2020年5月20日

量子情報数理特論

電気通信大学 大学院情報理工学研究科

小川朋宏

1　線形代数の復習とHilbert空間

(課題1) 抽象ベクトル空間

(1) 抽象ベクトル空間とは何か？重要な確認事項を３つ述べよ．

(2) 抽象ベクトル空間を考えるメリットを述べよ．

(課題2) 基底とは何か？基底の要件を２つ述べて答えよ．

(課題3) 内積とHilbert空間

(1) 内積の要件を３つ述べよ．

(2) Hilbert空間の定義を述べよ．

(課題4) ブラケット記法の数学的定義

(1) ケットベクトルとは何か？

(2) ブラベクトルとは何か？

課題の提出は，LaTeXにせずSlackにテキストで書き込んで頂いて結構です．

- 上付き，下付き添字は`a^i`，`b_j`のように書いて頂いて大丈夫です．
- なんなら，数式をドル記号`$ ... $`で囲む必要もありません．

モチベーション

- ベクトルといえば$v = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$ みたいな物だけど，次元が増えると書くの面倒じゃね？
- 行列$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ も並べ直すとベクトルと見なせる：

$$\mathrm{vec}(A) := \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{12} \\ a_{22} \end{pmatrix}$$

  けど，並べ直すの面倒じゃね？
- 抽象ベクトル空間の考え方が身につくと，いろいろ楽ができます．

1.1　（抽象）ベクトル空間 (linear space)

Definition 1 (ベクトル空間). 集合 V と体 $\mathbb{K}$ について, [*1]

- 加法 "$+$": $(u,v) \in V \times V \longmapsto u+v \in V$,
- スカラー倍 "$\cdot$": $(a,v) \in \mathbb{K} \times V \longmapsto a \cdot v \in V$

が定義されていて，$a,b \in \mathbb{K}$ と $u,v,w \in V$ について以下の性質を満たすとき，
V を体 $\mathbb{K}$ 上のベクトル空間という.

(i) （加法の可換律）$u+v=v+u$
(ii) （加法の結合律）$u+(v+w)=(u+v)+w$
(iii) （ゼロベクトルの存在）$\exists\vec{0} \in V, \forall v \in V, v+\vec{0}=v$
(iv) （スカラー倍の結合律）$(ab)\cdot v = a\cdot(b\cdot v)$
(v) （分配律1）$a\cdot(u+v)=a\cdot u + a\cdot v$
(vi) （分配律2）$(a+b)\cdot v = a\cdot v + b\cdot v$
(vii) （体の単位元 $1 \in \mathbb{K}$ のスカラー倍）$1\cdot v = v$
(viii) （体のゼロ元 $0 \in \mathbb{K}$ のスカラー倍）$0 \cdot v = \vec{0}$

抽象ベクトル空間のポイント

ベクトルの足し算，スカラー倍，ゼロベクトルが V の中で閉じて定義されていて，
普通の幾何ベクトルと同じルールで計算出来るものである.

[*1] 体とは複素数の集合 $\mathbb{C}$，実数の集合 $\mathbb{R}$，有理数の集合 $\mathbb{Q}$，ガロア体 $GF(q)$（q は素数のべき乗で表される整数）のように「足し算，引き算，掛け算，割り算」が不自由なく行える集合のこと．量子力学では複素数体 $\mathbb{C}$ 上のベクトル空間が重要である.

Example 1 (数ベクトル空間). 以下は体$\mathbb{C}$上のn次元ベクトル空間である.

$$\mathbb{C}^n = \left\{ \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \middle| \, v_1, \ldots, v_n \in \mathbb{C} \right\}$$

Example 2 (n次多項式の集合).

$$P_n = \left\{ f : x \in \mathbb{R} \longmapsto a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n \in \mathbb{R} \,\middle|\, a_0, a_1, a_2, \ldots, a_n \in \mathbb{R} \right\}$$

- (CHECK!) 足し算：多項式の足し算，スカラー倍：普通のスカラー倍，ゼロベクトル：ゼロ多項式
- 体$\mathbb{R}$上の$n+1$次元ベクトル空間である

Example 3 ($m \times n$行列全体の集合).

$$M_{m,n}(\mathbb{C}) = \left\{ \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ldots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \ldots & a_{mn} \end{pmatrix} \middle| \, a_{i,j} \in \mathbb{C} \ (i = 1, 2, \ldots, m, \ j = 1, 2, \ldots, n) \right\}$$

- (CHECK!) 足し算＆スカラー倍：普通の行列の足し算＆スカラー倍，ゼロベクトル：ゼロ行列
- 体$\mathbb{C}$上の$m \times n$次元ベクトル空間である

以降ではベクトル空間の係数体（スカラー）として$\mathbb{C}$を主に扱う.

1.2　基底 (basis)

Definition 2. ベクトル空間のある部分集合 $\{e_1, e_2, \ldots, e_n\} \subseteq V$ が以下の性質を満たすとき，基底であるという．

(i) $e_1, e_2, \ldots, e_n$ が V を張る（span する）：$v \in V$ のすべての要素は

$$v = \sum_{i=1}^{n} v_i e_i \quad (v_i \in \mathbb{C}).$$

と書ける．

(ii) $e_1, e_2, \ldots, e_n$ は線形独立 (linearly independent)：

$$\sum_{i=1}^{n} v_i e_i = 0 \implies v_1 = v_2 = \cdots = v_n = 0$$

基底のポイント

ベクトル空間 V の基底とは，V を (ii) 無駄なく (i) 張っているベクトルの集まりである．

注意：(ii) は以下と同値である

$$\sum_{i=1}^{n} v_i e_i = \sum_{i=1}^{n} v_i' e_i \iff v_1 = v_1', v_2 = v_2', \ldots, v_n = v_n',$$

すなわち，基底によってベクトルを $\{e_1, e_2, \ldots, e_n\}$ で表したときの表現は一意である.

1.3 線形作用素(linear operator)

Definition 3. V, W をベクトル空間とする．写像 $A : V \longrightarrow W$ が次の条件を満たすとき，V から W への線形作用素（線形写像）であるという．

(i) （足し算の保存）$A(v + v') = A(v) + A(v') \quad (v, v' \in V)$
(ii) （スカラー倍の保存）$A(cv) = c(Av) \quad (c \in \mathbb{C}, v \in V)$

- 線形作用素についてはカッコを省略して，$A(v)$ を単に Av と書く．

Example 4 (微分作用素).

$$\frac{\partial}{\partial x} : f(x) = ax^2 + bx + c \in P_2 \longmapsto f'(x) = 2ax + b \in P_1$$

「微分は線形だ」ということは習っていると思う．

Example 5 (確率変数の期待値). 標本空間 Ω を（簡単のため）有限集合とすると，確率測度は確率関数 $P(\omega) \geq 0$ $(\omega \in \Omega)$, $\sum_{\omega \in \Omega} P(\omega) = 1$ により定まる．Ω 上の実確率変数 X, Y は関数：

$$X : \omega \in \Omega \longmapsto X(\omega) \in \mathbb{R}, \quad Y : \omega \in \Omega \longmapsto Y(\omega) \in \mathbb{R}$$

であり，実確率変数全体はベクトル空間をなす．実際，（足し算）$(X + Y)(\omega) := X(\omega) + Y(\omega)$，（スカラー倍）$(aX)(\omega) := aX(\omega)$，（ゼロベクトル）恒等ゼロ関数，により確認できる．このとき，期待値操作

$$E : X \longmapsto E[X] = \sum_{\omega \in \Omega} X(\omega) P(\omega) \in \mathbb{R}$$

は $E[X + Y] = E[X] + E[Y]$, $E[cX] = cE[X]$ を満たし線形作用素である．
（量子力学は期待値計算ルールの非可換化であると思える）

1.4　表現行列(representation matrix)：線形作用素は行列と見なせる！

基底 $\{e_1, e_2, \ldots, e_n\} \subseteq V$, $\{f_1, f_2, \ldots, f_m\} \subseteq W$ を固定する.

基底の定義から，V のすべての要素 $v \in V$ は

$$v = \sum_{i=1}^{n} v_i e_i \quad (v_i \in \mathbb{C}) \tag{1}$$

と一通りに表される．同様に，W のすべての要素 $w \in W$ は

$$w = \sum_{j=1}^{m} w_j f_j \quad (w_j \in \mathbb{C}) \tag{2}$$

と一通りに表される．V の基底 $e_1, e_2, \ldots, e_n$ の A による行き先 Ae_i $(i = 1, \ldots, n)$ は W の要素であるから，

$$Ae_i = \sum_{j=1}^{m} A_{ji} f_j \quad (i = 1, \ldots, n) \tag{3}$$

と一通りに表される．ここで，

$w = Av \iff$

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{m} w_j f_j &= A\left(\sum_{i=1}^{n} v_i e_i\right) && \text{(1) (2) より} \\
&= \sum_{i=1}^{n} v_i A e_i && \text{（線形性）} \\
&= \sum_{i=1}^{n} v_i \left(\sum_{j=1}^{m} A_{ji} f_j\right) && \text{(3) より} \\
&= \sum_{j=1}^{m} \left(\sum_{i=1}^{n} A_{ji} v_i\right) f_j && \text{（和の交換）}
\end{aligned}$$

であるから，基底による表現の一意性より，

$$w_j = \sum_{i=1}^{n} A_{ji} v_i \quad (j = 1, 2, \ldots, m)$$

数ベクトルに行列をかける操作と同じである！

1.5　表現行列の導出方法その２（ブロック行列の方法）

(3) を書き直す（最初の等号は定義），赤い部分が表現行列 $\hat{A}$

$$A[e_1, e_2, \dots, e_n] := [Ae_1, Ae_2, \dots, Ae_n] = [f_1, f_2, \dots, f_m] \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{bmatrix} \tag{4}$$

$$\begin{aligned} w = Av \iff [f_1, f_2, \dots, f_m] \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} &= A[e_1, e_2, \dots, e_n] \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \quad \text{(1) (2)の書き直し} \\ &= [f_1, f_2, \dots, f_m] \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \quad \text{(4)より} \end{aligned}$$

よって，基底による表現の一意性から，

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$$

1.6　基底の変換：表現行列は基底を変えると変わる「仮の姿」である

V の基底を $[e_1, e_2, \ldots, e_n]$ から $[e'_1, e'_2, \ldots, e'_n]$，$W$ の基底を $[f_1, f_2, \ldots, f_m]$ から $[f'_1, f'_2, \ldots, f'_m]$ に変更

e'_k $(k = 1, 2, \ldots, n)$ は V の要素であるから，
基底 $[e_1, e_2, \ldots, e_n]$ で書ける

$$e'_k = \sum_{i=1}^{n} S_{ik} e_i \quad (k = 1, 2, \ldots, n)$$

同様に f'_ℓ $(\ell = 1, 2, \ldots, m)$ について，

$$f'_\ell = \sum_{j=1}^{m} T_{j\ell} f_j \quad (\ell = 1, 2, \ldots, m)$$

ブロックで書き直すと，

$$[e'_1, e'_2, \ldots, e'_n] = [e_1, e_2, \ldots, e_n] \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & \ldots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & \ldots & S_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ldots & \vdots \\ S_{n1} & S_{n2} & \ldots & S_{nn} \end{bmatrix}$$

$$[f'_1, f'_2, \ldots, f'_m] = [f_1, f_2, \ldots, f_m] \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & \ldots & T_{1m} \\ T_{21} & T_{22} & \ldots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ldots & \vdots \\ T_{m1} & T_{m2} & \ldots & T_{mm} \end{bmatrix}$$

ここで，表現行列の定義 (4) から，

$$A[e_1, e_2, \ldots, e_n] = [f_1, f_2, \ldots, f_m]\hat{A} \qquad (5)$$

基底を取替えた場合は $\hat{A}'$ が表現行列

$$A[e'_1, e'_2, \ldots, e'_n] = [f'_1, f'_2, \ldots, f'_m]\hat{A}' \qquad (6)$$

基底の変換行列により，

$$A[e_1, e_2, \ldots, e_n]S = [f_1, f_2, \ldots, f_m]T\hat{A}'$$

S^{-1} を右から掛けると，

$$A[e_1, e_2, \ldots, e_n] = [f_1, f_2, \ldots, f_m]T\hat{A}'S^{-1}$$

(5) と比較すると基底による表現の一意性から，

$$\hat{A} = T\hat{A}'S^{-1} \quad \text{（表現行列の変換則）}$$

が得られる．

1.7 内積と Hilbert 空間

Definition 4 (内積, inner product). V をスカラー$\mathbb{C}$上のベクトル空間とする．ベクトル２つに対してスカラーを返す写像

$$(v, w) \in V \times V \longmapsto \langle v, w \rangle \in \mathbb{C}$$

が以下の条件を満たすとき内積であるという．

(i) （右側について線形）$\langle u, c_1 v_1 + c_2 v_2 \rangle = c_1 \langle u, v_1 \rangle + c_2 \langle u, v_2 \rangle$
(ii) （複素共役でひっくり返る）$\overline{\langle u, v \rangle} = \langle v, u \rangle$
(iii) （正定値）$\langle v, v \rangle \geq 0$　（等号成立は $v = \vec{0}$ のときに限る）

注意：(i)(ii) より内積は左側について共役線形である．

$$\langle c_1 u_1 + c_2 u_2, v \rangle = \overline{\langle v, c_1 u_1 + c_2 u_2 \rangle} = \overline{c_1 \langle v, u_1 \rangle + c_2 \langle v, u_2 \rangle} = \overline{c_1} \langle u_1, v \rangle + \overline{c_2} \langle u_2, v \rangle$$

Example 6 ($\mathbb{C}^n$ のエルミート内積). $u = (u_1, u_2, \ldots, u_n) \in \mathbb{C}^n$, $v = (v_1, v_2, \ldots, v_n) \in \mathbb{C}^n$

$$\langle u, v \rangle = \sum_{i=1}^{n} \overline{u}_i v_i$$

Example 7 (内積は１つとは限らず無数にある！). $a_1, a_2, \ldots, a_n > 0$ とすると以下も内積である．

$$\langle u, v \rangle_a = \sum_{i=1}^{n} a_i \overline{u}_i v_i$$

Definition 5 (Hilbert 空間). 内積が一つ固定されて定まっているベクトル空間を Hilbert 空間という（$\mathcal{H}$, $\mathcal{K}$ などのスクリプト体で書く）

1.8 ブラケット記法 (braket notation)

Definition 6 (ブラケット記法の約束)**.**

(i) Hilbert 空間の内積は $\langle u, v\rangle =: \langle u \,|\, v\rangle$ と書く（どちらも同じ意味）

(ii) Hilbert 空間の要素（ベクトル）を $|v\rangle \in \mathcal{H}$ と書く

(iii) Hilbert 空間で定まっている内積と $|u\rangle \in \mathcal{H}$ について，以下で定義される線形汎関数を $\langle u|$ と書く

$$f_u : |v\rangle \in \mathcal{H} \longmapsto \langle u, v\rangle = \langle u \,|\, v\rangle \in \mathbb{C}$$

線形汎関数とは？

1.9 双対ベクトル空間

Definition 7. ベクトル空間 V に対して，スカラーを返す写像

$$f : v \in V \longmapsto f(v) \in \mathbb{C}$$

が線形写像であるときに線形汎関数とよぶ.

線形汎関数全体の集合 V^* はベクトル空間になる！

$$V^* := \{\, f : v \in V \longmapsto f(v) \in \mathbb{C} \mid f \text{ は線形}\,\}$$

- （足し算）$(f+g)(v) := f(v) + g(v)$
- （スカラー倍）$(af)(v) := af(v)$
- （ゼロベクトル）恒等ゼロ関数 $0(v) := 0$

V^* は V の双対ベクトル空間とよばれる.

1.10　数ベクトル空間 $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ におけるブラケット記法

ケットベクトルは複素縦ベクトル，ブラベクトルは共役転置（横ベクトル）

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad |y\rangle = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \quad \longleftrightarrow \quad \langle y| = \begin{pmatrix} \overline{y}_1, & \overline{y}_2, & \ldots & , \overline{y}_n \end{pmatrix}$$

ブラ×ケット＝内積となって，つじつまが合う（本当は内積からブラベクトルが定義されている）

$$\langle y \,|\, x\rangle = \begin{pmatrix} \overline{y}_1, & \overline{y}_2, & \ldots & , \overline{y}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n} \overline{y}_i x_i$$

ケット×ブラも意味をもつ（$\mathcal{H}$ から $\mathcal{H}$ への線形作用素）

$$|x\rangle\langle y| : |z\rangle \in \mathcal{H} \longmapsto |x\rangle \langle y \,|\, z\rangle = \langle y \,|\, z\rangle \, |x\rangle \in \mathcal{H} \tag{7}$$

成分で書くと行列であることが分かり易い？（書くの超大変！(7) の線形性を確認する方が楽じゃない？）

$$|x\rangle\langle y| : \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{y}_1 & \overline{y}_2 & \ldots & \overline{y}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overline{y}_1 x_1 & \overline{y}_1 x_2 & \ldots & \overline{y}_1 x_n \\ \overline{y}_2 x_1 & \overline{y}_2 x_2 & \ldots & \overline{y}_2 x_n \\ \vdots & \vdots & \ldots & \vdots \\ \overline{y}_n x_1 & \overline{y}_n x_2 & \ldots & \overline{y}_n x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}$$

1.11 リースの表現定理

Theorem 1. $\mathcal{H}$ をヒルベルト空間，f を $\mathcal{H}$ 上の線形汎関数であるとする．このとき，f に対応する $|y_f\rangle \in \mathcal{H}$ が唯一存在して，

$$f(x) = \langle y_f \,|\, x\rangle$$

となる（線形汎関数は内積の形で一意に表現される）．$|y_f\rangle$ を線形汎関数 f のリースベクトルとよぶ．

Example 8 (数ベクトル空間における証明)**.** $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$, $\langle x, y\rangle = \sum_{i=1}^n \overline{x_i} y_i$ とする．線形汎関数

$$f : |x\rangle \in \mathcal{H} \longmapsto f(x) \in \mathbb{C} \tag{8}$$

は $|x\rangle$ の成分に関する（同次）一次式でなければならない．なぜなら，

- 二次以上の項があると線形にはならないし，
- ゼロ次の項（定数）があると，ゼロベクトル $\vec{0}$ の行き先 $f(\vec{0})$ がゼロにならない

よって f は次式の形である．

$$f(x) = \sum_{i=1}^n w_i x_i, \quad w_i \in \mathbb{C} \quad (i = 1, 2, \ldots, n)$$

ここで $|y_f\rangle := (\overline{w}_1, \overline{w}_2, \ldots, \overline{w}_n)^t$ とおけば，

$$\langle y_f \,|\, x\rangle = \sum_{i=1}^n w_i x_i = f(x)$$

である．（一般の証明も，基底をとって数ベクトル表現をして，本質的にはこの証明と同じことをする）

1.12　補足

Lemma 1 (任意のベクトルと内積をとってゼロなものはゼロベクトル).

$$\forall x \in \mathcal{H},\ \langle y \,|\, x \rangle = 0 \iff |y\rangle = 0$$

証明. $\Longleftarrow$ は明らかである． $\Longrightarrow$ を示す．左を仮定． x は任意なので $x = y$ ととれば $\langle y \,|\, y \rangle = 0$ となる．内積の正値性より $y = 0$. □

リースベクトルの一意性の証明

$|y_f\rangle$, $|y'_f\rangle$ ともにリースベクトルであるとすると，

$$f(x) = \langle y_f \,|\, x \rangle = \left\langle y'_f \,|\, x \right\rangle \quad (\forall x \in \mathcal{H})$$

これを移項すれば

$$\left\langle y_f - y'_f \,|\, x \right\rangle = 0 \quad (\forall x \in \mathcal{H})$$

上の補題より，$|y_f\rangle - |y'_f\rangle = 0$．すなわち，$|y_f\rangle = |y'_f\rangle$.

Lemma 2. 線形作用素ではゼロベクトルの行き先はゼロベクトルになる.

証明. スカラーを $c = 0$ とし，ベクトル v を任意にとると，線形作用素 A に対して，

$$A(\vec{0}) = A(cv) = cA(v) = \vec{0}$$

（ゼロベクトルを $\vec{0}$ と書いた） □