2-5 非負定値作用素(行列)

作用素 $A: \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ が

$\boxed{\forall x \in \mathcal{H}, \langle x | A | x \rangle \geq 0}$ $\quad (\bar{x}_1 \cdots \bar{x}_n) A \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \geq 0$

のとき A は半正定値(非負定値)(non-negative difinite)という。$A \geq 0$ と書く def

$\boxed{\forall x \in \mathcal{H}, \langle x | A | x \rangle > 0}$ $A > 0$ と書く

のとき正定値(positive difinite)という。

Lem 以下は同値

(1) $A \geq 0$

(2) A はエルミートかつすべての固有値が 0 以上

[同値: (1) ⇔ (2)
(1) ⇒ (2) ∧ (2) ⇒ (1)

(証明)

(1) ⇒ (2)

(1) ⇔ $A \geq 0 \overset{def}{\Leftrightarrow} \forall x \in \mathcal{H}, \langle x | Ax \rangle \geq 0$

特に, $\langle x | Ax \rangle \in \mathbb{R}$

よって,

$$\begin{aligned} \langle x | Ax \rangle &= \langle A^* x | x \rangle \\ &= \overline{\langle A^* x | x \rangle} \\ &= \langle x | A^* x \rangle \end{aligned}$$

よって,

$\langle x | (A - A^*) x \rangle = 0 \quad \text{for } \forall x \in \mathcal{H}$

Fact 以下は同値

(1) $A = 0$

(2) $\forall x, y \in \mathcal{H}, \langle x | Ay \rangle = 0$

(3) $\forall x \in \mathcal{H}, \langle x | Ax \rangle = 0$

(1) ⇒ (2) ⇒ (3) は明らか

(3) ⇒ (1) は省略 (レポート)

次を使うと示せる。

(i) $\langle x | A | y \rangle = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{4} i^k \overline{\langle x + i^k y | A | x + i^k y \rangle}$

(ii) (i)より (3) ⇒ (2) が示せる。

(iii) $\forall x \in \mathcal{H}, \langle x | y \rangle = 0 \Rightarrow y = 0$ レポート (i)〜(iv) を示せ

(iv) (2) ⇒ (1) 締め切り 5/22

よって $A - A^* = 0 \quad \therefore A = A^*$ (エルミート)

A を固有値分解

⊛ $A = \sum_{k=1}^{n} a_k |e_k\rangle\langle e_k| \quad (n = \dim \mathcal{H})$

$$\begin{aligned} \langle e_\ell | A | e_\ell \rangle &= \sum_{k=1}^{n} a_k \langle e_\ell | e_k \rangle \langle e_\ell | e_k \rangle \\ &= a_\ell \geq 0 \end{aligned}$$

(2) ⇒ (1)

(2)の仮定より, A：エルミート かつ(固有値) ≥ 0

よって ㊍の固有値分解を考える。$(a_k \geq 0,\ k = 1 \cdots n)$

つまり $\forall x \in \mathcal{H}$,

$$\langle x | Ax \rangle = \sum_{k=1}^{n} a_k \langle x | e_k \rangle \langle e_k | x \rangle$$
$$= \sum_{k=1}^{n} a_k |\langle e_k | x \rangle|^2 \geq 0 \quad (\text{cf. } \bar{z} \cdot z = |z|^2)$$

$\therefore A \geq 0$ □

Lem 以下は同値

(1) $A \geq 0$

(2) $\exists B \geq 0,\ A = B^2$

(3) $\exists C,\ A = C^* C$

(証明)

(2) ⇒ (3) は明らか, ∵ Bはエルミートなので $A = B^2 = B^* B$

(3) ⇒ (1)

(3)を仮定すると,

$$\langle x | A | x \rangle = \langle x | C^* C | x \rangle$$
$$= \langle Cx | Cx \rangle$$
$$\geq 0 \quad \text{for } \forall x \in \mathcal{H}$$

よって $A \geq 0$

(1) ⇒ (2)

(1)を仮定すると, Aはエルミートなので固有値分解を考える。(＊)参照

$a_k \geq 0,\ k = 1 \cdots n$

$$B := \sum_{k=1}^{n} \sqrt{a_k} |e_k \rangle \langle e_k| = \sqrt{A}$$

とおくと,

$$B^2 = \left(\sum_{k=1}^{n} \sqrt{a_k} |e_k \rangle \langle e_k| \right) \left(\sum_{\ell=1}^{n} \sqrt{a_\ell} |e_\ell \rangle \langle e_\ell| \right)$$
$$= \sum_{k=1}^{n} \sum_{\ell=1}^{n} \sqrt{a_k} \sqrt{a_\ell}\, |e_k \rangle \underbrace{\langle e_k | e_\ell \rangle}_{= \delta_{k\ell}} \langle e_\ell|$$
$$= \sum_{k=1}^{n} a_k |e_k \rangle \langle e_k|$$
$$= A$$

Remark このBを $\sqrt{A}$と書く

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & & O \\ & a_2 & \\ O & & \ddots & \\ & & & a_n \end{bmatrix} \qquad \sqrt{A} = \begin{bmatrix} \sqrt{a_1} & & O \\ & \sqrt{a_2} & \\ O & & \ddots & \\ & & & \sqrt{a_n} \end{bmatrix} \qquad f(A) = \begin{bmatrix} f(a_1) & & O \\ & f(a_2) & \\ O & & \ddots & \\ & & & f(a_n) \end{bmatrix}$$

cf. エントロピー

$$H(p) = -\sum_x p(x) \log p(x)$$

von Neuman エントロピー

$$H(\rho) = -\mathrm{Tr}\, \rho \log \rho \quad , \rho \geq 0, \mathrm{Tr}\, \rho = 1 \text{. 密度行列}$$

Def 作用素の順序

$A \geq B \overset{def}{\Longleftrightarrow} A - B \geq 0$ 半正定値

$A > B \overset{def}{\Longleftrightarrow} A - B > 0$

2-6 作用素の表現

ベクトルの表現

$|e_1\rangle \cdots |e_n\rangle$ ONS for $\mathcal{H}$

$|x\rangle \in \mathcal{H}$

$$|x\rangle = \sum_{k=1}^{n} \underbrace{x_k}_{\in \mathbb{C}} |e_k\rangle$$

ここで, $\langle e_l|$ をかける

$$\langle e_l|x\rangle = \sum_{k=1}^{n} x_k \underbrace{\langle e_l|e_k\rangle}_{\delta_{l,k}}$$

$$= x_l \quad (l = 1 \cdots n)$$

よって $x_k = \langle e_k|x\rangle$ 係数の求め方

remind Fourier 変換 級数

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \underbrace{\hat{f}(\omega)}_{係数} \boxed{e^{i\omega x}}\, d\omega \longrightarrow \hat{f}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(x)\, e^{-i\omega x}\, dx$$

remark

$\langle e_k|x\rangle \longleftrightarrow \psi(x),\ \phi(x)$

波動関数

Thm (完全性条件) complete relation

任意の ONS $\{|e_k\rangle\}_{k=1}^{n}$ について,

$$\sum_{k=1}^{n} |e_k\rangle\langle e_k| = I$$

無限次元 ⇒ 可分な Hilbert 空間 ⇒ 離散 無限 CONS 存在

$\sum_{k=1}^{\infty} |e_k\rangle\langle e_k| = I$ CONS complete

(証明)

$\forall |x\rangle \in \mathcal{H}$ について

$$\left(\sum_{k=1}^{n} |e_k\rangle\langle e_k|\right)|x\rangle = \sum_{k=1}^{n} \underbrace{\langle e_k|x\rangle}_{= x_k} |e_k\rangle$$

$$= |x\rangle$$

$$= I|x\rangle$$

よって, $\sum_{k=1}^{n} |e_k\rangle\langle e_k| = I \Leftrightarrow |e_k\rangle$ ONS

行列の表現

$$A|e_l\rangle = \sum_{k=1}^{n} \underbrace{A_{kl}}_{表現行列} |e_k\rangle$$

$\langle e_m|$ をかける

$$\langle e_m|A|e_l\rangle = \sum_{k=1}^{n} A_{kl} \underbrace{\langle e_m|e_k\rangle}_{\delta_{m,k}}$$

$$= A_{ml}$$

表現行列の求め方

$$A_{k\ell} = \langle e_k | A | e_\ell \rangle$$

もうひとつの考え方

$$A = IAI$$

$$= \left(\sum_k |e_k\rangle\langle e_k|\right) A \left(\sum_\ell |e_\ell\rangle\langle e_\ell|\right)$$

$$= \sum_k \sum_\ell \underbrace{\langle e_k | A | e_\ell \rangle}_{A_{k\ell}} |e_k\rangle\langle e_\ell|$$

$$|e_k\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow k\text{-th} \quad , \quad \langle e_\ell| = \begin{array}{c} \quad\quad \ell\text{-th} \\ \quad\quad \downarrow \\ (0 \cdots 1 \cdots 0) \end{array}$$

$$|e_k\rangle\langle e_\ell| = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} (0 \cdots 1 \cdots 0)$$

$$= \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & 1 & \\ & 0 & & \end{pmatrix} & \leftarrow k \\ \quad\quad\quad \uparrow \ell & \end{array}$$

$$= \sum_{k,\ell} \begin{array}{c} \begin{pmatrix} k \longrightarrow & A_{k\ell} & 0 \\ 0 & \uparrow & \end{pmatrix} \\ \ell \end{array}$$

$$= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & \\ A_{21} & & & \\ \vdots & & & A_{nn} \end{pmatrix}$$