

2020年6月3日

---

量子情報数理特論  
(第4回) 半正定値作用素, 部分空間, 射影子

---

電気通信大学 大学院情報理工学研究科

小川朋宏

### 3 半正定値作用素, 部分空間, 射影子

---

(課題1) 半正定値作用素

- (1) 半正定値作用素の定義を述べよ
- (2) 半正定値作用素の特徴付け（必要十分条件）を3つ述べよ

(課題2) 部分空間と射影子

- (1) ベクトル空間の部分空間の定義を言葉で述べよ
- (2) 以下は数ベクトル空間  $\mathbb{R}^3$  の部分空間かどうか？簡単な理由とともに答えよ。
  - (a)  $A = \left\{ (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x, y, z \geq 0 \right\}$
  - (b)  $B = \left\{ (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x + y + z = 1 \right\}$
  - (c)  $C = \left\{ (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x + y + z = 0 \right\}$
- (3) 射影子の幾何学的な定義を言葉で述べよ
- (4) 射影子の代数的な定義を述べよ

### 3.1 半正定値作用素の定義

**Definition 1.** Hilbert 空間  $\mathcal{H}$  上の作用素について,

- $A \geq 0$  (半正定値, positive semidefinite) または (非負定値, nonnegative definite)

$$\iff \forall x \in \mathcal{H}, \langle x, Ax \rangle \geq 0$$

- $A > 0$  (正定値, positive definite)

$$\iff \forall x \in \mathcal{H}, \langle x, Ax \rangle > 0$$

**Definition 2** (作用素の順序).

- $A \geq B \iff A - B \geq 0$
- $A > B \iff A - B > 0$

## 3.2 半正定値作用素の特徴付け (その1)

**Lemma 1.** 以下の条件は同値である.

- (i)  $A \geq 0$
- (ii)  $A$ はエルミートかつすべての固有値が非負

(証明) (i)  $\Rightarrow$  (ii) : (i)を仮定すると  $\langle x, Ax \rangle \geq 0$  であり, 特に  $\langle x, Ax \rangle \in \mathbb{R}$  である. これより,

$$\langle x, Ax \rangle = \overline{\langle x, Ax \rangle} = \langle Ax, x \rangle = \langle x, A^*x \rangle$$

であるから次式が成立.

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

以下の Lemma 2 から  $A = A^*$  が導かれ,  $A$ がエルミートであることが示された. エルミート作用素  $A$  の固有値分解により,

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

ここで,  $a_1, \dots, a_n$  は固有値で,  $|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle$  は固有ベクトルからなる正規直交基底である. これ

より,  $i = 1, \dots, n$ について,

$$0 \stackrel{(i)}{\leq} \langle e_i | A | e_i \rangle = \sum_{k=1}^n a_k \langle e_i | e_k \rangle \langle e_k | e_i \rangle = a_i$$

となって(ii)が示された.

(ii)  $\Rightarrow$  (i) : (ii)を仮定すると  $A$ がエルミートであることから固有値分解(1)が得られ, 固有値  $a_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) は非負である. すると, 任意の  $x \in \mathcal{H}$ について

$$\begin{aligned} \langle x, Ax \rangle &= \sum_{k=1}^n a_k \langle x | e_k \rangle \langle e_k | x \rangle \\ &= \sum_{k=1}^n a_k |\langle x | e_k \rangle|^2 \geq 0 \end{aligned}$$

であるから(i)が成立.

### 3.3 よく使う補題

**Lemma 2.** 以下の条件は同値である.

- (i)  $A = 0$
- (ii)  $\forall x, y \in \mathcal{H}, \langle x, Ay \rangle = 0$
- (iii)  $\forall x \in \mathcal{H}, \langle x, Ax \rangle = 0$

(証明) (i)  $\Rightarrow$  (iii) : 明らか. (iii)  $\Rightarrow$  (ii) : 次の補題より, (ii) の形の二次形式は (iii) の形4つで書けることから示される. (ii)  $\Rightarrow$  (i) : 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」(第2回資料) であったから, (ii) より  $\forall y \in \mathcal{H}, Ay = 0$  が示される. これは (i)  $A = 0$  を意味する.

**Lemma 3 (極化公式).** 二次形式 (sesquilinear form) は引数が同じもの4つで書ける

$$\langle y, Ax \rangle = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^4 \overline{i^k} \langle x + i^k y, A(x + i^k y) \rangle \quad (\forall x, y \in \mathcal{H}) \quad (i = \sqrt{-1} \text{ は虚数単位}) \quad (2)$$

(証明)

$$\langle x + y, A(x + y) \rangle = \langle x, Ax \rangle + \langle x, Ay \rangle + \langle y, Ax \rangle + \langle y, Ay \rangle \quad (3)$$

$$\langle x - y, A(x - y) \rangle = \langle x, Ax \rangle - \langle x, Ay \rangle - \langle y, Ax \rangle + \langle y, Ay \rangle \quad (4)$$

(3)–(4) より,

$$\langle x + y, A(x + y) \rangle - \langle x - y, A(x - y) \rangle = 2(\langle x, Ay \rangle + \langle y, Ax \rangle) \quad (5)$$

$y$ に $iy$ を代入すると,

$$\langle x + iy, A(x + iy) \rangle - \langle x - iy, A(x - iy) \rangle = 2i (\langle x, Ay \rangle - \langle y, Ax \rangle) \quad (6)$$

両辺に $-i$ をかけることで,

$$-i \langle x + iy, A(x + iy) \rangle + i \langle x - iy, A(x - iy) \rangle = 2 (\langle x, Ay \rangle - \langle y, Ax \rangle) \quad (7)$$

(5)+(7)より,

$$\langle x + y, A(x + y) \rangle - \langle x - y, A(x - y) \rangle - i \langle x + iy, A(x + iy) \rangle + i \langle x - iy, A(x - iy) \rangle = 4 \langle x, Ay \rangle$$

よって,

$$4 \langle x, Ay \rangle = \overline{i^4} \langle x + y, A(x + y) \rangle + \overline{i^2} \langle x - y, A(x - y) \rangle + \overline{i^1} \langle x + iy, A(x + iy) \rangle + \overline{i^3} \langle x - iy, A(x - iy) \rangle$$

(注意) 極化公式(2)の係数は、内積について、右側引数が線形（ブラケット記法など物理流）と定義する  
と $\overline{i^k}$  ( $k = 1, 2, 3, 4$ )、左側引数が線形（フーリエ変換など数学流）と定義すると $i^k$  ( $k = 1, 2, 3, 4$ )になる。

### 3.4 半正定値作用素の特徴付け (その2)

**Lemma 4.** 以下の条件は同値である.

- (i)  $A \geq 0$
- (ii)  $\exists B \geq 0, A = B^2$
- (iii)  $\exists C, A = C^*C$

(証明) (ii)  $\Rightarrow$  (iii) : 明らか (Lemma 1より  $B$  はエルミートなので,  $A = B^2 = B^*B$  と書ける)

(iii)  $\Rightarrow$  (i) : (iii) を仮定すると,

$$\langle x, Ax \rangle = \langle x, C^*Cx \rangle = \langle Cx, Cx \rangle \geq 0 \quad (\forall x \in \mathcal{H})$$

(i)  $\Rightarrow$  (ii) : (i) を仮定すると, Lemma 1より  $A$  はエルミートなので, 固有値分解をもつ.

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

$A$  の固有値は非負であるから,

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

$$\begin{aligned} B^2 &= \left( \sum_{k=1}^n \sqrt{a_k} |e_k\rangle\langle e_k| \right) \left( \sum_{\ell=1}^n \sqrt{a_\ell} |e_\ell\rangle\langle e_\ell| \right) \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{\ell=1}^n \sqrt{a_k} \sqrt{a_\ell} |e_k\rangle\langle e_k| |e_\ell\rangle\langle e_\ell| \\ &= \sum_{k=1}^n a_k |e_k\rangle\langle e_k| = A \end{aligned}$$

となって (ii) が示された.

(注意)  $B = \sqrt{A}$  と書いて, 作用素  $B$  は作用素  $A$  の平方根であるという.

### 3.5 部分空間

**Definition 3.** ベクトル空間  $V$  の部分集合  $W$  について,

$W$  は  $V$  の部分空間  $\overset{\text{def}}{\iff} V$  の加法, スカラー倍, ゼロベクトルによって  $W$  自身がベクトル部分空間

$$\iff \begin{cases} u, v \in W \implies u + v \in W & \leftarrow \text{(i) 加法で閉じている} \\ c \in \mathbb{C}, u \in W \implies cu \in W & \leftarrow \text{(ii) スカラー倍で閉じている} \end{cases}$$

(注意)

- $V$  でベクトル空間の公理が満たされているため,  
(i) (ii)以外のベクトル空間の公理は  $W$  において自動的に満たされる.
- 特に「 $W$  におけるゼロベクトル」 = 「 $V$  のゼロベクトル」であり,  
(ii) で  $c = 0$  とすることで  $\vec{0} \in W$  となって, ゼロベクトルの存在は自動的に満たされる.
- 部分空間であることを  $W \subseteq V$  と表すことが多い.  
部分集合と同じ記号だが, 違う意味である (注意).

**Definition 4** (直交補空間).  $\mathcal{H}$  を Hilbert 空間,  $\mathcal{K}$  を部分空間とするとき,

$$\mathcal{K}^\perp := \{ y \in \mathcal{H} \mid \forall x \in \mathcal{K}, \langle x | y \rangle = 0 \}$$

### 3.6 基底の延長定理

**Theorem 1** (基底の延長).  $V$  をベクトル空間,  $W \subseteq V$  を部分空間とする.

$e_1, \dots, e_k$  を  $W$  の基底とすると,  $e_{k+1}, \dots, e_n \in V$  を付け加えることで,

$$\underbrace{e_1, e_2, \dots, e_k}_{\text{V の基底}}, \underbrace{e_{k+1}, \dots, e_n}_{\text{V の基底}}$$

と出来る.

**Theorem 2** (正規直交基底の延長).  $\mathcal{H}$  を Hilbert 空間,  $\mathcal{K} \subseteq \mathcal{H}$  を部分空間とする.

$|e_1\rangle, \dots, |e_k\rangle$  を  $\mathcal{K}$  の正規直交基底とすると,  $|e_{k+1}\rangle, \dots, |e_n\rangle \in \mathcal{H}$  を付け加えることで,

$$\underbrace{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_k\rangle}_{\mathcal{H} \text{ の正規直交基底}}, \underbrace{|e_{k+1}\rangle, \dots, |e_n\rangle}_{\mathcal{H} \text{ の正規直交基底}}$$

と出来る.

### 3.7 基底延長のポイント：一次独立性と線形結合

**Lemma 5.**  $V$  の元  $v_1, v_2, \dots, v_k$  が一時独立であるとき,

(a)  $v_{k+1}$  が  $v_1, v_2, \dots, v_k$  の線形結合で表せない  $\implies$  (b)  $v_1, v_2, \dots, v_{k+1}$  は一次独立である.

(証明) 対偶 :  $\neg(b) \implies \neg(a)$  を示す.

(b)  $\iff \forall c_1, c_2, \dots, c_n \in \mathbb{C},$

$$\left( \sum_{i=1}^{k+1} c_i v_i = 0 \implies (c_1, \dots, c_{k+1}) = \vec{0} \right)$$

であるから, 否定 ( $v_1, v_2, \dots, v_{k+1}$  は一次従属)  
は,  $A \Rightarrow B \equiv \neg A \vee B$  に注意すると,

$\neg(b) \iff \exists c_1, c_2, \dots, c_n \in \mathbb{C},$

$$\left( \sum_{i=1}^{k+1} c_i v_i = 0 \text{かつ } (c_1, \dots, c_{k+1}) \neq \vec{0} \right)$$

である. さらに,  $c_{k+1} \neq 0$  でなければならぬ.

なぜなら,  $c_{k+1} = 0$  とすると,  $c_1, \dots, c_n$  のいずれかがゼロでなく

$$\sum_{i=1}^k c_i v_i = 0 \quad \text{かつ} \quad (c_1, \dots, c_k) \neq \vec{0}$$

が導かれ,  $v_1, v_2, \dots, v_k$  が一次独立であることに  
反するからである. したがって,

$$v_{k+1} = - \sum_{i=1}^k \frac{c_i}{c_{k+1}} v_i$$

となって (a) の否定が導かれた.

### 3.8 基底の延長定理の証明

---

(基底の延長 : 証明)

$$W = \text{span}\{e_1, \dots, e_k\} := \left\{ \sum_{i=1}^k c_i e_i \mid c_1, \dots, c_k \in \mathbb{C} \right\} \subseteq V$$

が真部分集合ならば,  $e_{k+1} \in V$  で  $e_{k+1} \notin \text{span}\{e_1, \dots, e_k\}$  となるベクトルが存在する. よって Lemma 5 より  $\{e_1, \dots, e_k, e_{k+1}\}$  は一時独立である. 同様に

$$\text{span}\{e_1, \dots, e_k, e_{k+1}\} \subseteq V$$

が真部分集合ならば,  $e_{k+2} \in V$  で  $e_{k+2} \notin \text{span}\{e_1, \dots, e_k, e_{k+1}\}$  となるベクトルが存在し,  $\{e_1, \dots, e_k, e_{k+1}, e_{k+2}\}$  は一次独立(★)である. この操作を続けることで

$$\text{span}\{e_1, \dots, e_k, e_{k+1}, \dots, e_n\} = V$$

かつ一次独立なベクトル  $\{e_1, \dots, e_k, e_{k+1}, \dots, e_n\}$ , すなわち  $V$  の基底が作られる (有限次元では余次元に関する帰納法, 無限次元ではツォルンの補題を用いる).

(正規直交基底の延長 : 証明)

(★)の部分でグラム・シュミットの直交化により, 帰納的に直交化していくべき.

### 3.9 直交直和分解と射影子 (projection)

**Lemma 6.**  $\mathcal{H}$  を Hilbert 空間,  $\mathcal{K} \subseteq \mathcal{H}$  を部分空間とする.  $\forall |x\rangle \in \mathcal{H}$  について,

$$|x\rangle = |y\rangle + |z\rangle \quad (|y\rangle \in \mathcal{K}, |z\rangle \in \mathcal{K}^\perp)$$

となる分解が一意に定まる. これを直交直和分解とよぶ.

(証明)  $\mathcal{K}$  の正規直交基底を  $|e_1\rangle, \dots, |e_k\rangle$  とする  
と, 基底の延長定理により,

$$|e_1\rangle, \dots, |e_k\rangle, |e_{k+1}\rangle, \dots, |e_n\rangle$$

を  $\mathcal{H}$  の正規直交基底とすることが出来る. このとき,  $|e_{k+1}\rangle, \dots, |e_n\rangle$  は  $\mathcal{K}^\perp$  の正規直交基底である. 基底による展開

$$|x\rangle = \sum_{i=1}^n x_i |e_i\rangle = \sum_{i=1}^k x_i |e_i\rangle + \sum_{i=k+1}^n x_i |e_i\rangle$$

は一意であるから,

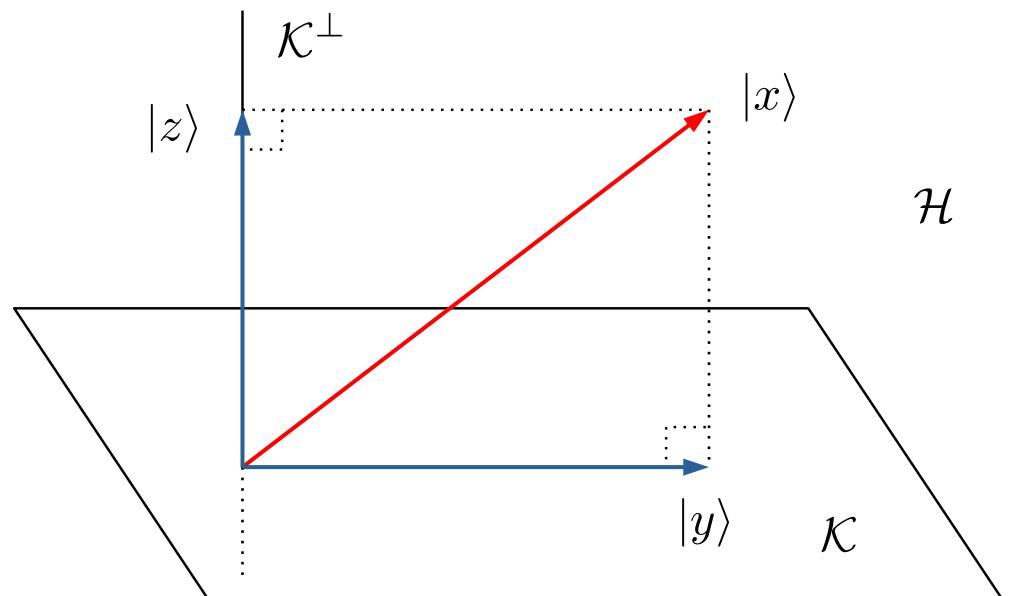
$$|y\rangle = \sum_{i=1}^k x_i |e_i\rangle \in \mathcal{K}, \quad |z\rangle = \sum_{i=k+1}^n x_i |e_i\rangle \in \mathcal{K}^\perp$$

とおけばよい.

**Definition 5.** 各  $|x\rangle \in \mathcal{H}$  について直交直和分解の  $\mathcal{K}$  成分を与える写像

$$P : |x\rangle = |y\rangle + |z\rangle \in \mathcal{H} \mapsto |y\rangle \in \mathcal{K} \subseteq \mathcal{H}$$

が定義され, 線形写像であることが確かめられる.  $P$  を部分空間  $\mathcal{K}$  への射影子 (projection) という ( $P_{\mathcal{K}}$  とも書く).



### 3.10 射影子の性質

**Lemma 7.**  $\mathcal{H}$  を Hilbert 空間,  $\mathcal{K} \subseteq \mathcal{H}$  を部分空間,  $P_{\mathcal{K}}$  を部分空間  $\mathcal{K}$  への射影子とする.

- (i)  $|y\rangle \in \mathcal{K}$  のとき,  $P_{\mathcal{K}}|y\rangle = |y\rangle$
- (ii)  $|z\rangle \in \mathcal{K}^\perp$  のとき,  $P_{\mathcal{K}}|z\rangle = 0$
- (iii)  $P_{\mathcal{K}} + P_{\mathcal{K}^\perp} = I$
- (iv)  $P_{\mathcal{K}}P_{\mathcal{K}^\perp} = 0$

(証明)

- (i)  $|y\rangle$  の直交直和分解は  $|y\rangle = |y\rangle + 0$  だから.
- (ii)  $|z\rangle$  の直交直和分解は  $|z\rangle = 0 + |z\rangle$  だから.
- (iii) 任意の  $|x\rangle$  について直交直和分解を  $|x\rangle = |y\rangle + |z\rangle$  とすると,

$$P_{\mathcal{K}}|x\rangle = |y\rangle, \quad P_{\mathcal{K}^\perp}|x\rangle = |z\rangle$$

であるから,

$$(P_{\mathcal{K}} + P_{\mathcal{K}^\perp})|x\rangle = P_{\mathcal{K}}|x\rangle + P_{\mathcal{K}^\perp}|x\rangle = |y\rangle + |z\rangle = |x\rangle = I|x\rangle$$

これは  $P_{\mathcal{K}} + P_{\mathcal{K}^\perp} = I$  を意味する.

- (iv) 任意の  $|x\rangle \in \mathcal{H}$  について  $P_{\mathcal{K}^\perp}|x\rangle \in \mathcal{K}^\perp$  だから, (ii) より

$$P_{\mathcal{K}}P_{\mathcal{K}^\perp}|x\rangle = 0$$

これは  $P_{\mathcal{K}}P_{\mathcal{K}^\perp} = 0$  を意味する.

### 3.11 射影子の特徴付け

**Lemma 8.**  $\mathcal{H}$  上の作用素  $P$  について以下は同値.

- (i)  $P$  はある部分空間への射影子
- (ii)  $P \geq 0, P^2 = P$
- (iii)  $P^* = P, P^2 = P$  ( $\leftarrow$ 代数的特徴付け)

(証明) (i)  $\Rightarrow$  (ii) :  $P$  はある部分空間  $\mathcal{K}$  への射影子であると仮定する. このとき

$$|x\rangle = |y\rangle + |z\rangle \quad (|y\rangle \in \mathcal{K}, |z\rangle \in \mathcal{K}^\perp)$$

とすると,  $P|x\rangle = |y\rangle$  であるから,

$$\langle x | Px \rangle = \langle y + z | P(y + z) \rangle = \langle y + z | y \rangle = \langle y | y \rangle + \langle z | y \rangle = \langle y | y \rangle \geq 0$$

よって  $P \geq 0$  である. さらに, 任意の  $|x\rangle \in \mathcal{H}$  について,

$$P^2|x\rangle = P \cdot P|x\rangle = P|y\rangle = |y\rangle = P|x\rangle$$

となって作用が等しいので  $P^2 = P$  である.

(ii)  $\Rightarrow$  (iii) :  $P \geq 0$  ならば  $P$  はエルミートであることより明らか.

(iii)  $\Rightarrow$  (i) :

$$\mathcal{K} := \text{Im } P = \{P|x\rangle \mid |x\rangle \in \mathcal{H}\}$$

とおくと,  $\mathcal{K}$ は $\mathcal{H}$ の部分空間である. 式変形により

$$|x\rangle = P|x\rangle + (I - P)|x\rangle$$

であり,  $P|x\rangle \in \mathcal{K}$ は $\mathcal{K}$ の定義より明らかである. よって,  $(I - P)|x\rangle \in \mathcal{K}^\perp$ を示せばよい (上式が直交直和分解であり,  $P$ が $\mathcal{K}$ への射影子であることが分かる). 任意の $|y\rangle \in \mathcal{K}$ について,  $\mathcal{K}$ の定義から $|y\rangle = P|x'\rangle$ となる $|x'\rangle \in \mathcal{H}$ が存在する. よって,

$$\langle y | (I - P)x \rangle = \langle Px' | (I - P)x \rangle = \langle x' | P^*(I - P)x \rangle \stackrel{(a)}{=} \langle x', (P - P^2)x \rangle \stackrel{(b)}{=} 0$$

すなわち,  $(I - P)|x\rangle \in \mathcal{K}^\perp$ . ここで, (a)  $P^* = P$ , (b)  $P^2 = P$ を用いた.

- Lemma 8 (iii)  $P^* = P$ ,  $P^2 = P$ は射影子の代数的な特徴付けになっていて, (iii)を射影子の定義としてもよい.
- Hilbert空間の部分空間と射影子は1対1対応している.
  - 部分空間 $\mathcal{K} \subseteq \mathcal{H}$ への直交射影として, (iii)を満たす作用素 $P$ が作れる
  - 逆に, (iii)を満たす作用素 $P$ に対して, 部分空間 $\mathcal{K} = \text{Im } P$ が作れる (上記証明)

$\mathcal{H}$ の部分空間の集合		射影子の集合
$\Downarrow$		$\Downarrow$
$\mathcal{K}$	$\xleftarrow{\text{1対1}}$	$P$

### 3.12 射影子の具体形

**Lemma 9.**  $\mathcal{H}$ をHilbert空間,  $\mathcal{K} \subseteq \mathcal{H}$ を部分空間とする.  $|e_1\rangle, \dots, |e_k\rangle$ を $\mathcal{K}$ の正規直交基底,  $|e_{k+1}\rangle, \dots, |e_n\rangle$ を $\mathcal{K}^\perp$ の正規直交基底として,

$$|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_k\rangle, |e_{k+1}\rangle, \dots, |e_n\rangle$$

を $\mathcal{H}$ の正規直交基底とする. このとき $\mathcal{K}$ への射影子は次式で与えられる.

$$P = \sum_{i=1}^k |e_i\rangle\langle e_i|$$

(この正規直交基底で対角化すると, 対角の1~ $k$ 番目まで1が並んで,  $k+1$ 番目以降ゼロ)

(証明) 基底による展開

$$|x\rangle = \sum_{i=1}^n x_i |e_i\rangle = \sum_{i=1}^k x_i |e_i\rangle + \sum_{i=k+1}^n x_i |e_i\rangle$$

において

$$P|x\rangle = \sum_{i=1}^k x_i |e_i\rangle$$

となることから明らか.

### 3.13 補足：直交直和分解（11ページ, Lemma 6）一意性の証明

**Lemma 6.**  $\mathcal{H}$  を Hilbert 空間,  $\mathcal{K} \subseteq \mathcal{H}$  を部分空間とする.  $\forall |x\rangle \in \mathcal{H}$  について,

$$|x\rangle = |y\rangle + |z\rangle \quad (|y\rangle \in \mathcal{K}, |z\rangle \in \mathcal{K}^\perp)$$

となる分解が一意に定まる. これを直交直和分解とよぶ.

(一意性の証明) 二通りに分解できたとする.

$$|x\rangle = |y\rangle + |z\rangle = |y'\rangle + |z'\rangle \quad (|y\rangle, |y'\rangle \in \mathcal{K}, |z\rangle, |z'\rangle \in \mathcal{K}^\perp)$$

これを移項すると

$$|y\rangle - |y'\rangle = |z'\rangle - |z\rangle \in \mathcal{K} \cap \mathcal{K}^\perp \tag{8}$$

$\mathcal{K} \cap \mathcal{K}^\perp = \{0\}$  であることを示す. 任意の  $|v\rangle \in \mathcal{K} \cap \mathcal{K}^\perp$  について,  $|v\rangle \in \mathcal{K}$ かつ $|v\rangle \in \mathcal{K}^\perp$  であるから  $\langle v | v \rangle = 0$  である. すなわち,  $\mathcal{K} \cap \mathcal{K}^\perp = \{0\}$  が示された. よって, (8)より,

$$|y\rangle - |y'\rangle = |z'\rangle - |z\rangle = 0$$

となって,  $|y\rangle = |y'\rangle$ ,  $|z\rangle = |z'\rangle$