hat{P}_{(1)} + \cdots + \xi_{(r)}\hat{P}_{(r)}$ と書ける。$\hat{P}_{(k)}$ は

$$\hat{P}_{(k)} = \frac{(\hat{X}-\xi_{(1)}\hat{I})\cdots(\hat{X}-\xi_{(k-1)}\hat{I})(\hat{X}-\xi_{(k+1)}\hat{I})\cdots(\hat{X}-\xi_{(r)}\hat{I})}{(\xi_{(k)}-\xi_{(1)})\cdots(\xi_{(k)}-\xi_{(k-1)})(\xi_{(k)}-\xi_{(k+1)})\cdots(\xi_{(k)}-\xi_{(r)})} \tag{25}$$

により得られる。上式より，$\hat{P}_{(k)}$ は $\hat{X}$ の $r-1$ 次の多項式である。

可換な線形変換の同時対角化

$[\,\hat{X},\hat{Y}\,] = \hat{X}\hat{Y} - \hat{Y}\hat{X}$ を $\hat{X}$ と $\hat{Y}$ の**交換子**という。また，$[\,\hat{X},\hat{Y}\,] = \hat{0}$ のとき $\hat{X}$ と $\hat{Y}$ は**可換**あるいは**交換可能**であるという。そうでないとき，$\hat{X}$ と $\hat{Y}$ は**非可換**であるという。対角化可能な 2 つの線形変換 $\hat{X}$，$\hat{Y}$ が共通の固有ベクトルからなる基底によって同時に対角行列として表現できるための必要十分条件は $\hat{X}$ と $\hat{Y}$ が可換であることである。つまり，可換な線形変換は**同時対角化可能**である。このことは，以下のように示すことができる。$\hat{X}$，$\hat{Y}$ のスペクトル分解を $\hat{X} = \xi_{(1)}\hat{P}_{(1)} + \cdots + \xi_{(r)}\hat{P}_{(r)}$，$\hat{Y} = \eta_{(1)}\hat{Q}_{(1)} + \cdots + \eta_{(s)}\hat{Q}_{(s)}$ とする。$[\,\hat{X},\hat{Y}\,] = \hat{0}$ より $[\,\hat{P}_{(k)},\hat{Q}_{(l)}\,] = \hat{0}$ であるから，$\hat{X}$，$\hat{Y}$ は，共通の射影の組 $\{\hat{P}_{(k)}\hat{Q}_{(l)} | k=1,\cdots,r; l=1,\cdots,s\}$ を用いて，$\hat{X} = \sum_{k=1}^r\sum_{l=1}^s \xi_{(k)}\hat{P}_{(k)}\hat{Q}_{(l)}$，$\hat{Y} = \sum_{k=1}^r\sum_{l=1}^s \eta_{(l)}\hat{P}_{(k)}\hat{Q}_{(l)}$ とスペクトル分解できる。つまり，$\mathrm{im}\,\hat{P}_{(k)}\hat{Q}_{(l)}$ から選んだベクトルからなる基底を用いると，$\hat{X}$，$\hat{Y}$ の行列表現はともに対角行列となる。

固有多項式と固有方程式

線形変換 $\hat{X}$ について，ξ の n 次多項式 $\det(\hat{X}-\xi\hat{I})$ を $\hat{X}$ の**固有多項式**，ξ の n 次方程式 $\det(\hat{X}-\xi\hat{I}) = 0$ を $\hat{X}$ の**固有方程式**という。固有値 ξ は固有方程式の根 ξ として定まり，これに対応する固有空間は $\ker(\hat{X}-\xi\hat{I})$ として定まる。$\hat{X}$ が対角化可能であるためには，根 ξ の代数的重複度を $m(\xi)$ とするとき，すべての ξ について，$m(\xi) = \dim\ker(\hat{X}-\xi\hat{I}) = n - \mathrm{rank}(\hat{X}-\xi\hat{I})$ でなければならない。

内積

2つのベクトル $|a\rangle$ と $|b\rangle$ から1つの複素数 $(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle)$ への対応を与える演算 $(\cdot\,,\,\cdot)$ が以下の4つの性質を満たすとき，$(\cdot\,,\,\cdot)$ を**内積**という。

1. $(\,|b\rangle\,,\,|a\rangle) = (\,|a\rangle\,,\,|b\rangle)^*$
2. $(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle + |b'\rangle) = (\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) + (\,|a\rangle\,,\,|b'\rangle)$
3. $(\,|a\rangle\,,\lambda\,|b\rangle) = \lambda(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle)$
4. $(\,|a\rangle\,,\,|a\rangle) \geq 0$　等号は $|a\rangle = \mathbf{0}$ のときに限る

$(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = 0$ のとき $|a\rangle$ と $|b\rangle$ は直交するという。内積が定められた線形空間を**内積空間**または**計量線形空間**という。

エルミート共役

任意のベクトル $|b\rangle$ に対して $(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = \langle a|b\rangle$ を満たす線形形式 $\langle a|$ をベクトル $|a\rangle$ の**エルミート共役**という。$\langle a|$ を $|a\rangle^\dagger$ とも表す。$|a\rangle = a_1\,|e_1\rangle + \cdots + a_n\,|e_n\rangle$ のとき $(\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = a_1^*(\,|e_1\rangle\,,\,|v\rangle) + \cdots + a_n^*(\,|e_n\rangle\,,\,|b\rangle) = a_1^*\,\langle e_1|b\rangle + \cdots + a_n^*\,\langle e_n|b\rangle$ であるから，$\langle a| = \boldsymbol{a}^\dagger[\,e\,|$ と書ける。ここで，$\boldsymbol{a}^\dagger = [\,a_1^* \cdots a_n^*\,]$ である。また，$(\hat{X}\,|a\rangle\,,\,|b\rangle) = (\,|a\rangle\,,\hat{X}^\dagger\,|b\rangle)$ によって定義される線形変換 $\hat{X}^\dagger$ を線形変換 $\hat{X}$ の**エルミート共役**という。特に，$[\,\hat{X},\hat{X}^\dagger\,] = 0$ を満たす線形変換を**正規変換**という。重要な正規変換として，$\hat{X}^\dagger = \hat{X}$ を満たす線形変換として定義される**エルミート変換**，および，$\hat{X}^\dagger = \hat{X}^{-1}$ を満たす線形変換として定義される**ユニタリ変換**がある。

ノルム

$||\,|a\rangle\,|| = \sqrt{\langle a|a\rangle}$ をベクトル $|a\rangle$ の**ノルム**という。このとき以下の性質が成り立つ。

1. $|a\rangle \neq \mathbf{0} \Leftrightarrow ||\,|a\rangle\,|| > 0$
2. $||\lambda\,|a\rangle\,|| = |\lambda|||\,|a\rangle\,||$
3. $|\,\langle a|b\rangle\,| \leq ||\,|a\rangle\,||||\,|b\rangle\,||$　あるいは　$\langle a|b\rangle\langle b|a\rangle \leq \langle a|a\rangle\langle b|b\rangle$
(シュワルツの不等式)
4. $||\,|a\rangle + |b\rangle\,|| \leq ||\,|a\rangle\,|| + ||\,|b\rangle\,||$　(三角不等式)

正規直交基底と正射影

基底 $e = \{\,|e_1\rangle\,,\cdots,\,|e_n\rangle\}$ が $\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$ を満たすとき，基底 e は**正規直交基底**であるという。その双対基底は $\varepsilon = \{\,\langle e_1|\,,\cdots,\,\langle e_n|\}$ である。つまり，$[\,\varepsilon\,| = [\,e\,|$ である。したがって，正規直交基底の場合，

$$I = [\,e\,|\,e\,] \qquad\qquad \hat{I} = |\,e\,][\,e\,| \tag{26}$$

と書ける。このとき，射影 $\hat{P}_i = |e_i\rangle\langle e_i|$ はエルミート変換となる。つまり，$\hat{P}_i^\dagger = \hat{P}_i$ である。エルミートな射影を**正射影**という。より一般に，$|e_1\rangle\,,\cdots,\,|e_n\rangle$ を r 組に

分けて，それぞれの組を基底とする部分空間を $W_{(1)},\cdots,W_{(r)}$ とするとき，$\hat{P}_{(k)}=\sum_{|e_i\rangle\in W_{(k)}}\hat{P}_i$ を部分空間 $W_{(k)}$ への正射影という。$W_{(k)}=\mathrm{im}\,\hat{P}_{(k)}$ である。また，$\hat{P}_{(k)}^2=\hat{P}_{(k)}$，$\hat{P}_{(k)}\hat{P}_{(l)}=\hat{0}\ (k\neq l)$，$\hat{P}_{(k)}^\dagger=\hat{P}_{(k)}$，$\hat{I}=\hat{P}_{(1)}+\cdots+\hat{P}_{(r)}$ が成り立つ。このとき，$V=W_{(1)}\oplus\cdots\oplus W_{(r)}$ と表し，V は $W_{(1)},\cdots,W_{(r)}$ の**直交直和**であるという。

グラム-シュミットの直交化法

基底 $\tilde{e}=\{\,|\tilde{e}_1\rangle,\cdots,|\tilde{e}_n\rangle\}$ が正規直交基底でない場合，正射影を用いることにより，基底 $\tilde{e}$ から正規直交基底基底 $e=\{\,|e_1\rangle,\cdots,|e_n\rangle\}$ をつくることができる。以下の手続きにより正規直交基底を得る方法を**グラム-シュミットの直交化法**という。

(1) $|e_1\rangle=\dfrac{|\tilde{e}_1\rangle}{||\,|\tilde{e}_1\rangle\,||}$

(2) $\hat{P}=|e_1\rangle\!\langle e_1|$ とおき，$|e_2\rangle=\dfrac{|\tilde{e}_2\rangle-\hat{P}\,|\tilde{e}_2\rangle}{||\,|\tilde{e}_2\rangle-\hat{P}\,|\tilde{e}_2\rangle\,||}$

(3) $\hat{P}=|e_1\rangle\!\langle e_1|+|e_2\rangle\!\langle e_2|$ とおき，$|e_3\rangle=\dfrac{|\tilde{e}_3\rangle-\hat{P}\,|\tilde{e}_3\rangle}{||\,|\tilde{e}_3\rangle-\hat{P}\,|\tilde{e}_3\rangle\,||}$

$$\vdots$$

(k) $\hat{P}=|e_1\rangle\!\langle e_1|+\cdots+|e_{k-1}\rangle\!\langle e_{k-1}|$ とおき，$|e_k\rangle=\dfrac{|\tilde{e}_k\rangle-\hat{P}\,|\tilde{e}_k\rangle}{||\,|\tilde{e}_k\rangle-\hat{P}\,|\tilde{e}_k\rangle\,||}$

$$\vdots$$

正規直交基底による表現

正規直交基底 $e=\{\,|e_1\rangle,\cdots,|e_n\rangle\}$ を用いると，$|a\rangle$ と $|b\rangle$ の内積は $\langle a|b\rangle=\boldsymbol{a}^\dagger[\,e\,|\,e\,]\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}^\dagger\boldsymbol{b}=a_1^*b_1+\cdots+a_n^*b_n$ と書ける。この形の内積を**標準内積**という。また，線形変換 $\hat{X}$ の行列表現 X は

$$X=[\,e\,|\hat{X}|\,e\,]=\begin{bmatrix}\langle e_1|\hat{X}|e_1\rangle & \cdots & \langle e_1|\hat{X}|e_n\rangle\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle e_n|\hat{X}|e_1\rangle & \cdots & \langle e_n|\hat{X}|e_n\rangle\end{bmatrix} \tag{27}$$

で与えられる。つまり，$X_{ij}=\langle e_i|\hat{X}|e_j\rangle$ である。

正規直交基底の間の基底変換

正規直交基底 e から正規直交基底 e' への基底変換 $|\,e'\,]=|\,e\,]P$ を考える。基底変換の行列 P は

$$P=[\,e\,|\,e'\,]=\begin{bmatrix}\langle e_1|e_1'\rangle & \cdots & \langle e_1|e_n'\rangle\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \langle e_n|e_1'\rangle & \cdots & \langle e_n|e_n'\rangle\end{bmatrix} \tag{28}$$

と書ける。一方，正規直交基底 e' から正規直交基底 e への基底変換の行列は P^{-1} であるから，

$$P^{-1} = [\,e'\,|\,e\,] = \begin{bmatrix} \langle e'_1|e_1\rangle & \cdots & \langle e'_1|e_n\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle e'_n|e_1\rangle & \cdots & \langle e'_n|e_n\rangle \end{bmatrix} \tag{29}$$

と書ける。したがって，$P^{\dagger} = P^{-1}$，つまり，P はユニタリ行列である。

正規変換の固有値問題

正規変換 $\hat{X}$ の場合，その固有ベクトル，つまり，

$$\hat{X}\,|p_i\rangle = \xi_i\,|p_i\rangle \tag{30}$$

を満たすベクトル $|p_i\rangle$ からなる正規直交基底 $p = \{\,|p_1\rangle\,, \cdots\,, |p_n\rangle\}$ をとることができる。このとき，$\hat{X}$ は

$$\hat{X} = \xi_1\,|p_1\rangle\langle p_1| + \cdots + \xi_n\,|p_n\rangle\langle p_n| \tag{31}$$

とスペクトル分解できる。また，

$$\hat{X}^{\dagger} = \xi_1^*\,|p_1\rangle\langle p_1| + \cdots + \xi_n^*\,|p_n\rangle\langle p_n| \tag{32}$$

である。これより，

$$\hat{X}^{\dagger}\,|p_i\rangle = \xi_i^*\,|p_i\rangle \tag{33}$$

を得る。したがって，エルミート変換 $(\hat{X}^{\dagger} = \hat{X})$ の固有値は実数 $(\xi_i^* = \xi_i)$ であり，ユニタリ変換 $(\hat{X}^{\dagger} = \hat{X}^{-1})$ の固有値は絶対値が 1 の複素数 $(\xi_i^* = \xi_i^{-1})$ である。固有値 ξ_i を $\xi_i = x_i + iy_i$ とし，

$$\begin{aligned} \hat{X}_{\mathrm{R}} &= x_1\,|p_1\rangle\langle p_1| + \cdots + x_n\,|p_n\rangle\langle p_n| \\ \hat{X}_{\mathrm{I}} &= y_1\,|p_1\rangle\langle p_1| + \cdots + y_n\,|p_n\rangle\langle p_n| \end{aligned} \tag{34}$$

とおくと，$\hat{X}_{\mathrm{R}}^{\dagger} = \hat{X}_{\mathrm{R}}$, $\hat{X}_{\mathrm{I}}^{\dagger} = \hat{X}_{\mathrm{I}}$, $[\,\hat{X}_{\mathrm{R}}, \hat{X}_{\mathrm{I}}\,] = 0$ である。$\hat{X}_{\mathrm{R}}$ と $\hat{X}_{\mathrm{I}}$ を用いると，

$$\hat{X} = \hat{X}_{\mathrm{R}} + i\hat{X}_{\mathrm{I}} \tag{35}$$

と書ける。また，$\xi_i = r_i e^{i\theta_i}$ とし，

$$\begin{aligned} \hat{R} &= r_1\,|p_1\rangle\langle p_1| + \cdots + r_n\,|p_n\rangle\langle p_n| \\ \hat{U} &= e^{i\theta_1}\,|p_1\rangle\langle p_1| + \cdots + e^{i\theta_n}\,|p_n\rangle\langle p_n| \end{aligned} \tag{36}$$

とおくと，$\hat{R}^{\dagger} = \hat{R}$, $\hat{U}^{\dagger} = \hat{U}^{-1}$, $[\,\hat{R}, \hat{U}\,] = 0$ である。$\hat{R}$ と $\hat{U}$ を用いると，

$$\hat{X} = \hat{R}\hat{U} \tag{37}$$

と書ける。これを正規変換 $\hat{X}$ の**極分解**という。

正規変換の疑似逆変換
正規変換 $\hat{X}$ のスペクトル分解

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^{n} \xi_i \left|p_i\right\rangle\!\left\langle p_i\right| = \sum_{i(\xi_i \neq 0)} \xi_i \left|p_i\right\rangle\!\left\langle p_i\right| \tag{38}$$

に対して，

$$\hat{X}^+ = \sum_{i(\xi_i \neq 0)} \frac{1}{\xi_i} \left|p_i\right\rangle\!\left\langle p_i\right| \tag{39}$$

によって定義される線形変換 $\hat{X}^+$ を $\hat{X}$ の**疑似逆変換**という。$\hat{P} = \sum_{i(\xi_i \neq 0)} \left|p_i\right\rangle\!\left\langle p_i\right|$, $\hat{Q} = \sum_{i(\xi_i = 0)} \left|p_i\right\rangle\!\left\langle p_i\right|$ とおくと，これらはそれぞれ，$\mathrm{im}\,\hat{X}$，$\ker \hat{X}$ への正射影であり，$\hat{I} = \hat{P} + \hat{Q}$，$\hat{X}\hat{X}^+ = \hat{X}^+\hat{X} = \hat{P}$，$\hat{P}\hat{X} = \hat{X}\hat{P} = \hat{X}$，$\hat{P}\hat{X}^+ = \hat{X}^+\hat{P} = \hat{X}^+$，$\hat{Q}\hat{X} = \hat{X}\hat{Q} = \hat{0}$，$\hat{Q}\hat{X}^+ = \hat{X}^+\hat{Q} = \hat{0}$ を満たす。正規変換 $\hat{X}$ とベクトル $\left|f\right\rangle$ が与えられたとき，非同次方程式

$$\hat{X}\left|u\right\rangle = \left|f\right\rangle \tag{40}$$

を解くことを考える。解 $\left|u\right\rangle$ は，$\hat{P}\left|f\right\rangle = \left|f\right\rangle$，つまり，$\hat{Q}\left|f\right\rangle = \mathbf{0}$ のときに限り存在し，

$$\left|u\right\rangle = \left|u_*\right\rangle + \hat{X}^+\left|f\right\rangle \tag{41}$$

である。ここで，$\left|u_*\right\rangle$ は非同次方程式に付随する同次方程式 $\hat{X}\left|u_*\right\rangle = \mathbf{0}$ の一般解であり，$\hat{X}^+\left|f\right\rangle$ は非同次方程式の特殊解である。