

2021 年 4 月 14 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.

- 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ない？
- 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：

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

けど、並べ直すの面倒だよ...

- 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 “+”**: $(u, v) \in V \times V \mapsto u + v \in V$,
- **スカラー倍 “·”**: $(a, v) \in \mathbb{K} \times V \mapsto a \cdot v \in V$

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.

$$\mathbb{C}^n = \left\{ \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \mid v_1, \dots, v_n \in \mathbb{C} \right\}$$

Example 2 (n 次多項式の集合).

$$P_n = \left\{ f : x \in \mathbb{R} \mapsto a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n \in \mathbb{R} \mid a_0, a_1, a_2, \dots, a_n \in \mathbb{R} \right\}$$

- (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).

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

- (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 $\{e_1, e_2, \dots, e_n\} \subseteq V$ が以下の性質を満たすとき, **基底**であるという.

(i) $e_1, e_2, \dots, e_n$ 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) $e_1, e_2, \dots, e_n$ は線形独立 (linearly independent) :

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

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

$$(ii)' \quad \sum_{i=1}^n v_i e_i = \sum_{i=1}^n v'_i e_i \iff v_1 = v'_1, v_2 = v'_2, \dots, v_n = v'_n,$$

すなわち, 基底によってベクトルを $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ 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 $\{e_1, e_2, \dots, e_n\} \subseteq V$, $\{f_1, f_2, \dots, f_m\} \subseteq W$ を固定する.

基底の定義から, V のすべての要素 $v \in V$ は

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

と一通りに表される. 同様に, W のすべての要素 $w \in W$ は

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

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

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

と一通りに表される. ここで,

$$w = Av \iff$$

$$\sum_{j=1}^m w_j f_j = A \left(\sum_{i=1}^n v_i e_i \right) \quad (1) (2) \text{より}$$

$$= \sum_{i=1}^n v_i Ae_i \quad (\text{線形性})$$

$$= \sum_{i=1}^n v_i \left(\sum_{j=1}^m A_{ji} f_j \right) \quad (3) \text{より}$$

$$= \sum_{j=1}^m \left(\sum_{i=1}^n A_{ji} v_i \right) f_j \quad (\text{和の交換})$$

であるから, 基底による表現の一意性より,

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

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 $\hat{A}$**

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

$$w = Av \iff [f_1, f_2, \dots, f_m] \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} = A[e_1, e_2, \dots, e_n] \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \quad (1) (2) \text{ の書き直し}$$

$$= [f_1, f_2, \dots, f_m] \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \quad (4) \text{ より}$$

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

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

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

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

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

ブロックで書き直すと、

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

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

ここで、表現行列の定義(4)から、

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

基底を取替えた場合は $\hat{A}'$ が表現行列

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

基底の変換行列により、

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

S^{-1} を右から掛けると、

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

(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). $u = (u_1, u_2, \dots, u_n) \in \mathbb{C}^n$, $v = (v_1, v_2, \dots, v_n) \in \mathbb{C}^n$

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

Example 7 (内積は 1 つとは限らず無数にある!). $a_1, a_2, \dots, a_n > 0$ 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

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

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

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

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!

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

- (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）

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad |y\rangle = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \longleftrightarrow \langle y| = (\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n)$$

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）

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

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

$$|x\rangle\langle y| : |z\rangle \in \mathcal{H} \longmapsto |x\rangle\langle y|z\rangle = \langle y|z\rangle |x\rangle \in \mathcal{H} \quad (7)$$

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？）

$$|x\rangle\langle y| : \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} (\bar{y}_1 \quad \bar{y}_2 \quad \dots \quad \bar{y}_n) \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{y}_1 x_1 & \bar{y}_1 x_2 & \dots & \bar{y}_1 x_n \\ \bar{y}_2 x_1 & \bar{y}_2 x_2 & \dots & \bar{y}_2 x_n \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \bar{y}_n x_1 & \bar{y}_n x_2 & \dots & \bar{y}_n x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}$$

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

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

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.

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

ここで $|y_f\rangle := (\overline{w_1}, \overline{w_2}, \dots, \overline{w_n})^t$ 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のはゼロベクトル).

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

証明. $\Leftarrow$ は明らかである. $\Rightarrow$ 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. 内積の正值性より $|y\rangle = 0$. □

リースベクトルの一意性の証明

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

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

これを移項すれば

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

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)

□