

2021年4月28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) $A = \{ (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x, y, z \geq 0 \}$
 - (b) $B = \{ (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x + y + z = 1 \}$
 - (c) $C = \{ (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x + y + z = 0 \}$
- (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)

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

- $A > 0$ (正定値, positive definite)

$$\stackrel{\text{def}}{\iff} \forall x \in \mathcal{H} (x \neq 0), \langle x, Ax \rangle > 0$$

Definition 2 (作用素の順序).

- $A \geq B \stackrel{\text{def}}{\iff} A - B \geq 0$
- $A > B \stackrel{\text{def}}{\iff} A - B > 0$

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,

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

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

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

(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,

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

とおくと $B \geq 0$ で,

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

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 $\stackrel{\text{def}}{\iff} V$ 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,

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

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,

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

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,

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

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) $\iff \forall c_1, c_2, \dots, c_{k+1} \in \mathbb{C},$

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

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

$\neg(b) \iff \exists c_1, c_2, \dots, c_{k+1} \in \mathbb{C},$

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

である. さらに, $c_{k+1} \neq 0$ でなければならない.

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

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

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けばよい.

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. ただし, $|e_{k+1}\rangle, \dots, |e_n\rangle$ は \mathcal{K}^\perp の正規直交基底である. 基底による展開

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

を考え,

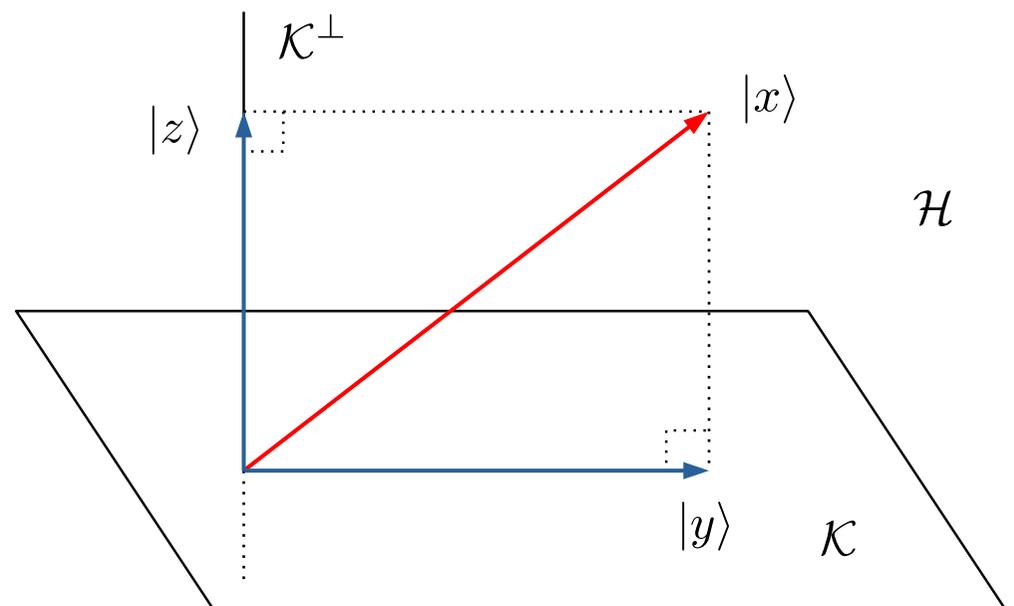
$$|y\rangle = \sum_{i=1}^k x_i |e_i\rangle \in \mathcal{K}, \quad |z\rangle = \sum_{i=k+1}^n x_i |e_i\rangle \in \mathcal{K}^\perp$$

とおけばよい (一意性は16ページに補足).

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) $P^* = P, P^2 = P$ (←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

\cup

\mathcal{K}

射影子の集合

\cup

P

$\xleftrightarrow{1\text{対}1}$

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 $1 \sim k$ 番目まで 1 が並んで, $k+1$ 番目以降ゼロ)

(証明) \mathcal{K} への射影子は, 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, 第1項を取り出す作用素である. 一方,

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

となることから, P が \mathcal{K} への射影子である.

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， $|y\rangle = |y'\rangle$ ， $|z\rangle = |z'\rangle$