ケット |k> で理解する量子の世界

はじめに

- 今回のセミナーは、直接には、量子論の基本的なツールであるDirac の「ケット記法」について学ぶことを目的にしている。参考資料の「Ketのレシピ」に、「ケット記法」の基本的な応用例をピックアップしておいたので、是非、目を通しておいてもらえればと思う。
- 例えば、図1は、行列と列ベクトル、行ベクトルと列ベクトルの積の定義から、<i|M|j>が、行列Mの i行j列の成分を表すことを示そうとしたものだが、図2は、同じことをケット記法を使って証明したものだ。
- この例が示すように、「ケット記法」は、量子論で必要な「計算」を、簡潔に見通し良く実行する上で極めて有用なツールである。

<i|M|j> = <i|(M|j>) = m_{ij} の証明

M|j>

$$
M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1j} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2j} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & & & & \\ m_{i1} & m_{i2} & \cdots & \boldsymbol{m_{ij}} & \cdots & m_{in} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{nj} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix}
$$

j 番目

$$
|j\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}
$$

M|j> は、行列 M の j 列目の n(列) ベクトルである

$$
\mathbf{M|j\rangle} = \begin{pmatrix} m_{1j} \\ m_{2j} \\ \vdots \\ \boldsymbol{m_{ij}} \\ \vdots \\ m_{nj} \end{pmatrix}
$$

$$
\langle i| = \underbrace{(0 \quad 0 \quad \cdots \quad 1}_{\text{i 番目}} \quad \cdots \quad 0 \quad 0)
$$

<i|M|j>は、ベクトルM|j>のi番目の成分である。

i 番目

$$
\mathbf{M|j\rangle} = \begin{pmatrix} m_{1j} \\ m_{2j} \\ \vdots \\ \boxed{\boldsymbol{m_{ij}}} \\ \vdots \\ m_{nj} \end{pmatrix}
$$

$$
\boxed{\langle i|M|j\rangle = m_{ij}}
$$

別解

$$M = \sum_{i,j} m_{ij} |i >< j|$$

$$< k|M|l > = < k| \sum_{i,j} m_{ij} |i >< j||l >$$

$$= \sum_{i,j} m_{ij} < k|i >< j|l >$$

$$= m_{kl}$$

$$< k|M|l > = m_{kl}$$

はじめに

- 「ケット記法」で重要なことは、それが単なる「数学的」に便利なツールであるだけではなく、それが、同時に、量子の世界の「物理的」特徴を明確に捉えるツールでもあるということである。だから、「ケット記法」を学ぶ上では、それらの物理的背景を知る必要がある。今回の資料が量子論入門の形になっているのはそのせいである。

- ここでは、今回の資料の構成を、簡単に説明しておきたい。

はじめに

- 今回のセミナーでは、まず、最初に、量子の世界の基本原理と言われるものを簡単に復習する。
- ただ、この基本原理自身が、きわめて不思議なものだ。量子の状態は複素数を成分とするベクトルで表現され、その状態は、複素成分のユニタリ行列を作用させると、次の状態に移るという。この計算は、きちんと定義された行列とベクトルの積である。
- ただ、もう一つの「観測の原理」は、奇妙なことに、我々は観測によっては、量子の状態を構成するベクトルの成分の値を知り得ないと主張する。

はじめに

- セミナーでは、第二に、閉じた純粋な量子の世界を考える。そこは、「観測の原理」が必要とされない世界である。
- ここでは、内積の定義された複素ベクトル空間上で、状態（ベクトル）に演算子（行列）が作用するという形で量子の世界が記述される。
- ここでは、「観測の原理」では我々は知り得ないとされる量子の状態を表すベクトルの成分の値も、行列の成分の値も、我々にはアクセス可能で計算可能である。
- この世界は、不思議なところのない、確率も登場しない、いわば「決定論」的な世界である。

はじめに

- セミナーでは、第三に、「観測」の問題を取り上げる。「観測」は前節でみた数学的計算とは異なる物理的過程である。
- ただ、その数学的モデルはすぐに見つかる。「射影演算子」は、重ね合わせを解体し、重ね合わせの中から一つの項のみを取り出すものだ。
- ただ、それはユニタリな演算子ではない。「観測の原理」は、ユニタリ演算子の作用のみで量子の状態が変わるという閉じた量子の世界の「原理」とは、明らかに異なる「原理」なのだ。
- もう一つ問題がある。「観測」される量は、複素数ではなく実数でなければならないという問題だ。
- この問題は、観測の演算子に、固有値が実数であるというエルミート性を仮定することで回避できる。

はじめに

- セミナーでは、第四に、密度行列の概念を紹介する。
- ミクロな量子の世界とマクロで古典的な世界は大きく異なっているのだが、確率的なアプローチにおいては共通の構造を持つ。そのことが、密度行列ではうまく表現できるのだ。
- それだけではない。これまで、量子の状態をベクトルで表示するアプローチで「量子論の原理」を説明してきたのだが、量子の状態を密度行列で表示するアプローチでも、「量子論の原理」を定式化できるのだ。
- 残念ながら、今回は、こうした密度行列的なアプローチは、ほんの紹介にとどまっている。

はじめに

- 本セミナーを、量子コンピュータ技術の次のマイルストーンと考えられている「量子エラー訂正技術」入門へ向かう準備的なステップと、位置付けているのだが、そこでは密度行列とそのTraceの意味の理解は重要なものになる。
- おそらく、きちんとした「量子エラー訂正技術」入門の一つ手前に、「量子ゲートとエンタングルメントで理解する量子の世界」というようなステップが必要になると、今は、考えている。

Agenda
「ケット |k> で理解する量子の世界」

- □ 第一話: 量子の世界の「原理」を簡単に振り返る
- □ 第二話: 閉じた純粋な量子の世界を記述する
- □ 第三話: 「観測の原理」を記述する
- □ 第四話: 密度行列とTraceで「観測」を考える
- □ Appendix

第一話:

量子の世界の「原理」を簡単に振り返る

要約

- ここでは、まず、最初に、量子の世界の基本原理と言われるものを簡単に復習する。
- ただ、この基本原理自身が、きわめて不思議なものだ。量子の状態は複素数を成分とするベクトルで表現され、その状態は、複素成分のユニタリ行列を作用させると、次の状態に移るという。この計算は、きちんと定義された行列とベクトルの積である。
- ただ、もう一つの「観測の原理」は、奇妙なことに、我々は観測によっては、量子の状態を構成するベクトルの成分の値を知り得ないと主張する。

Agenda
第一話：量子の世界の「原理」を簡単に振り返る

- 量子の状態をケット|k>で表現する -- |ket>と<bra|
- 量子論の原理を|ket>で表現する
  量子論の三つの原理 -- qubitの場合
- 量子論の三つの原理 -- 一般的な表現

量子の状態をケット|k>で表現する

列ベクトルをketで表す　|Ket>

- 列ベクトルを、|ID> で表す。ここで、IDは列ベクトルの名前で、任意の文字列を用いることができる。

例

- |A> $= \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$; |B> $= \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ -i \end{pmatrix}$; |Ψ> $= \begin{pmatrix} 1 - i\sqrt{2} \\ 2i \end{pmatrix}$
- |4次元> $= \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}$; |maru> $= \begin{pmatrix} 2 + 3i \\ 1 - 2i \\ 1 \end{pmatrix}$;
- |0> $= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$; |1> $= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$; |+> $= \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$; |−> $= \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ -\sqrt{2} \end{pmatrix}$;

行ベクトルを braで表す <Bra|

- 列ベクトル |ID> に対して、同じIDを持つ行ベクトル <ID|を次のルールで対応させる。すなわち、行ベクトルを列ベクトルに変えて、各要素の複素共役をとる。

- 例えば、

$$|A> = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix} \text{ なら、} <A| = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \alpha_2^* & \alpha_3^* & \alpha_4^* & \alpha_5^* \end{pmatrix}$$

Ket と Bra の対応関係

- □ $|A> = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \Longleftrightarrow <A| = (1\ 2)$

- □ $|B> = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ -i \end{pmatrix} \Longleftrightarrow <B| = (3\ \ 0\ \ \mathrm{i})$

- □ $|\Psi> = \begin{pmatrix} 1 - i\sqrt{2} \\ 2i \end{pmatrix} \Longleftrightarrow <\Psi| = (1+\mathrm{i}\sqrt{2}\ \ -2\mathrm{i})$

- □ $|maru> = \begin{pmatrix} 2+3i \\ 1-2i \\ 1 \end{pmatrix} \Longleftrightarrow <maru| = (2-3\mathrm{i}\ \ 1+2\mathrm{i}\ \ 1)$

- □ $|0> = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Longleftrightarrow <0| = (1\ 0)$

- □ $|1> = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Longleftrightarrow <1| = (0\ 1)$

Ketベクトルの満たす性質

- 二つのketベクトルの和は、ketベクトルである。
  |A> + |B> = |C>
- ketベクトルの和は、可換である。
  |A> + |B> = |B> + |A>
- ketベクトルの和は、結合律を満たす。
  (|A> + |B>) + |C> = |A> + (|B> + |C>)
- 次のような 0 ベクトル、-|A> ketベクトルが存在する。
  |A> + 0 = |A>
  |A> + (-|A>) = 0
- 任意の複素数 z, wに対して、
  z|A> = |zA> = |B>
  z(|A> + |B>) = z|A> + z|B>
  (z + w)|A> = z|A> + w|A>

x,y,z…等を含む式の計算と同じように、ketを変数記号とみて、普通に計算すればいいということである。

Braベクトルの満たす性質

- 二つのbraベクトルの和は、braベクトルである。
  $<A| + <B| = <C|$
- braベクトルの和は、可換である。
  $<A| + <B| = <B| + <A|$
- braベクトルの和は、結合律を満たす。
  $(<A| + <B|) + <C| = <A| + (<B| + <C|)$
- 次のような 0 ベクトル、-|A> braベクトルが存在する。
  $<A| + 0 = <A|$
  $<A| + (-<A|) = 0$
- 任意の複素数 z, wに対して、
  $z<A| = <zA| = <B|$
  $z(<A| + <B|) = z<A| + z<B|$
  $(z + w)<A| = z<A| + w<A|$

x,y,z...等を含む式の計算と同じように、ketを変数記号とみて、普通に計算すればいいということである。

Ket と Bra の関係

- $|C\rangle = |A\rangle + |B\rangle \Longleftrightarrow \langle C| = \langle A| + \langle B|$
- $|C\rangle = z|A\rangle \Longleftrightarrow \langle C| = \langle A|z^* = z^*\langle A|$
- $|C\rangle = a|A\rangle + b|B\rangle \Longleftrightarrow \langle C| = \langle A|a^* + \langle B|b^*$
  $= a^*\langle A| + b^*\langle B|$
- $\langle C| = a\langle A| + b\langle B| \Longleftrightarrow |C\rangle = |A\rangle a^* + |B\rangle b^*$
  $= a^*|A\rangle + b^*|B\rangle$

量子論の原理を|ket>で表現する

qubitの場合

量子論の三つの原理
qubitの場合

ここでは、量子論理解の基礎となる三つの原理を述べる。
まずは、qubitについて。

1. 重ね合わせの原理
2. ユニタリー発展の原理
3. 観測の原理

重ね合わせの原理

qubitの場合

重ね合わせ

qubitは、二つの数字（ベクトル）で表される

$$\text{qubitの状態} = \begin{pmatrix}\alpha \\ \beta\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\alpha \\ 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0 \\ \beta\end{pmatrix}$$

$$= \alpha \begin{pmatrix}1 \\ 0\end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix}0 \\ 1\end{pmatrix}$$

ベクトル空間の「基底」

重ね合わせ

qubitは、二つの状態（ベクトル）の和として表される

$$\text{qubitの状態} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix}$$

$$= \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ベクトル空間の「基底」

ここで、$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ を |0>, $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ を |1> で表すと

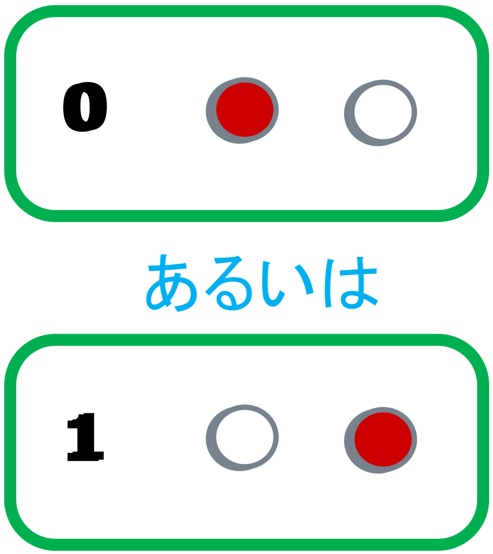
qubitの状態 ＝ α|0> +β|1>

ただし、 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

と表現できる。

古典Bit

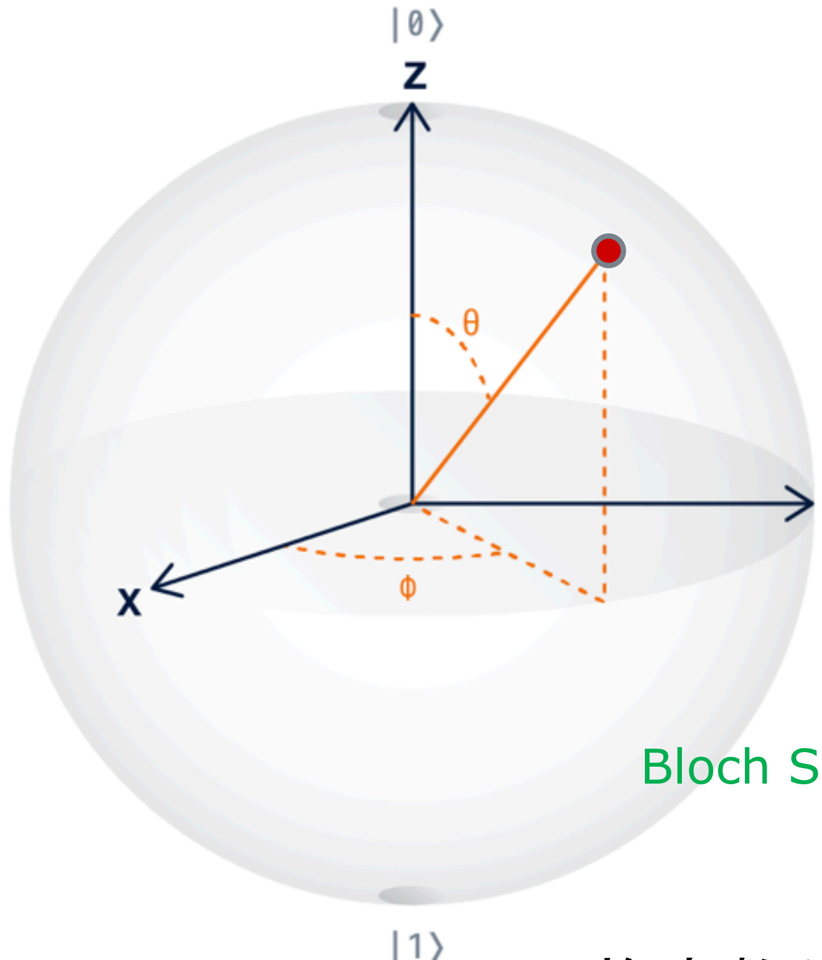
0か1



Bitは、0または1
どちらかの状態を取る

bitは、整数値を取り、離散的

量子bit = Qubit



Bloch Sphere

qubitは、二つの複素数からなり、連続的

qubitを決める複素数c_0,c_1は、それぞれ2つの実数からなるが、$|c_0|^2+|c_1|^2=1$という条件があるので、自由度は一つ減る。あと、Global Phaseを無視すると、自由度はまた一つ減る。

ユニタリ発展の原理

qubitの状態の変化

あるqubitの状態は、他の状態に変化することができる。
その変化は、「ユニタリ変換」という、ルールに従う。

qubitの状態ベクトル $|A\rangle$は、このユニタリ変換Uによって、他の状態 $|B\rangle$ に変換される。

$$\boxed{U\,|A\rangle = |B\rangle}$$

ユニタリ変換の例 X, Z, Hとqubitの変化

$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ なので、

$$X\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$$

$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ なので、

$$Z\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}$$

$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ なので、

$$H\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} a+b \\ a-b \end{pmatrix}$$

ユニタリ変換の例 X, Z, Hとqubitの変化

$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ なので、

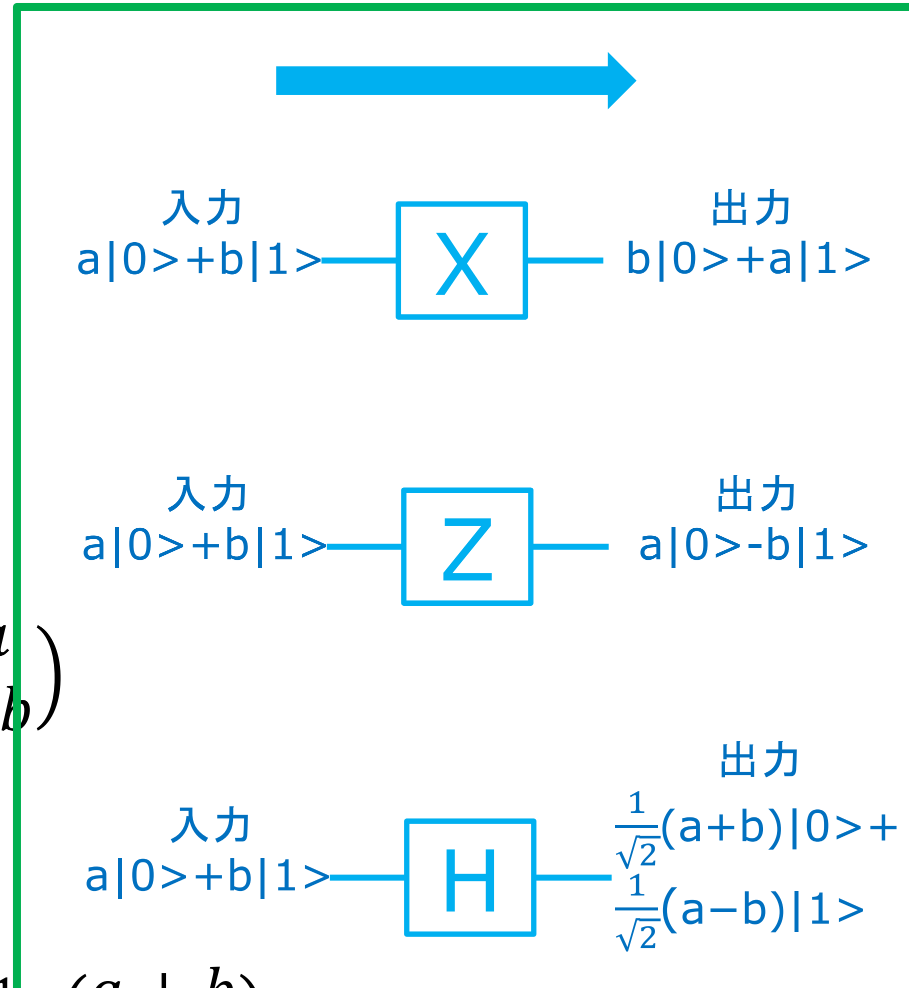
$$X\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$$

$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ なので、

$$Z\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}$$

$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ なので、

$$H\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} a + b \\ a - b \end{pmatrix}$$



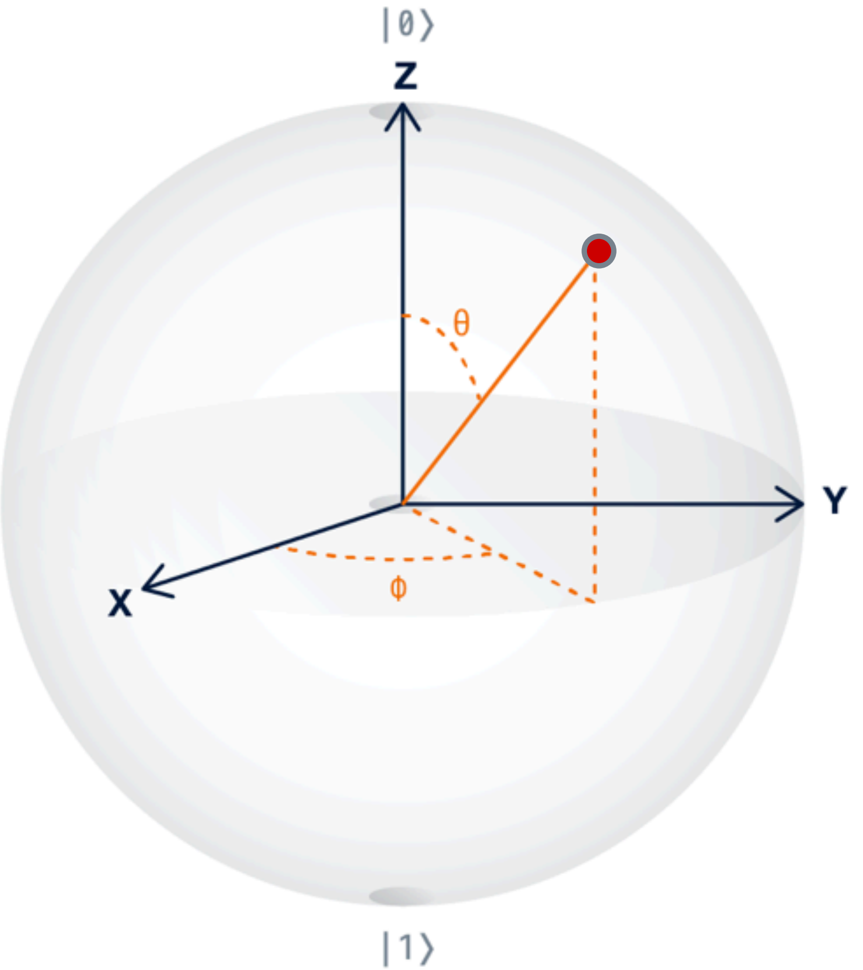
観測の原理

qubitの場合

Qubitの状態は、
二つの数字で表される。

Qubitの状態は、
状態 |0>と状態 |1>の
重ね合わせの状態を
取っている

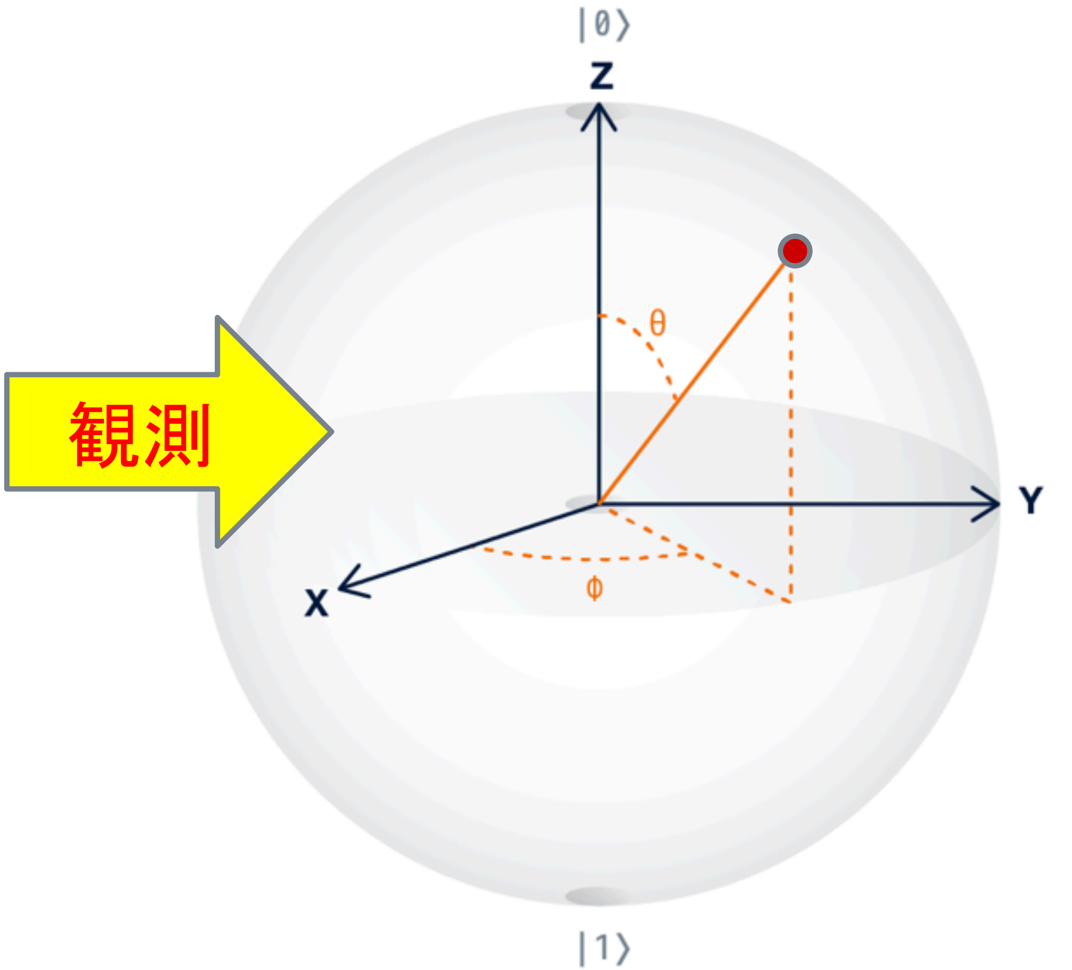
Qubit



$$|\mathrm{Qubit}\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1\ ;\ \ \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

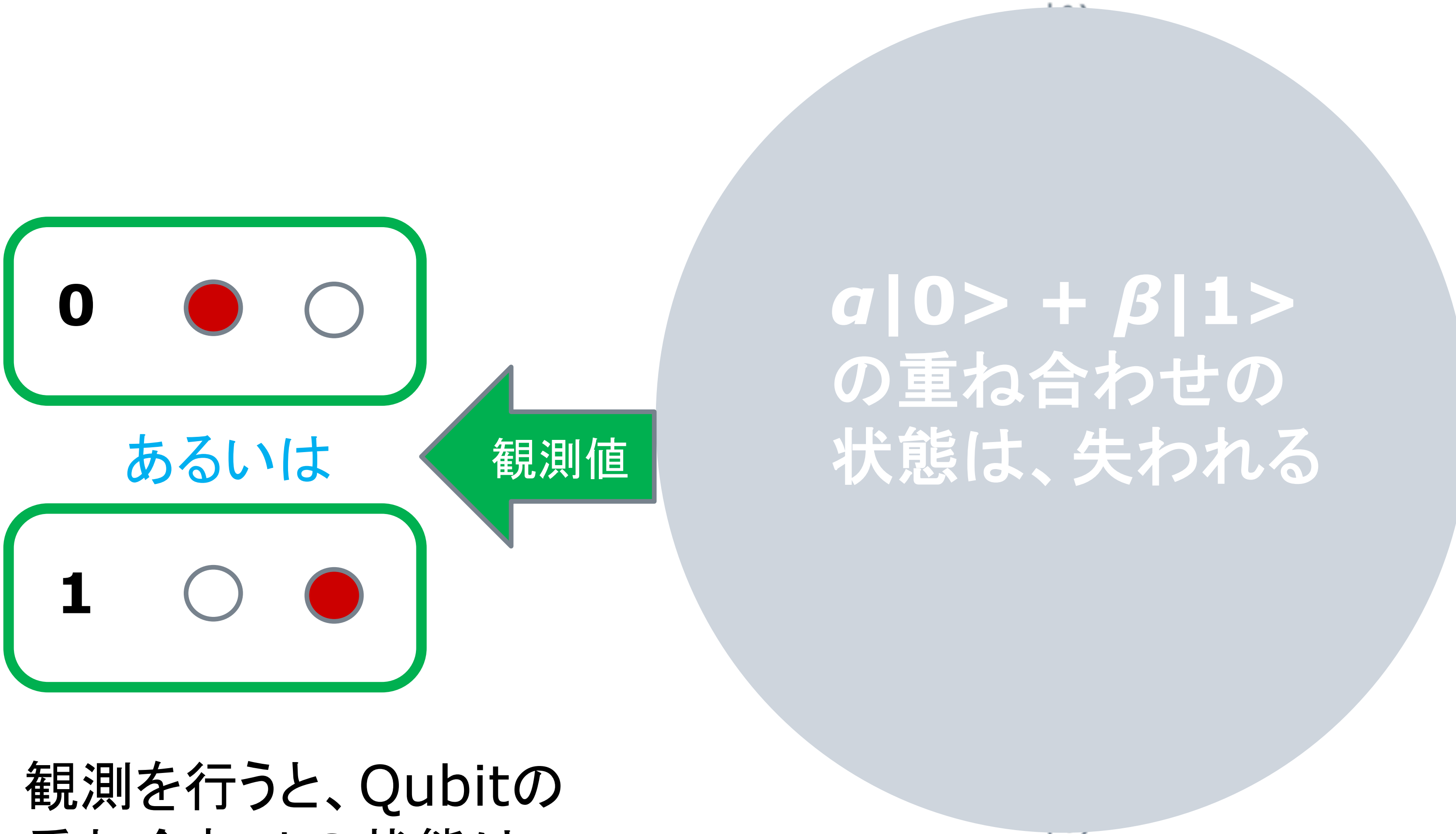
Qubit



$$|Qubit> = \alpha|0> + \beta|1>$$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1\ ;\ \ \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

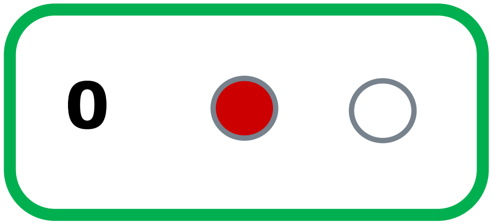
Qubit



観測を行うと、Qubitの重ね合わせの状態は失われ、0か1かの情報が返る。一つの数字のみが返る。

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1\ ;\quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

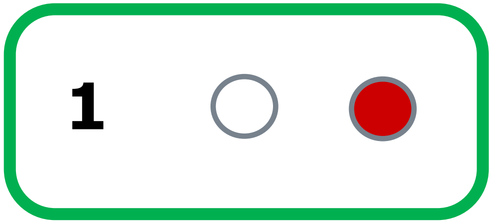
Bit



0を得る
確率は $|\alpha|^2$

$\alpha|0> + \beta|1>$
の重ね合わせの
状態は、失われる

あるいは



1を得る
確率は $|\beta|^2$

この時
0を得る確率は、$|\alpha|^2$で、
1を得る確率は、$|\beta|^2$で、
与えられる。

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \; ; \; \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

Qubitの観測

- 観測を行うと、Qubitの重ね合わせの状態は失われ、0か1かの情報が返る。(|0> または |1> が観測される。)
- この時0を得る確率は $|\alpha|^2$で、1を得る確率は $|\beta|^2$で、与えられる。

$$\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} \xrightarrow{\text{観測}} \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$$

観測される確率 $|\boldsymbol{\alpha}|^2$

あるいは

$$\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} \xrightarrow{\text{観測}} \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$$

観測される確率 $|\boldsymbol{\beta}|^2$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

観測による状態の変化とBornのルール

- 量子の状態は、直接には、観測できない。
- また、観測によって、系の状態は、観測前とは異なる状態に変化する。(以前の重ね合わせは失われる。)
  - α|0> + β|1>の重ね合わせの状態は、観測によって|0>または|1>の新しい状態に変化する。(「崩壊する」)

- 新しい状態が観測される確率は、正確に計算することができる。
  - 0を得る確率は、$|\alpha|^2$ で、
1を得る確率は、$|\beta|^2$ で、与えられる。

これをBornのルールと呼ぶ、

Qubitの観測の例

$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ としよう。

0 が観測される確率は、$|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{1}{2}$

1 が観測される確率は、$|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{1}{2}$

だから、0と1は、同じ確率で観測される。（「量子コイン」）

$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ としよう。

0 が観測される確率は、$|\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{1}{2}$

1 が観測される確率は、$|-\frac{1}{\sqrt{2}}|^2 = \frac{1}{2}$

ここでも、0と1は、同じ確率で観測される。

また、観測では、状態 $|+\rangle$と状態 $|-\rangle$との区別がつかないことがわかる。

量子論の三つの原理
一般的な表現

一般に、量子の状態は、n個の状態の重ね合わせとして表現される

n次元複素ベクトル空間の基底を |0>,|1>,|2>,…,|n-1> とすると、

$$\text{量子の状態} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{pmatrix} \text{は、}$$

$$c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + \ldots + c_{n-1}|n-1\rangle$$

と表現される。ただし、$|c_0|^2+|c_1|^2+ \ldots +|c_{n-1}|^2=1$

一般の量子の状態を、Σ を使って表す

総和の記号Σ を使うと、量子の状態を見やすく表現できる。

$$\text{量子の状態} = \mathbf{c_0|0> + c_1|1> + \ldots + c_{n-1}|n-1>}$$

$$= \sum_{k=0}^{n-1} c_k|k>$$

ただし、$\sum_{k=0}^{n-1} |c_k|^2 = 1$

量子の状態の変化

ある量子の状態は、他の状態に変化することができる。
その変化は、「ユニタリ変換」という、ルールに従う。

量子の状態ベクトル |A>は、このユニタリ変換Uによって、他の状態 |B> に変換される。

$$U\,|A\rangle = |B\rangle$$

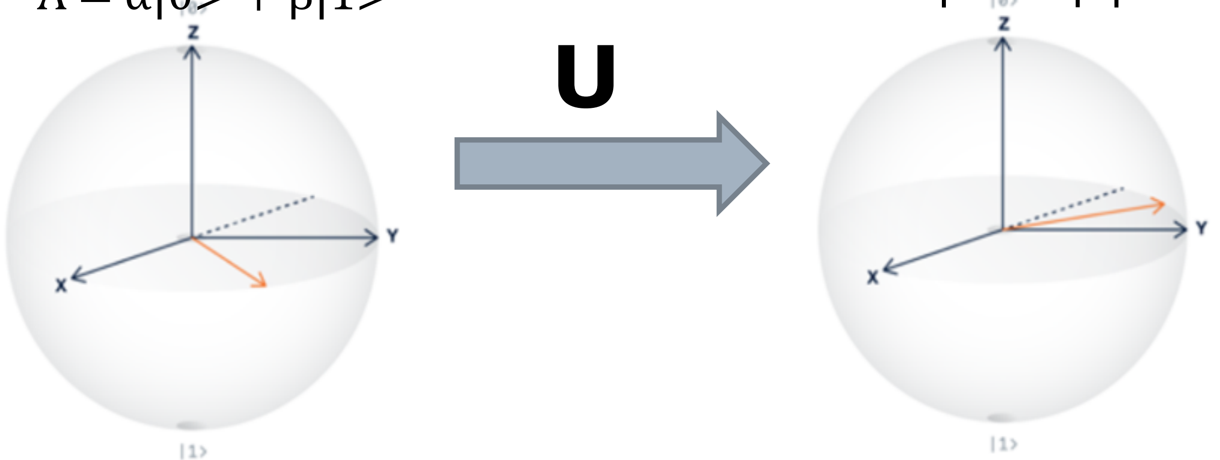
ユニタリ変換を表すユニタリ行列

- ユニタリ変換Uは、幾何的には、ベクトルの長さを変えないベクトルの回転である。
- $UU^\dagger = U^\dagger U = I$ (単位行列)を満たす行列を、ユニタリ行列と呼ぶ。
- 量子の状態ベクトル |A>は、このユニタリ行列によって、他の状態 |B> に変換される。

$$U\,|A\rangle = |B\rangle$$

$A = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$

$B = \alpha'|0\rangle + \beta'|1\rangle$



一般の量子状態の観測

一般の量子状態 $|\psi\rangle = \sum_{k=0}^{n-1} c_k|k\rangle$ が与えられた時、

状態 $|0\rangle$ が観測される確率は、$|c_0|^2$ で与えられる。
観測前の状態 $|\psi\rangle$は、新しい状態 $|0\rangle$に変わる。

状態 $|1\rangle$ が観測される確率は、$|c_1|^2$ で与えられる。
観測前の状態$|\psi\rangle$は、新しい状態 $|1\rangle$に変わる。

…

状態 $|k\rangle$ が観測される確率は、$|c_k|^2$ で与えられる。
観測前の状態$|\psi\rangle$は、新しい状態 $|k\rangle$に変わる。


第二話:
閉じた純粋な量子の世界を記述する

要約

- ここでは、閉じた純粋な量子の世界を考える。そこは、「観測の原理」が必要とされない世界である。
- ここでは、内積の定義された複素ベクトル空間上で、状態(ベクトル)に演算子(行列)が作用するという形で量子の世界が記述される。
- ここでは、「観測の原理」では我々は知り得ないとされる量子の状態を表すベクトルの成分の値も、行列の成分の値も、我々にはアクセス可能で計算可能である。
- この世界は、不思議なところのない、確率も登場しない、いわば「決定論」的な世界である。

Agenda
第二話：閉じた純粋な量子の世界を記述する

- □ 量子の状態を表現するベクトル空間
- □ 内積とベクトル空間の基底
- □ 線形演算子
- □ 線形演算子の状態への作用
- □ 固有ベクトルと固有値
- □ 「共役」の概念で定義される演算子の性質
- □ ユニタリ演算子 -- 時間発展の演算子

量子の状態を表現するベクトル空間

量子の状態を表現するベクトル空間
ヒルベルト空間

- 量子の状態は、複素数を成分とするベクトルで表現される。
- 量子の状態を表現する複素ベクトル空間を、「ヒルベルト空間」と呼ぶ。
- ヒルベルト空間上には、ケットで表現される列ベクトルとそれに共役なブラで表現される行ベクトルと、これら二つのベクトルから数（複素数）を生み出す「内積」が定義される。
- 量子の状態の変化は、状態に対する演算子の作用として記述される。それは、状態を表すベクトルに、演算子としての行列が作用することと同じである。
- これらの作用は、基本的に「内積」によって定義される。

内積とベクトル空間の基底

ベクトルの内積

内積 <Bra|Ket>

- 行ベクトル <Bra| と列ベクトル |Ket> の次元が同じ時、<Bra|と|Ket>の内積を<Bra||Ket> で表す。二重の縦棒の一つを省略して、<Bra|Ket> と書いても良い。例えば、

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix} \text{で、} |B\rangle = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \beta_4 \\ \beta_5 \end{pmatrix} \text{なら、}$$

$$\begin{aligned} \langle B|A\rangle &= \begin{pmatrix} \beta_1^* & \beta_2^* & \beta_3^* & \beta_4^* & \beta_5^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \alpha_5 \end{pmatrix} \\ &= \beta_1^*\alpha_1 + \beta_2^*\alpha_2 + \beta_3^*\alpha_3 + \beta_4^*\alpha_4 + \beta_5^*\alpha_5. \end{aligned}$$

内積の計算例

$|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ とする。
$\langle 0| = (1\ 0)$ ， $\langle 1| = (0\ 1)$ だから、
次のような計算が成り立つ。

1. $\langle 0|0\rangle = (1\ 0)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 1\cdot 1+0\cdot 0=1$
2. $\langle 0|1\rangle = (1\ 0)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = 1\cdot 0+0\cdot 1=0$
3. $\langle 1|0\rangle = (0\ 1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0\cdot 1+1\cdot 0=0$
4. $\langle 1|1\rangle = (0\ 1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = 0\cdot 0+1\cdot 1=1$

ベクトルの共役と内積の性質

- $|V\rangle = |A\rangle + |B\rangle \Longleftrightarrow \langle V| = \langle A| + \langle B|$
- $|V\rangle = z|A\rangle \Longleftrightarrow \langle V| = \langle A|z^*$
- $\langle C| \, (\, |A\rangle + |B\rangle \,) = \langle C|A\rangle + \langle C|B\rangle$
- $\langle B|A\rangle = \langle A|B\rangle^*$

正規直交基底

ベクトル空間の基底ベクトル

n次元のベクトル空間V_nの、任意のベクトル $|A>$ が、
特定のn個のベクトル$|B_i>$ $(0 \le i < n)$で、次の形で一意に表現される時、$|B_i>$は、V_nの「基底ベクトル」であると言われる。

$$|A> = a_0|B_0> + a_1|B_1> + \ldots + a_{n-1}|B_{n-1}>$$

あるいは、

$$|A> = \sum_{i=0}^{n-1} a_i \, |B_i>$$

$|B_i>$ ＝ $|i>$ と表記すれば

$$|A> = \sum_{i=0}^{n-1} a_i \, |i>$$

ベクトル空間の基底の例

例）2次元の複素ベクトル空間V_2 の任意のベクトル|A>は、次の形をしている。

$$|A> = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

この時、$|0>= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1>= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ とすれば、

任意の x, y について、

$$|A> = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= x|0>+y|1>$$ である。

よって、 |0>, |1> は、V_2の基底　　である。

ベクトル空間の基底の例

例）3次元のベクトル空間V_3 の任意のベクトル|A>は、次の形をしている。

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

この時、$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ とすれば、

任意の x, y, z について、

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + z \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= x|0\rangle + y|1\rangle + z|2\rangle$$ である。

よって、 |0>, |1>, |2> は、V_3の基底　　　である。

ベクトルの直交性と正規性

<B|A> = 0 の時、ベクトル |A>, |B> は直交しているという。

<B|A> = 0 なら、<A|B> = 0 である。なぜなら、両辺の複素共役をとって、<B|A>* = 0 だから。

<A|A> = 1 の時、ベクトル |A>は、正規化されているという。

$|A> = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ の時、<A|A> = 1 の条件は、

$<A|A> = (\alpha^* \ \beta^*) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha^* \alpha + \beta^* \beta = 1$ に等しい。

直交正規な基底の内積

n次元ベクトル空間の基底を、|0>, |1>, … , |n-1>で表そう。この基底が直交正規基底である条件は、次のように書ける。

- 直交性から、i ≠ j の時、$\langle i | j \rangle = 0$
- 正規性から、$\langle i | i \rangle = 1$

□ 次のクロネッカーの記号 $\delta_{ij} = \begin{cases} i \neq j \text{ の時} & 0 \\ i = j \text{ の時} & 1 \end{cases}$

を導入すると、基底が直交正規である条件は、次のようにかける。

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}$$

内積の性質

ユニタリ変換は内積を保存する

- ユニタリ演算子Uが、$|v>$,$|w>$に作用して、$U|v>$, $U|w>$が得られたとする。$U^{\dagger}U = I$ である。

  $U|v>$と$U|w>$の内積を考える。
  $(U|v>, U|w>) = <v|U^{\dagger}U|w> = <v|I|w> = <v|w>$

- すなわち、ユニタリ演算子を適用しても、二つのベクトルの内積は変化しない。ユニタリ演算子は、内積を保存する。

状態の自分自身との内積

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\psi\rangle &= \left(\sum_j a_j^* \langle j|\right)\left(\sum_k a_k |k\rangle\right) \\
&= \sum_{j,k} a_j^* a_k \langle j|k\rangle \\
&= \sum_{j,k} a_j^* a_k \delta_{jk} \\
&= \sum_k |a_k|^2 \quad = 1
\end{aligned}$$

$$|\phi\rangle = \sum_k b_k |k\rangle .$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \sum_{j,k} a_j^* b_k \langle j|k\rangle = \sum_k a_k^* b_k$$

状態の自分自身との内積

$$\langle\psi|\psi\rangle = \left(\sum_j a_j^* \langle j|\right)\left(\sum_k a_k |k\rangle\right)$$
$$= \sum_{j,k} a_j^* a_k \boxed{\langle j|k\rangle}$$
$$= \sum_{j,k} a_j^* a_k \boxed{\delta_{jk}}$$
$$= \sum_k |a_k|^2 \quad = 1$$

$$\delta_{jk} = \begin{cases} j \neq k \text{ の時} & 0 \\ j = k \text{ の時} & 1 \end{cases}$$

だから、$j \neq k$ の時の項は消え、
$j = k$ の時 の項 $a_k^* a_k$だけが残る。
ここで、$a_k^* a_k = |a_k|^2$ を使う

ここも同様

$$|\phi\rangle = \sum_k b_k |k\rangle .$$

$$\langle\psi|\phi\rangle = \boxed{\sum_{j,k} a_j^* b_k \boxed{\langle j|k\rangle}} = \sum_k a_k^* b_k$$

j,k についての総和が、
kについての総和になる

ベクトルの成分を内積で表す

ベクトルの成分を取り出す

- 正規直交の基底を|0>, |1>, … , |n-1> とすると、任意のベクトル|A> は、次の式で表現される。 この時、α_iを、基底 |i> の成分という。

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle.$$

- この表示から、次のようにして成分を取り出すことができる。両辺に、左から<j| をかけると、

$$\langle j|A\rangle = \langle j| \sum_i \alpha_i |i\rangle = \underbrace{\sum_i \alpha_i \boxed{\langle j|i\rangle} = \alpha_j}_{\text{ここが、みそ。}}$$

$$\alpha_0 < j|0> + \alpha_1 < j|1> + \alpha_2 < j|2> + \ldots + \alpha_j < j\,|\,j> + \cdots + \alpha_{n-1} < j|n-1>$$

ベクトル成分の表示　α_i = <i|A>

$$\alpha_i = \langle i|A \rangle$$

これを改めて、 $|A\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle$ に代入すると、

$$|A\rangle = \sum_i |i\rangle \boxed{\langle i|A\rangle}$$

α_i 　はスカラーである

$$|A\rangle = \boxed{\sum_i |i\rangle\langle i|} A\rangle$$

こうした見方もできる
ことを、あとで説明する

$$\boxed{\sum_i |i\rangle\langle i| = I}$$

線形演算子

線形演算子 Operator

- ベクトル|A>をベクトル|B>に変換する作用を持つMを演算子と呼ぶ。

$$\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle.$$

- この演算子Mが、次の性質を持つとき、Mは線形であるという。

$$\mathbf{M}z|A\rangle = z|B\rangle.$$

$$\mathbf{M}\{|A\rangle + |B\rangle\} = \mathbf{M}|A\rangle + \mathbf{M}|B\rangle.$$

行列は線形演算子である

- ベクトル|A>の次元がnで、Mがm行n列の行列なら、|A>に左から行列Mをかける操作 M|A> は、|A>をm次元のベクトルに変換するので、行列Mは、演算子である。
- （スカラー cは、ベクトル|A>をベクトルc|A>に変換するので、トリビアルであるが、演算子である。）

$$\mathbf{M}|A\rangle = |B\rangle$$ とする

|A>, |B> を成分表示すると

$$|A\rangle = \sum_j \alpha_j |j\rangle. \quad |B\rangle = \sum_j \beta_j |j\rangle.$$

演算子Mの作用は、次のようになる

$$\sum_j \mathbf{M}|j\rangle \alpha_j = \sum_j \beta_j |j\rangle.$$

左から<k|を両辺にかける

$$\sum_j \langle k|\mathbf{M}|j\rangle \alpha_j = \sum_j \beta_j \boxed{\langle k|j\rangle}.$$

$\langle k|\mathbf{M}|j\rangle$ は、<k| と M|j> の内積なので数値である。

$$\sum_j \beta_j \boxed{\langle k|j\rangle}$$

$\langle k|\mathbf{M}|j\rangle = m_{kj}$とすると

$$\boxed{\sum_j m_{kj}\alpha_j = \beta_k}$$

演算子は、行列で表現される

行列の成分を内積で表す

演算子の行列表示とその成分

$|i\rangle$, $|j\rangle$ を基底とする時、演算子Mの行列成分を m_{ij}とすれば、次の式が成り立つ。

$$\langle i|M|j\rangle = m_{ij}$$

$\langle i|M|j\rangle = \langle i|(M|j\rangle) = m_{ij}$ の証明

$M|j\rangle$

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1j} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2j} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & & & & \\ m_{i1} & m_{i2} & \cdots & m_{ij} & \cdots & m_{in} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{nj} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix}$$

$$|j\rangle = \begin{array}{c} j\ 番目 \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

$M|j\rangle$ は、行列 M の j 列目の n(列) ベクトルである

$$M|j\rangle = \begin{pmatrix} m_{1j} \\ m_{2j} \\ \vdots \\ m_{ij} \\ \vdots \\ m_{nj} \end{pmatrix}$$

$$\langle i| = (\underbrace{0 \quad 0 \quad \cdots \quad 1}_{i\ 番目} \quad \cdots \quad 0 \quad 0)$$

$\langle i|M|j\rangle$ は、ベクトル $M|j\rangle$ の i番目の成分である。

$$M|j\rangle = \begin{pmatrix} m_{1j} \\ m_{2j} \\ \vdots \\ \boxed{m_{ij}} \\ \vdots \\ m_{nj} \end{pmatrix} \quad i\ 番目$$

$$\boxed{\langle i|M|j\rangle = m_{ij}}$$

$\langle i|M|j\rangle = (\langle i|M)|j\rangle = m_{ij}$ の証明

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \cdots & m_{1j} & \cdots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \cdots & m_{2j} & \cdots & m_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \\ \boxed{m_{i1}} & m_{i2} & \cdots & \boldsymbol{m_{ij}} & \cdots & m_{in} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{nj} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix}$$

j 番目

$$|j\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\langle i| = (\underbrace{0 \quad 0 \quad \cdots \quad 1}_{i\ 番目} \quad \cdots \quad 0 \quad 0)$$

$\langle i|M$ は、行列 M の
i 行目のベクトル である

$$\langle i|M = (\boxed{m_{i1}\ m_{i2} \ldots m_{ij} \ldots m_{in}})$$

$\langle i|M|j\rangle$は、ベクトル$\langle i|M$の
j番目の成分に等しい。

$$\langle i|M = (\underbrace{m_{i1}\ m_{i2} \ldots m_{ij}}_{j\ 番目} \ldots m_{in})$$

$$\boxed{\langle i|M|j\rangle = m_{ij}}$$

別解

$$M = \sum_{i,j} m_{ij} |i >< j|$$

$$< k|M|l > = < k| \sum_{i,j} m_{ij} |i >< j||l >$$

$$= \sum_{i,j} m_{ij} < k|i >< j|l >$$

$$= m_{kl}$$

$$< k|M|l > = m_{kl}$$

対角行列

対角行列

n x n の正方行列で、対角線上の成分のみが 0でなく、その他の成分が全て 0の行列を「対角行列」という。

次のものは、対角行列である。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d \end{pmatrix}$$

Trace -- 対角成分の和

n x n の正方行列 Aで、対角線上の成分の和を**Trace** という。
行列A のtrace を tr(A) で表す。

Aの行列成分を A_{ij}とすれば、先に見たように、次の式が成り立つ。 ＜i|A|j＞＝ A_{ij}
行列Aの対角線上の成分は、$A_{11}, A_{22}, A_{33}, \cdots, A_{nn}$と表せるから

$$\mathbf{tr(A)} = \sum_{k=1}^{n} A_{kk} = \sum_{k=1}^{n} < k|A|k >$$

対角行列の性質

A, Bを対角行列とすると、AB ＝ BA である。

対角行列の固有値は、対角要素に等しい。

線形演算子の状態への作用

線形演算子の状態への作用

- 線形演算子の状態への作用は、基本的には、行列のベクトルへの作用として記述される。
- その具体的な計算については、Appendixを参照されたい。
- ケット記法、特に正規直交基底の内積が、0か1になるという性質を用いると、計算の見通しがとてもよくなる。

固有ベクトルと固有値

行列の固有ベクトルと固有値

行列Mに対して、あるベクトル |v> と、ある数字 m が存在して、

行列　　　　数字

$$\mathbf{M|v> = m|v>}$$

ベクトル　　　ベクトル

となる時、|v>をMの固有ベクトル、mをその固有値と呼ぶ。(ただし、|v>は、0でないとする)

行列にベクトルをかけるとベクトルになるのだが、できたベクトルは様々な向きを向く。固有ベクトルの場合には、行列の作用を受けても、向きが変わらない（元のベクトルの数値倍だから）

一般に nxnの行列は、n個の固有ベクトルと、それに対応したn個の固有値を持つ。

固有値を求める

一般の場合で考えてみる。

M|v> = m|v> は、単位行列をIとすれば、

M|v> = mI|v>　だから、

$$(M\text{-}mI)|v> = 0$$

これが 0でない|v>について成り立つためには、

行列 M-mI の行列式 det(M-mI)が0でなければならない。

$$\det(M\text{-}mI) = 0$$

これを行列Mの特性方程式（固有多項式）という。

行列Mの固有値を求めるには、このMの特性方程式（一般には、行列の成分についてのn次の方程式）を解けばいい。

ただし、大きな行列について、実際にこの方法で固有値を計算するのは難しい。

行列の固有ベクトルと固有値の例1

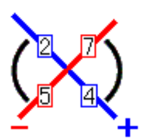
$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ とする。

$\det(X\text{-}m\mathbf{I}) = 0$ より

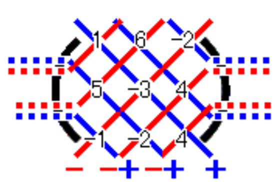
$$\det\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - m\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right] = \det\left[\begin{pmatrix} 0-m & 1 \\ 1 & 0-m \end{pmatrix}\right]$$

$$= m^2 - 1 = 0$$

だから、Xの固有値は、± 1 となる。



$det\ A = 2\times4 - 7\times5 = -27$



$$det\ A = 1\cdot(-3)\cdot4 + 6\cdot4\cdot(-1) + (-2)\cdot5\cdot(-2) - 1\cdot4\cdot(-2) - 6\cdot5\cdot4 - (-2)\cdot(-3)\cdot(-1)$$
$$= -122$$

行列の固有ベクトルと固有値の例1

固有値がわかったので固有ベクトル$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$を求める。

$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \pm 1\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ だから、 $\begin{pmatrix} v \\ u \end{pmatrix} = \pm 1\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$

これから、v=u または v=−uがわかる。

固有ベクトルは、一つではない。
固有ベクトルの定数倍も、固有ベクトルである。

実際に、次の式が成り立つ。

$$X\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = +1\cdot\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$X\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} = -1\cdot\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

行列の固有ベクトルと固有値の例2

$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$ とする。

det(S-m**I**) = 0 より

$$\det\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \mathrm{m}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right] = \det\left[\begin{pmatrix} 1-m & 0 \\ 0 & -i-m \end{pmatrix}\right]$$

$$= (1-m)(-i-m) = 0$$

だから、Xの固有値は、1 と –i になる。

行列の固有ベクトルと固有値の例2

固有値がわかったので固有ベクトル$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$を求める。

$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = +1\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ または、$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = -i\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$

これから、v=0 または u=0がわかる。

固有ベクトルは、一つではない。
固有ベクトルの定数倍も、固有ベクトルである。

実際に、次の式が成り立つ。

$$S\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +1\cdot\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$S\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -i \end{pmatrix} = -\mathrm{i}\cdot\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

「共役」の概念で定義される演算子の性質

スカラー・ベクトル・行列の共役

スカラー

$$a = x + yi \quad \Longleftrightarrow \quad a^* = x - yi$$

ベクトル

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad \Longleftrightarrow \quad \langle v| = (a_1^*,\ a_2^*,\ a_3^*,\ \cdots\ ,\ a_n^*)$$

行列

$$A = \begin{pmatrix} \boxed{\begin{matrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{matrix}} & \begin{matrix} \cdots \\ \ddots \\ \cdots \end{matrix} & \boxed{\begin{matrix} a_{1n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{matrix}} \end{pmatrix} \quad \Longleftrightarrow \quad A^\dagger = \begin{pmatrix} \boxed{a_{11}^* \quad \cdots \quad a_{m1}^*} \\ \vdots \qquad \ddots \qquad \vdots \\ \boxed{a_{1n}^* \quad \cdots \quad a_{mn}^*} \end{pmatrix}$$

ユニタリ行列

- 行列の共役と元の行列の積が単位行列 I に等しい行列を、ユニタリ行列という。

行列Uがユニタリ ⟺ $U^{\dagger}U = UU^{\dagger} = I$

- ユニタリ行列の例

$$X^{\dagger}X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

。Xはユニタリである。

$$Z^{\dagger}Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Zはユニタリである。

$$H^{\dagger}H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Hはユニタリである。

エルミート行列

- 行列の共役が元の行列に等しい行列を、エルミート行列という。

行列Mがエルミート ⟺ M ＝ $M^{\dagger}$

- エルミート行列の例

$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ の時、$X^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$。Xはエルミートである。

$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ の時、$Z^{\dagger} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$。Zはエルミートである。

$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ の時、$\mathrm{H}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$。Hはエルミートである。

正規行列

行列Nが、次の条件を満たす時、正規行列という。

$$NN^{\dagger} = N^{\dagger}N$$

もちろん、$NN^{\dagger} = N^{\dagger}N \ = I$ の時、Nは正規行列である。
（ユニタリ行列の場合がそうである）

エルミート行列は、正規行列である。

N がエルミートの時、$N = N^{\dagger}$ だから

$$NN^{\dagger} = N^2 = \left(N^{\dagger}\right)^2 = N^{\dagger} N$$

ユニタリ演算子
時間発展の演算子

ユニタリ変換は内積を保存する

- ユニタリ演算子Uが、|v>,|w>に作用して、U|v>, U|w>が得られたとする。U|v>とU|w>の内積を考える。
$(U|v\rangle, U|w\rangle)=\langle v|U^{\dagger}U|w\rangle=\langle v|w\rangle$

- すなわち、ユニタリ演算子を適用しても、二つのベクトルの内積は変化しない。ユニタリ演算子は、内積を保存する。

ユニタリ行列の固有値

ユニタリ行列 Uの固有値を λ とする。この時、

$$U|x> = \lambda|x>$$

$$<x|U^{\dagger} \; = \; \lambda^{*}<x|$$

$$<x|U^{\dagger}U|x> = \lambda^{*}\lambda <x|x>$$

$$<x|x> = \lambda^{*}\lambda <x|x>$$

$$\lambda^{*}\lambda = 1$$

$$\therefore |\lambda|^{2} = 1$$

ユニタリ行列の固有値の絶対値は 1 である。

ユニタリ行列の固有値は、単位円周上にある。 $\lambda = e^{i\theta}$

時間発展の演算子

時刻tでの量子の状態を、|Ψ(t)>で表してみよう。

t=0の時の状態を|Ψ(0)>とすると 、ある時間発展を表現する演算子 U(t)を使って、次の式が成り立つとする。

二つの状態が「区別」できることは、それが「直交」していることに等しい

$$|\Psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t)|\Psi(0)\rangle$$

t=0の時に、|Ψ(0)> と|Φ(0)>は、直交していたとする。

すなわち、 $\langle\Psi(0)|\Phi(0)\rangle = 0$ かつ $\langle\Psi(t)|\Phi(t)\rangle = 0$

t=0での直交関係は、時間がたっても、直交したままで、変わらない。

この時、 $\langle\Psi(t)| = \langle\Psi(0)|\mathbf{U}^\dagger(t)$ だから、

$$\langle\Psi(t)|\Phi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|\mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{U}(t)|\Phi(0)\rangle = 0.$$

時間発展の演算子

Ψ、Φの異なる直交基底 i, j をとると、先の式から、

$$\langle i|\mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{U}(t)|j\rangle = 0 \quad (i \neq j)$$

もし、i=jなら、U(t)|i> とU(t)|j>の内積は、1である。

$$\langle i|\mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{U}(t)|j\rangle = \delta_{ij}$$

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = I$$

時間発展の演算子は、ユニタリである。



第三話:

「観測の原理」を記述する

要約

- ここでは、「観測」の問題を取り上げる。「観測」は前節でみた数学的計算とは異なる物理的過程である。
- ただ、その数学的モデルはすぐに見つかる。「射影演算子」は、重ね合わせを解体し、重ね合わせの中から一つの項のみを取り出すものだ。
- ただ、それはユニタリな演算子ではない。「観測の原理」は、ユニタリ演算子の作用のみで量子の状態が変わるという閉じた量子の世界の「原理」とは、明らかに異なる「原理」なのだ。
- もう一つ問題がある。「観測」される量は、複素数ではなく実数でなければならないという問題だ。
- この問題は、観測の演算子に、固有値が実数であるというエルミート性を仮定することで回避できる。

Agenda
第三話:「観測の原理」を記述する

- □ 観測の確率を内積で表す
- □ 射影演算子
- □ 演算子 |i><j|の行列表示
- □ 観測可能量とエルミート演算子
- □ 観測の期待値
- □ スペクトル分解定理
- □ 観測演算子の一般化

観測の確率を内積で表す

観測の確率を内積で表す

- 全ての可能なqubitの状態 |A>は、二次元のベクトル空間で表現される。

$$|A> = \alpha_0|0> + \alpha_1|1>$$

- この時、|A>の成分 α_0, α_1は、次のように表される。

$$\alpha_0 = <0|A> \ ; \ \alpha_0^* = <0|A>^* = <A|0>$$
$$\alpha_1 = <1|A> \ ; \ \alpha_1^* = <1|A>^* = <A|1>$$

- |A>を観測した時、

0が観測される確率は、$p_0 = \alpha_0^*\ \alpha_0 = \overbrace{<A|0>}^{\alpha_0^*}\overbrace{<0|A>}^{\alpha_0}$

1が観測される確率は、$p_1 = \alpha_1^*\ \alpha_1 = \underbrace{<A|1>}_{\alpha_1^*}\underbrace{<1|A>}_{\alpha_1}$

$$\alpha_0^*\ \alpha_0 + \alpha_1^*\ \alpha_1 = |\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1$$

この条件は、<A|A> = 1 に、等しい。

$|A\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle$を観測した時、

0が観測される確率

$$p_0 = \alpha_0^*\,\alpha_0 = \overbrace{\langle A|0\rangle}^{\alpha_0^*}\overbrace{\langle 0|A\rangle}^{\alpha_0}$$

1が観測される確率

$$p_1 = \alpha_1^*\,\alpha_1 = \underbrace{\langle A|1\rangle}_{\alpha_1^*}\underbrace{\langle 1|A\rangle}_{\alpha_1}$$

こうした見方もできる
ことを、あとで説明する

$$p_0 = \alpha_0^*\,\alpha_0 = \langle A\boxed{|0\rangle\langle 0|}A\rangle$$

$$p_1 = \alpha_1^*\,\alpha_1 = \langle A\boxed{|1\rangle\langle 1|}A\rangle$$

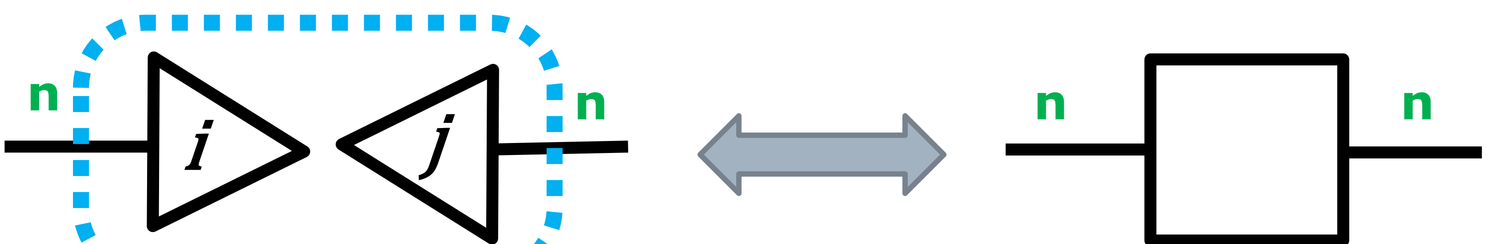
射影演算子

外積　|.><.| 演算子の定義

|i><j| は、ベクトル |k> に作用して、ベクトル a|i>
(ただし、aは、内積<j|k> で定義されるスカラー値)を生み出す演算子である。これを、|i>と|j>の外積という。

$$(|i\rangle\langle j|)(|k\rangle)$$
$$|i\rangle\langle j||k\rangle = |i\rangle\,(\boxed{\langle j|k\rangle}) = (\boxed{\langle j|k\rangle})\,|i\rangle = a|i\rangle$$

これは、内積なので
スカラーになる



左右に腕の出た行列である

射影演算子 $P_i = |i\rangle\langle i|$

$|i\rangle\langle i|$の形で表される演算子を射影演算子という。

$P_0 = |0\rangle\langle 0|$, $P_1 = |1\rangle\langle 1|$ は、射影演算子である。

qubit $|Q\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ に対して

$P_0|Q\rangle$, $P1|Q\rangle$を計算してみよう。

$$
\begin{aligned}
P_0|Q\rangle
&= (|0\rangle\langle 0|)\,(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \\
&= |0\rangle(\alpha\langle 0|0\rangle + \beta\langle 0|1\rangle) = |0\rangle(\alpha \times 1 + \beta \times 0) \\
&= \alpha|0\rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
P_1|Q\rangle &= (|1\rangle\langle 1|)\,(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \\
&= \beta|1\rangle
\end{aligned}
$$

射影演算子は観測演算子

$P_0|Q> = (|0><0|)(\alpha|0> + \beta|1>) = \alpha|0>$
$P_1|Q> = (|1><1|)(\alpha|0> + \beta|1>) = \beta|1>$

P_0 を $\alpha|0> + \beta|1>$に適用すると、$\beta|1>$の項は失われ、$\alpha|0>$が残り
P_1 を $\alpha|0> + \beta|1>$に適用すると、$\alpha|0>$の項は失われ、$\beta|1>$が残る。
「射影」というのは、そういう意味である。

「射影」演算子によって、重ね合わせの状態は失われ、一つの基底のみが観測されることが表現される。

同時に、その基底の成分α,βは「確率振幅」で、その絶対値の二乗がその基底が観測される確率を表す。

射影演算子を、観測演算子と呼ぶ。

射影演算子で観測の確率を表す

$P_0 = |0><0|$, $P_1 = |1><1|$ として、qubit $|Q> = \alpha|0> + \beta|1>$ に対して**$<Q|P_0|Q>$**を計算してみよう。

$<Q|P_0|Q>$

$= (<0|\alpha^* + <1|\beta^*)(|0><0|)\ (\alpha|0> + \beta|1>)$

$= (<0|\alpha^* + <1|\beta^*)(\alpha|0>) = \alpha^*\alpha = |\alpha|^2$

同様に、

$<Q|P_1|Q> = \beta^*\beta = |\beta|^2$ となる。

状態$|Q>$ で

$|0>$が観測される確率p_0は、$<Q|P_0|Q> = <Q|0><0|Q>$

$|1>$が観測される確率P_1は、$<Q|P_1|Q> = <Q|1><1|Q>$

これは、先に見た次のような内積による、
観測確率の表現とも一致する。

$|A\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle$ を観測した時、

0が観測される確率

$$p(0) = \alpha_0^* \alpha_0 = \overbrace{\langle A|0\rangle}^{\alpha_0^*}\overbrace{\langle 0|A\rangle}^{\alpha_0}$$

1が観測される確率

$$p(1) = \alpha_1^* \alpha_1 = \underbrace{\langle A|1\rangle}_{\alpha_1^*}\underbrace{\langle 1|A\rangle}_{\alpha_1}$$

$$p(0) = \langle A|0\rangle\langle 0|A\rangle$$

$$p(0) = \boxed{\langle A|0\rangle}\boxed{\langle 0|A\rangle}$$

内積による表現

$$p(0) = \langle A\boxed{|0\rangle\langle 0|}A\rangle$$

射影演算子による表現

$|\psi>$を観測して、状態 $|k>$が観測される確率 $<\psi|P_k|\psi>$

$$|\psi> = \sum_i c_i \Big| i >, \quad < \psi \Big| = \sum_j < j|c_j^*$$

$$<\psi|P_k|\psi>$$

$$= <\psi|k><k|\psi>$$

$$= \sum_j < j|c_j^* |k >< k| \sum_i c_i|i >$$

$$= \sum_{i,j} c_j^* c_i < j|k >< k|i >$$

$$= c_k^* c_k = |c_k|^2$$

$|\psi>$を観測して、状態 $|k>$が観測される確率 $<\psi|P_k|\psi>$

$$|\psi> = \sum_i c_i \left|i >, \quad < \psi\right| = \sum_j < j|c_j^*$$

$<\psi|P_k|\psi>$

$P_k=|k><k|$

$$= <\psi\boxed{|k><k|}\psi>$$

$$= \boxed{\sum_j < j|c_j^*} |k >< k| \boxed{\sum_i c_i|i >}$$

$$= \sum_{i,j} c_j^* c_i \boxed{< j|k >} \boxed{< k|i >}$$

i=j=kの場合のみ項が残る。

$$= c_k^* \, c_k = |c_k|^2$$

演算子 $|i\rangle\langle j|$の行列表示

外積 $|.><.|$ 演算子を
二次元ベクトル $|k>$に適用した例

ベクトル$|k> = a|0>+b|1>$ と外積 $|i><j|$に適用する。

$<i|J> = \delta_{ij}$ を利用する

$<0|0> = <1|1> = 1$, $<0|1> = <1|0> = 0$ を使う

$(|0><0|)(a|0>+b|1>)=a|0><0|0>+b|1><0|1>$
$\quad = a|0>\cdot 1+b|1>\cdot 0 = a|0>$

$(|0><1|)(a|0>+b|1>)=a|0><1|0>+b|0><1|1>$
$\quad = a|0>\cdot 0+b|1>\cdot 1 = b|0>$

$(|1><0|)(a|0>+b|1>)=a|1><0|0>+b|1><0|1>$
$\quad = a|1>\cdot 1+b|1>\cdot 0 = a|1>$

$(|1><1|)(a|0>+b|1>)=a|1><1|0>+b|1><1|1>$
$\quad = a|0>\cdot 0+b|1>\cdot 1 = b|1>$

二次元ベクトルに対する、先の結果をまとめてみる

$$|0\rangle\langle 0|\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix},\quad |0\rangle\langle 1|\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|1\rangle\langle 0|\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix},\quad |1\rangle\langle 1|\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix}$$

この時、二次元ベクトルに対する演算子 |i><j| に対応する行列は、次のものになる。

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\quad |0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$|1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

|i><j| 演算子を2x2の行列で表す

$$|0><0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\quad |0><1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$|1><0| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad |1><1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$ である。

この時、

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & b \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}$$

$$= a \underset{|0><0|}{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}} + b \underset{|0><1|}{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}} + c \underset{|1><0|}{\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}} + d \underset{|1><1|}{\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

だから Aは、次のように表すことができる。

$$\mathrm{A} = \ \mathrm{a}|0><0| + \mathrm{b}|0><1| + \mathrm{c}|1><0| + \mathrm{d}|1><1|$$

|i><j| 演算子と行列

演算子 |i><j| は、i 行 j 列目の要素だけが 1 で、残りの要素が全て 0 である行列である。

任意の行列Aの、i 行 j 列目の要素をa_{ij} としよう。この時、

任意の行列Aは、このAの要素a_{ij} と、行列 |i><j| を使って、次のように表すことができる。

$$A = \sum_{i,j} a_{ij} |i >< j|$$

単位行列 I は、次のように表される。

$$I = \sum_{i} |i >< i|$$

A_{ij}= |i><j| と a_{ij}= <i|A|j>の関係

A:W → V という演算子を考える。

Wでの単位行列をI_W、Vでの単位行列をI_Vとする。

$$A = I_W A I_V$$

$I = \sum_i |i><i|$ を使うと

$$= \sum_{ij} \underbrace{|w_j\rangle\langle w_j|}_{I_W} A \underbrace{|v_i\rangle\langle v_i|}_{I_V}$$

$$= \sum_{ij} \underbrace{\langle w_j|A|v_i\rangle}_{a_{ij}} |w_j\rangle\langle v_i|,$$

$$= \sum_{i,j} a_{ij} |i><j|$$

観測可能量とエルミート演算子

エルミート演算子 Hermitian Operator Observable

- $H=H^\dagger$ である時、Hをエルミート行列という。
- cが複素数の時、$c=c^*$ $(=c^\dagger)$ は、cが実数であることと同値である。$H=H^\dagger$は、$c=c^*$ の行列バージョンと考えていい。
- 量子の世界では、量子の状態は直接観測できず、物理的に観測可能な量(Observable)は、実数に近い性質を持つエルミートな線形演算子として記述される。
- 実際に観測される量は、エルミート演算子の固有値である。
- エルミート演算子の固有値は、実数である。

エルミート行列の固有値は、実数である

エルミート行列Lの固有ベクトルを|λ>、固有値をλとする。

エルミート行列　　固有値

$$\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

固有ベクトル　　固有ベクトル

この時、 $\langle\lambda|\mathbf{L}^{\dagger} = \langle\lambda|\lambda^{*}$ である。

最初の式に左から<λ|、二つ目の式に右から|λ>をかけて、

$$\langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda\ \langle\lambda|\lambda\rangle$$
$$\langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda^{*}\ \langle\lambda|\lambda\rangle$$

ここで、L†=L (Lはエルミートだから)を使った。

これから、λ*=λ。すなわち、**λは実数である**。

エルミート行列の固有ベクトルは直交基底をなす

エルミート行列 Lの異なる二つの固有ベクトルを $|\lambda_1>$, $|\lambda_2>$、その固有値をλ_1, λ_2 とすると、

$$\mathbf{L}|\lambda_1\rangle = \lambda_1|\lambda_1\rangle$$

$$\mathbf{L}|\lambda_2\rangle = \lambda_2|\lambda_2\rangle$$

ここでは、固有値が実数であることを使っている。

$$\langle\lambda_1|\mathbf{L} = \lambda_1\langle\lambda_1|$$

$$\mathbf{L}|\lambda_2\rangle = \lambda_2|\lambda_2\rangle$$

$$\langle\lambda_1|\mathbf{L}|\lambda_2\rangle = \lambda_1\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle$$

$$\langle\lambda_1|\mathbf{L}|\lambda_2\rangle = \lambda_2\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle$$

エルミート行列の固有ベクトルは、直交基底をなす。

$$(\lambda_1 - \lambda_2)\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle = 0.$$

観測の期待値

観測値の期待値

一般に、値λ_iが確率P(λ_i)で観測される時、その観測 L の期待値を<L>で表せば、<L>は、次の式で与えられる。

$$\langle \mathbf{L} \rangle = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i)$$

ある量子系のシステムの状態を|A>とする。系の観測可能量は、あるエルミートな演算子 L で表現されるのだが、観測値は、このLの固有値 λ_i である。また、L の固有ベクトル |λ_i>は、この系の基底である。だから、|A>は、次のように表現できる。

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |\lambda_i\rangle$$

左から、L を作用させると、

$$\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i \alpha_i \mathbf{L}|\lambda_i\rangle$$

観測値の期待値
<L> = <A|L|A>

λ_i は、L の固有値なので、$\mathbf{L}|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle$ 。これを使うと、先の式は、次のようになる。

$$\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i \alpha_i \lambda_i |\lambda_i\rangle$$

今度は、この式に、左から <A| をかける。

$$\langle A|\mathbf{L}|A\rangle = \sum_i (\alpha_i^* \alpha_i) \lambda_i$$

$(a_i{}^* a_i)$ =$P(\lambda_i)$ なので、次の式が成り立つ。

$$\langle \mathbf{L}\rangle = \langle A|\mathbf{L}|A\rangle$$

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |\lambda_i\rangle$$

だから

$<A| = \sum \alpha_i^* < \lambda_i|$

$<A|L|A> =$

$(\sum \alpha_i^* < \lambda_i|)(\sum \alpha_i \lambda_i |\lambda_i >)$

ある状態 |A> をとる系の、Observable L の観測値の期待値は、L を Aでサンドイッチすれば <L> = <A|L|A> で求まる。

スペクトル分解定理

正規行列のスペクトル分解

Nが正規である時、Nは次の形で表すことができる。

$$N = \sum_i \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i|$$

ここで、$|e_i>$は、Nの直交する固有ベクトルで、λ_iは、対応する固有値である。

Nを、$|e_i>$基底で表した時、対角成分だけがゼロでない形にできる。この形を「対角形式」とよぶ。

対角行列は正規である

逆に、対角行列は正規であることが、次のようにしてわかる。
行列Oが対角行列であるなら、Oは、次のように表される。

$$O = \sum_i \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i| \ ,$$

この時

$$\begin{aligned} OO^\dagger &= \sum_i \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i| \sum_j \lambda_j^* |e_j\rangle\langle e_j| \\ &= \sum_i |\lambda_i|^2 |e_i\rangle\langle e_i| \\ &= O^\dagger O \ . \end{aligned}$$

対角行列の積は、対角成分同士を掛けたものであるので、直感的には、明らかである。

よって、Oは、正規である。

スペクトル分解の応用

スペクトル分解定理の応用(1)

ユニタリ行列の固有値の絶対値は 1 であることは、次のように、スペクトル分解定理を応用しても導くことができる。

ユニタリ行列Uは、正規なので、次のように表現できる。

$$U = \sum_j \lambda_j |e_j\rangle\langle e_j|$$

$$\begin{aligned}\sum_j |e_j\rangle\langle e_j| &= I \\ &= UU^\dagger \\ &= \sum_j |\lambda_j|^2 |e_j\rangle\langle e_j|\end{aligned}$$

$$\therefore |\lambda|^2 = 1$$

$$U = \sum_j e^{i\phi_j} |e_j\rangle\langle e_j|$$

$$U^\dagger = \sum_j e^{-i\phi_j} |e_j\rangle\langle e_j|$$

スペクトル分解定理の応用(2)

スペクトル分解定理を使って、エルミート行列 Hの固有値が実数であることも、次のように示すことができる。

エルミート行列は正規なので、

$$H = \sum_i \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i|$$

共役をとって、

$$H^\dagger = \sum_i \lambda_i^* |e_i\rangle\langle e_i|$$

$H = H^\dagger$ だから、$\lambda_i = \lambda_i^*$

よって、λは実数である。

スペクトル分解定理の応用(3)

正規演算子Nについて、N^{2}を計算してみよう。

$$
\begin{aligned}
N^2 &= N \times N \\
&= \left(\sum_i \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i| \right) \left(\sum_j \lambda_j |e_j\rangle\langle e_j| \right) \\
&= \sum_i \lambda_i^2 |e_i\rangle\langle e_i| \,.
\end{aligned}
$$

一般に、

$$
\boxed{f(N) = \sum_i f(\lambda_i) |e_i\rangle\langle e_i|}
$$

観測演算子の一般化

演算子 P_i の基本的性質

$|\psi>$を観測して、状態 |i>が観測される確率 p(i)

$$\mathrm{p(i)} = <\psi|P_{\mathrm{i}}|\psi>$$

$$\boldsymbol{P_0 + P_1 \equiv 1}$$

$$\because\ |0><0| + |1><1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathrm{I}$$

一般に、 $\displaystyle\sum_i P_i = 1$

$$\boldsymbol{P_i^2 = P_i}$$

$$\because P_i^2 = |i><i||i><i| = |i><i| = P_i$$

$\boldsymbol{P_i^\dagger = P_i}$　　$\boldsymbol{P_i}$ **はエルミートである**

$$P_i^\dagger = (|i><i|)^\dagger = (<i|)^\dagger\,(|i>)^\dagger = |i><i| = P_i$$

観測演算子の一般化　**POVM**
(Positive Operator Valued Measurement)

先に見た射影演算子P_iの性質から、$\boldsymbol{P_i = P_i^2 = P_i^\dagger P_i}$

このP_mで$|\psi>$を観測して、状態 mを観測する確率p(m)は、

$$p(m) = <\psi|P_m|\psi> = <\psi|P_m^2|\psi> = <\psi|P_m^\dagger P_m|\psi>$$

状態mを観測する確率が、次の式で与えられる演算子M_mも観測演算子である。　$\boldsymbol{p(m) = <\psi|M_m^\dagger M_m|\psi>}$, $\sum_i M_i^\dagger M_i = \mathrm{I}$

$E_m = M_m^\dagger M_m$で表されて、$p(m) = <\psi|E_m|\psi>$, $\sum_i E_i = \mathrm{I}$ である演算子E_mを、POVMと呼ぶ。



第四話:

密度行列とTraceで「観測」を考える

要約

- ここでは、密度行列の概念を紹介する。
- ミクロな量子の世界とマクロで古典的な世界は大きく異なっているのだが、確率的なアプローチにおいては共通の構造を持つ。そのことが、密度行列ではうまく表現できるのだ。
- それだけではない。これまで、量子の状態をベクトルで表示するアプローチで「量子論の原理」を説明してきたのだが、量子の状態を密度行列で表示するアプローチでも、「量子論の原理」を定式化できるのだ。
- 残念ながら、今回は、こうした密度行列的なアプローチは、ほんの紹介にとどまっている。

Agenda
第四話：密度行列とTraceで「観測」を考える

- □ 密度行列
- □ 密度行列と trace
- □ 密度行列と観測確率
- □ CP-map
- □ 密度行列で量子論の原理を記述する

密度行列

密度行列（密度演算子）の定義

状態 $|\varphi_i>$ が確率 p_iで起きる時、次の式で定義される行列を、密度行列という。

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i >< \varphi_i|$$

これは、状態 $|\varphi_i>$ の「確率分布」を与えるものと考えてよい。

pureな状態のベクトル表示と密度行列との対応

状態 |ψ> が確実に起きるなら、すなわち確率 1 で起きるなら、密度行列は、

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i >< \varphi_i|$$

p_i に 1を入れて、iについて和をとる必要もなく、
1 * |ψ><ψ| = |ψ><ψ| になる。こうした状態を「純粋」 pure という。（そうでない場合を「混合」 mixture という。）

pureな状態のベクトル表示|ψ>には、密度行列|ψ><ψ| が対応する。

$|\psi>$ ⟺ $\rho = |\psi><\psi|$

密度行列の例

$$\rho_{quantum} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|0><0| + \frac{1}{2}|1><1|$$

$$\rho_{quantum} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|+><+| + \frac{1}{2}|-><-|$$

密度行列の例

$$\rho_{quantum} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|$$

$$\rho_{quantum} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|+\rangle\langle +| + \frac{1}{2}|-\rangle\langle -|$$

これは、量子論的な状態の確率分布ではない

$$\rho_{election} = \begin{pmatrix} 0.46 & 0 \\ 0 & 0.54 \end{pmatrix}$$
$$= 0.46|Trump\rangle\langle Trump| + 0.54|Biden\rangle\langle Biden|$$

密度行列 ρ の性質

- 混合状態の密度行列 ρは正の固有値を持つ。対角上の固有値、確率p_i は、正であるから。
- $\rho = \rho^\dagger$ は明らか。よって、ρはエルミートで、正則である。
- ρをスペクトル表示すると次を得る。ここに、$|i>$は直交基底。

$$\rho = \sum_i p_i |i >< \mathrm{i}|$$

密度行列と trace

Trace

- traceは、行列の対角要素の和である。
  行列Aのtraceを tr(A) と表す。
- 密度行列 ρのtraceは、次のように定義される。

$$tr(\rho) = \sum_k < k|\rho|k >$$

pureな密度行列のTrace

pureな密度行列は、$\rho = |\psi><\psi|$ である。

$|\psi> = \sum_i \alpha_i |i>$ とすると、pureな密度行列のTrace は、

$$
\begin{aligned}
\mathrm{tr}(|\psi\rangle\langle\psi|) &= \sum_k \langle k| \sum_{i,j} \alpha_i |i\rangle \alpha_j^* \langle j||k\rangle \\
&= \sum_{i,j,k} \alpha_i \alpha_j^* \langle k|i\rangle\langle j|k\rangle \\
&= \sum_k |\alpha_k|^2 \\
&= 1\,.
\end{aligned}
$$

pureな密度行列のTrace は、常に 1である。

pureな密度行列のTrace

pureな密度行列は、$\rho = |\psi><\psi|$ である。

$|\psi> = \sum_i \alpha_i |i>$ とすると、pureな密度行列のTrace は、

$tr(\rho) = \sum_k < k|\rho|k >$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{tr}(|\psi\rangle\langle\psi|) &= \sum_k \langle k| \boxed{\sum_{i,j} \alpha_i |i\rangle \alpha_j^* \langle j|} |k\rangle \\
&= \sum_{i,j,k} \alpha_i \alpha_j^* \boxed{\langle k|i\rangle} \boxed{\langle j|k\rangle} \\
&= \sum_k |\alpha_k|^2 \\
&= 1\,.
\end{aligned}
$$

$\boxed{|\psi><\psi|}$

pureな密度行列のTrace は、常に 1である。

密度行列 $\rho = \sum_i p_i|\psi_i >< \psi_i|$ のTrace

$$
\begin{aligned}
\mathrm{tr}(\varrho) &= \sum_k \langle k| \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i||k\rangle \\
&= \sum_i p_i \ \mathrm{tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) \\
&= \sum_i p_i \\
&= 1\ .
\end{aligned}
$$

$$tr(\rho) = 1$$

正規化の条件は、pureの場合にも、mixedの場合にも、
tr(|ψ><ψ|) = tr(ρ) = 1 で表される。

密度行列 $\rho = \sum_i p_i|\psi_i><\psi_i|$ のTrace

$$
\begin{aligned}
\mathrm{tr}(\varrho) &= \sum_k \langle k| \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i||k\rangle \\
&= \sum_i p_i \,\mathrm{tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) \\
&= \sum_i p_i \\
&= 1\,.
\end{aligned}
$$

$$\rho = \sum_i p_i|\psi_i><\psi_i|$$

$$tr(\rho) = \sum_k <k|\rho|k>$$

$$tr(|\psi><\psi|) = 1$$

$$tr(\rho) = 1$$

正規化の条件は、pureの場合にも、mixedの場合にも、
$tr(|\psi><\psi|) = tr(\rho) = 1$ で表される。

密度行列の二乗のTrace

密度行列の二乗を考える。

$$\begin{aligned}
\varrho^2 &= \varrho * \varrho \\
&= \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \\
&= \sum_{i,\,j} p_i p_j |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle\langle\psi_j| \\
&= \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \,.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}(\varrho^2) &= \sum_k \langle k| \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i||k\rangle \\
&= \sum_i p_i^2 \mathrm{tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = \sum_i p_i^2
\end{aligned}$$

密度行列の二乗のTrace

密度行列の二乗を考える。

$$
\begin{aligned}
\varrho^2 &= \varrho * \varrho \\
&= \sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i| \sum_j p_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j| \\
&= \sum_{i,\,j} p_i p_j |\psi_i\rangle \boxed{\langle\psi_i|\psi_j\rangle} \langle\psi_j| \\
&= \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \,.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{tr}(\varrho^2) &= \sum_k \langle k| \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i||k\rangle \\
&= \sum_i p_i^2 \,\mathrm{tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = \sum_i p_i^2
\end{aligned}
$$

$$\rho = \sum_i p_i|\psi_i><\psi_i|$$

$$\rho^2 = \sum_i p_i^2|\psi_i><\psi_i|$$

$$tr(\rho) = \sum_k <k|\rho|k>$$

$$tr(|\psi><\psi|) = 1$$

pureとmixtureの密度行列の違い

pureの場合

$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$

$\rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi||\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi|$

$$\mathrm{tr}(\rho^2) = \mathrm{tr}(\rho) = \mathrm{tr}(|\psi\rangle\langle\psi|) = 1$$

mixtureの場合

$$\mathrm{tr}(\rho^2) = \sum_i p_i^2$$

$$\mathrm{tr}(\rho^2) < 1$$

密度行列と観測確率

traceと内積

pureな密度行列、$\rho = |\psi\rangle\langle\varphi|$ を考える

$|\psi> = \sum_i \alpha_i |i>$, $|\varphi> = \sum_j \beta_i |j>$ とすると、

$$tr(|\psi><\varphi|) = \sum_k < k| \sum_{i,j} \alpha_i |i>\beta_j^* <j||k>$$

$$= \sum_{i,j,k} \alpha_i \beta_j^* <k|i><j|k>$$

$$= \sum_i \alpha_i \beta_i^* \quad = <\varphi|\psi>$$

$$tr(|\psi><\varphi|) = <\varphi|\psi>$$

$$tr(A|\psi><\varphi|) = <\varphi|A|\psi>$$

traceと内積

pureな密度行列、$\rho = |\psi><\varphi|$ を考える

$|\psi> = \sum_i \alpha_i |i>$, $|\varphi> = \sum_j \beta_i |j>$ とすると、

$tr(\rho) = \sum_k < k|\rho|k >$

$$tr(|\psi><\varphi|) = \sum_k < k| \boxed{\sum_{i,j} \alpha_i |i>\beta_j^* <j|} |k>$$

$|\psi><\psi|$

$$= \sum_{i,j,k} \alpha_i \beta_j^* \boxed{<k|i>} \boxed{<j|k>}$$

$$= \sum_i \alpha_i \beta_i^* \quad = <\varphi|\psi>$$

$$tr(|\psi><\varphi|) = <\varphi|\psi>$$

$$tr(A|\psi><\varphi|) = <\varphi|A|\psi>$$

密度行列と観測確率

状態 $|\varphi_i>$ が確率 p_iで起きるとする。

$|\varphi_i>$を観測して状態mを観測する確率を p(m|i)とすれば、

$$p(m|i) = <\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i> = tr(M_m^\dagger M_m|\psi_i><\psi_i|)$$

全ての$|\varphi_i>$に対して状態mを観測する確率 p(m)は、

$$p(m) = \sum_i p(m|i)p_i$$

$$= \sum_i p_i\, tr(M_m^\dagger M_m|\psi_i><\psi_i|)$$

$$= tr\left(M_m^\dagger M_m \rho\right)$$

$$\boxed{\rho = \sum_i p_i|\varphi_i><\varphi_i|}$$

$$p(m) = tr\left(M_m^\dagger M_m \rho\right)$$

CP-map
Complete Positive Map

CP-map
Complete Positive Map

演算子 $M_1, M_2, \ldots, M_k$ が、次の「完全性」の条件を満たす時、演算子 $M_1, M_2, \ldots, M_k$ をCP-map(Complete Positive Map)という。

$$\sum_i M_i^\dagger M_i = I$$

CP-mapとユニタリ演算子

ユニタリ演算子 Uは、$U^{\dagger}\mathrm{U} = \mathrm{I}$ を満たす。
CP-map M_i から、次のようにユニタリ演算子を構成できる。

$$U|\psi\rangle \otimes |0\rangle = \sum_i M_i|\psi\rangle \otimes |i\rangle$$

$$\begin{aligned}
(\langle\phi| \otimes \langle 0|U^{\dagger})(U|\psi\rangle \otimes |0\rangle) &= \sum_{i,j} \langle\phi|M_i^{\dagger} \otimes \langle i|M_j|\psi\rangle \otimes |j\rangle \\
&= \sum_{i,j} \langle\phi|M_i^{\dagger} M_j|\psi\rangle\langle i||j\rangle \\
&= \sum_i \langle\phi|M_i^{\dagger} M_i|\psi\rangle \; . \\
&= \langle\phi|I|\psi\rangle \\
&= \langle\phi||\psi\rangle \; ,
\end{aligned}$$

この演算子は、内積を
保存することがわかる。
ユニタリである。

CP-mapと観測確率

|ψ>を観測して、状態|i> を観測する確率 P(i)は、traceを使って、次の式で与えられる。

$$P(i) = <\psi|M_i^{\dagger}M_i|\psi> = \mathrm{tr}(M_i|\psi><\psi|M_i^{\dagger})$$

ここでは、先に見た関係

$$tr(A|\psi><\varphi|) = <\varphi|A|\psi>$$

を使っている。

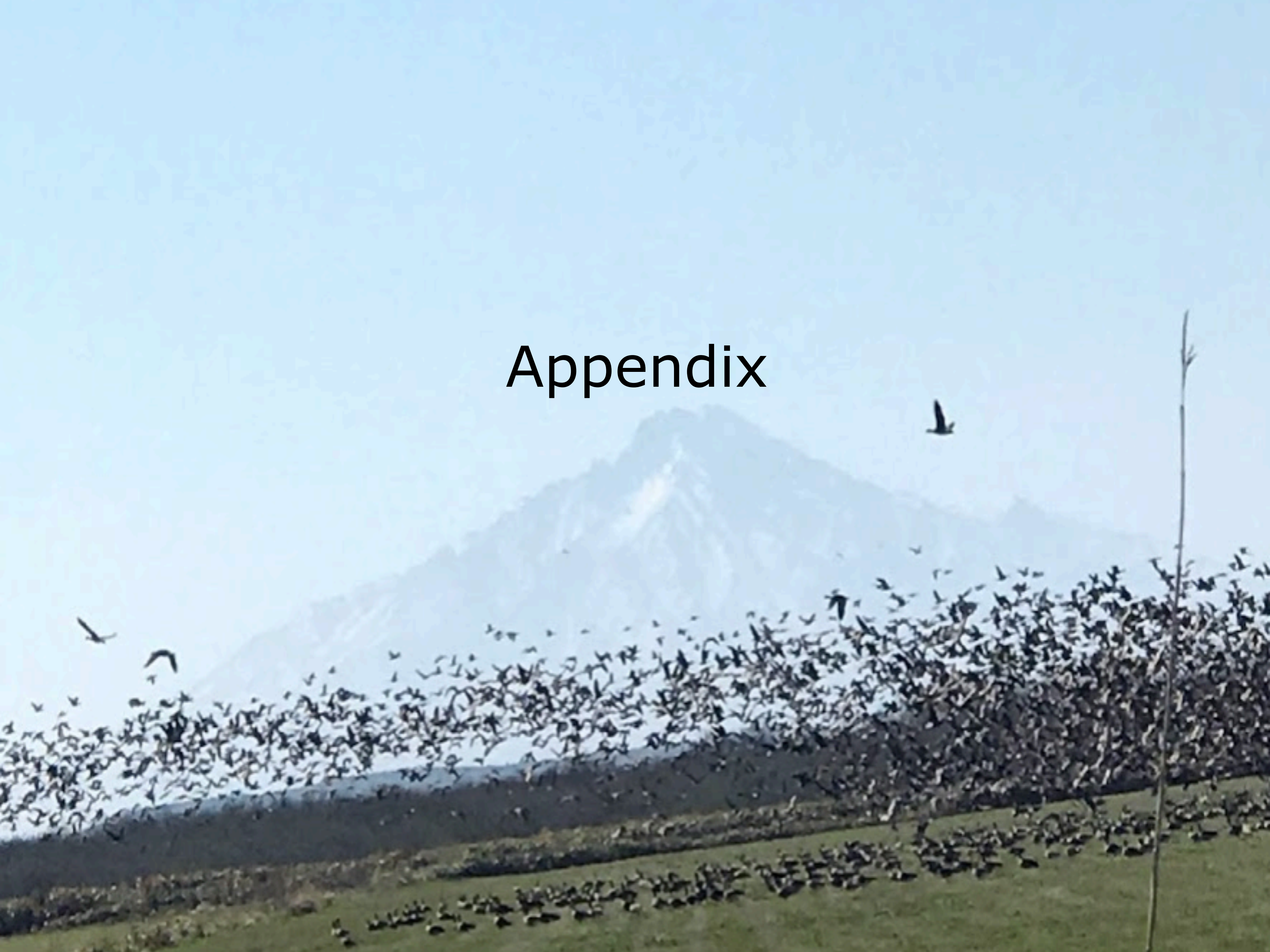
CP-map を用いて、ユニタリ変換も観測も定義できる。

密度行列で量子論の原理を記述する



おわりに

- 本セミナーを、量子コンピュータ技術の次のマイルストーンと考えられている「量子エラー訂正技術」入門へ向かう準備的なステップと、位置付けているのだが、そこでは密度行列とそのTraceの意味の理解は重要なものになる。
- おそらく、きちんとした「量子エラー訂正技術」入門の一つ手前に、「量子ゲートとエンタングルメントで理解する量子の世界」というようなステップが必要になると、今は、考えている。


Appendix

Agenda
Appendix

- ベクトルと行列の基礎
- 固有値・固有ベクトルを用いた行列の分解
- もう一つの図形を使ったアプローチ
  DiracとEinstein

ベクトルと行列の基礎

ベクトル

複素数とその共役

複素数 $z = x + iy$ (x,yは実数)に対して、複素数 $x - iy$ を、その「共役」な複素数といい、z*と表す。

この時、次の関係が成り立つ。

1. z が実数なら、$z = z^*$
2. $(z_1 + z_2)^* = z_1^* + z_2^*$
3. $(z_1 \cdot z_2)^* = z_1^* \cdot z_2^*$
4. $(z_1/z_2)^* = z1^*/z_2^*$
5. $z^*z = |z|^2$

$z = x + iy$, $z^* = x - iy$ の時、

$$z^*z = (x - iy)(x + iy) = x^2 + ixy - iyx - i^2y^2$$
$$= x^2 - (-1)y^2 = x^2 + y^2 = |z|^2$$

だから、$z^*z = |z|^2$

行ベクトルと列ベクトル

ベクトルの次元は、成分の個数に等しい。

Row $= (a_1\ a_2\ a_3 \ldots\ a_n)$ の形のベクトルを、n次元の複素「行ベクトル」という。ただし、$a_1, a_2, a_3, \ldots, a_n$ は複素数。*このことを、*
$a_1, a_2, a_3, \ldots, a_n \in \mathbb{C}$ *で表す。*

Column $= \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$ の形のベクトルをn次元の複素「列ベクトル」という。$b_1, b_2, b_3, \ldots, b_n \in \mathbb{C}$

以下では、特に断らない限り、数は、複素数とする。

行ベクトルと列ベクトルのスカラー倍と和

- $m\,(a_1\ a_2\ a_3\ \dots\ a_n) = (ma_1\ ma_2\ ma_3\ \dots\ ma_n)$

- $m\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mb_1 \\ mb_2 \\ mb_3 \\ \vdots \\ mb_n \end{pmatrix}$

- $(a_1\ a_2\ a_3\ \dots\ a_n) + (b_1\ b_2\ b_3\ \dots\ b_n) = (a_1+b_1\ \dots\ a_n+b_n)$

- $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \\ a_3 + b_3 \\ \vdots \quad \vdots \\ a_n + b_n \end{pmatrix}$

行列

行列のスカラー倍

$$\lambda A = \lambda \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda a_{11} & \lambda a_{12} & \cdots & \lambda a_{1m} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & \lambda a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda a_{n1} & \lambda a_{n2} & \cdots & \lambda a_{nm} \end{pmatrix}$$

行列の和

二つの行列は、それが同じ型を持つならば互いに加えることができる。
m 行 *n* 列の行列同士の和は、成分ごとの和である。

$$\begin{pmatrix} 5 & 6 \\ -7 & 8 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 3 & -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5+1 & 6+(-2) \\ -7+3 & 8+(-4) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 4 \\ -4 & 4 \end{pmatrix}$$

行列と列ベクトルの積

n行m列の行列と m次の列ベクトルの積は、n 次の列ベクトルになる。

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \Rightarrow AB = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \boxed{c_1} \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ \boxed{c_2} \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

c_nは、行列Aのn行目とBとの内積: $a_{n1}b_1+a_{n2}b_2+ \ldots + a_{nm}b_m$

行列の積

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdots & b_{mp} \end{pmatrix}$$

$$AB = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{np} \end{pmatrix}$$

c_{ij}は、行列Aのi行目 $(a_{i1}\ a_{i2}\ a_{i3}\ \ldots\ a_{im})$と
行列Bのj列目$(b_{j1}\ b_{j2}\ b_{j3}\ \ldots\ b_{jm})^T$との内積:
$c_{ij} = a_{i1}b_{1j}+a_{i2}b_{2j}+\ldots+a_{im}b_{mj}$

行列の転置 Transpose

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \iff A^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{m1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \iff A^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{m1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

行列の転置の例 Transpose

例えば、 A=$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}$ の時、

$$A^T = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 9 \end{pmatrix}$$ である。

行列Aのすべての要素の、複素共役をとることをA*で表す。

例えば、 B=$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3i \\ 4 & 5+i & 6 \\ -7i & 8 & 9 \end{pmatrix}$ の時、

$$B^* = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3i \\ 4 & 5-i & 6 \\ 7i & 8 & 9 \end{pmatrix}$$ である。

行列 M の複素共役 $M^\dagger$

行列Mの複素共役を、Mの転置行列 M^T の各要素の複素共役をとったものとし、$M^\dagger$ で表す。

$$\mathbf{M}^\dagger = \left[\mathbf{M}^T\right]^* .$$

行列 M の複素共役 $M^\dagger$ の例

例えば、 $B=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3i \\ 4 & 5+i & 6 \\ -7i & 8 & 9 \end{pmatrix}$ の時、

$$B^T=\begin{pmatrix} 1 & 4 & -7i \\ 2 & 5+i & 8 \\ 3i & 6 & 9 \end{pmatrix}$$

$$B^\dagger = [B^T]^* = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7i \\ 2 & 5-i & 8 \\ -3i & 6 & 9 \end{pmatrix}$$

固有値・固有ベクトルを用いた行列の分解

対角行列を用いた分解

行列Aの固有ベクトルをe_i、対応する固有値をλ_iとする。

$$A|e_i> \ = \lambda_i|e_i>$$

Aの固有ベクトルを束ねた行列をP、Aの固有値を対角成分とする行列をDとおく。

$$P = (|e_1>, |e_2>, |e_3>, \ldots, |e_n>)$$

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

対角行列を用いた分解

$$AP = A\,(|e_1>,\ |e_2>,\ |e_3>,\ \ldots\ ,\ |e_n>)$$
$$= (A|e_1>,\ A|e_2>,\ A|e_3>,\ \ldots\ ,\ A|e_n>))$$
$$= (\lambda_1|e_1>,\ \lambda_2|e_2>,\ \lambda_3|e_3>,\ \ldots\ ,\ \lambda_n|e_n>))$$

$$PD = (|e_1>,\ |e_2>,\ |e_3>,\ \ldots\ ,\ |e_n>)\ D$$
$$= (\lambda_1|e_1>,\ \lambda_2|e_2>,\ \lambda_3|e_3>,\ \ldots\ ,\ \lambda_n|e_n>))$$

確かめてみよ

$$AP = PD$$

これから

$$A=PDP^{-1}$$

行列の分解

行列Aの固有ベクトルをe_i、それに対応する固有値をλ_iとする時、Aは、基底 $|e_i>$を束ねた行列Pのもとで、次の形で表すことができる。

$$
\mathrm{A} = \mathrm{P}\begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & & \\ & \lambda_2 & & & \text{0} & \\ & & \lambda_3 & & & \\ & & & \lambda_4 & & \\ & \text{0} & & & \ddots & \\ & & & & \lambda_{n-1} & \\ & & & & & \lambda_n \end{pmatrix}\mathrm{P}^{-1}
$$

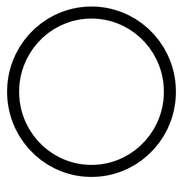
ここで、対角成分のλ_i以外は、すべて0である。

もう一つの図形を使ったアプローチ

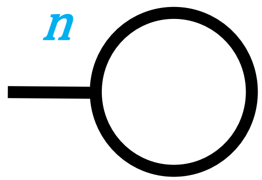
DiracとEinstein

ベクトル・行列の積を
図形で表す

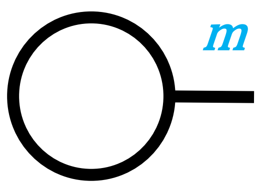
ノテーション



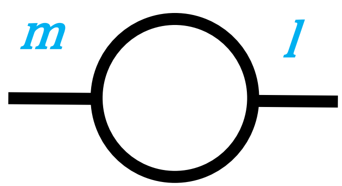
スカラー



n-列ベクトル



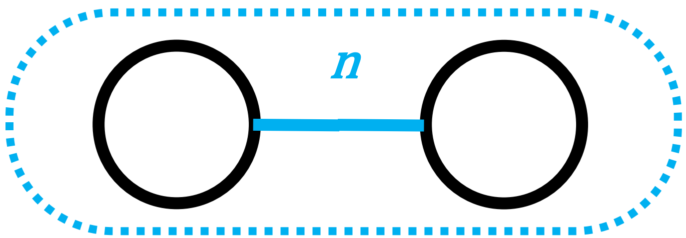
m-行ベクトル



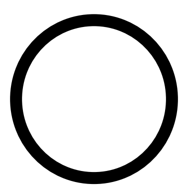
m x l 行列

ベクトルとベクトルの積
内積

同じ指数 n を持つ
n(行)ベクトルと
n(列)ベクトルの積



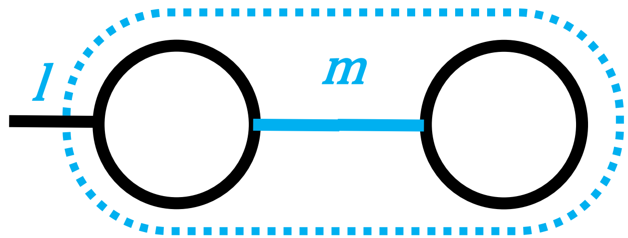
n(行)ベクトルと
n(列)ベクトルの
contraction



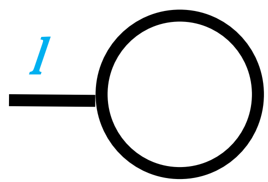
腕がないので
スカラーになる

行列とベクトルの積

l x m 行列と
m(列)ベクトルの積



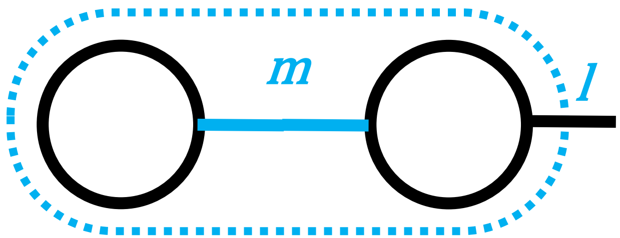
l x m 行列と
m(列)ベクトルの
contraction



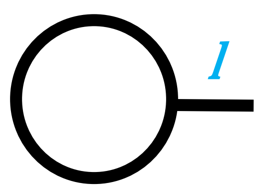
腕が一つの
l(列)ベクトルである

ベクトルと行列の積

m(行)ベクトルと
m x l 行列の積



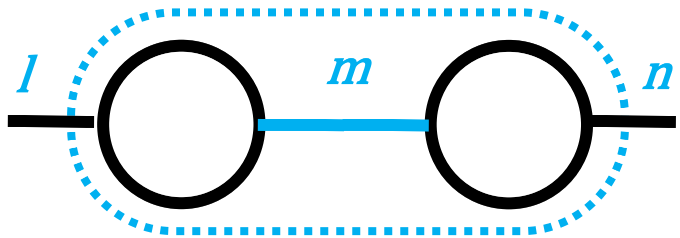
m(行)ベクトルと
m x l 行列の
contraction



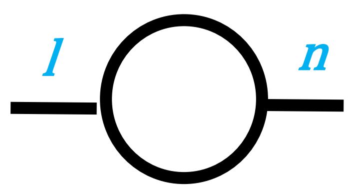
腕が一つの
l(行)ベクトルである

行列と行列の積

l x m 行列と
m x n 行列の積

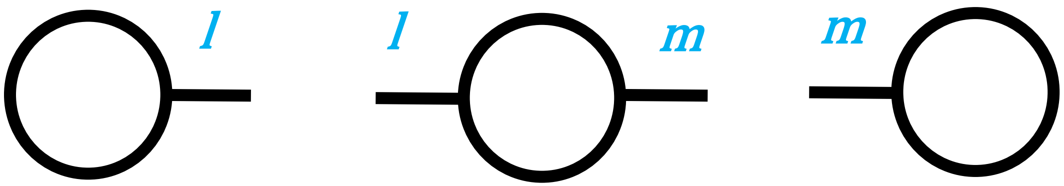


l x m 行列と
m x n 行列の
contraction

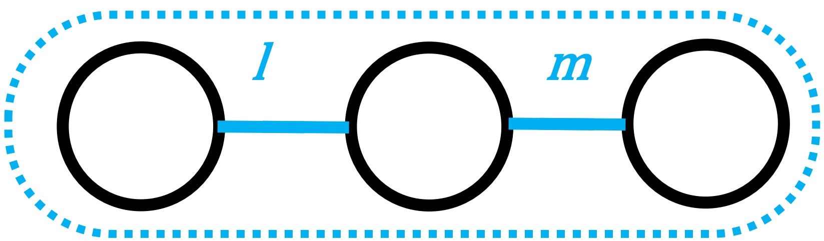


腕が二つの
l x n 行列である

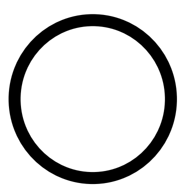
ベクトルと行列とベクトルの積



l(行)ベクトルと
l x m 行列と
m(列)ベクトルの積

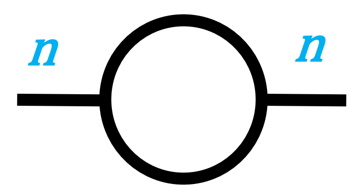


三つの
contraction

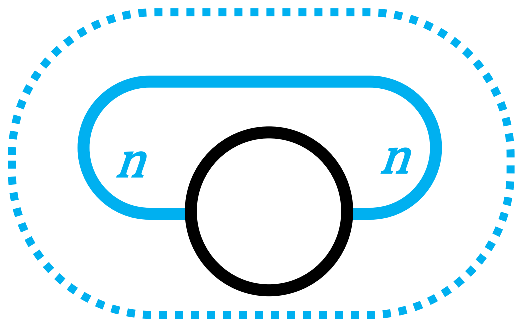


腕が無いので
スカラーである

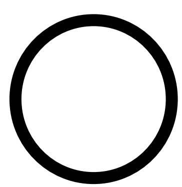
正方行列の自分自身との contraction
Trace



n x n の正方行列



自分自身との
contraction

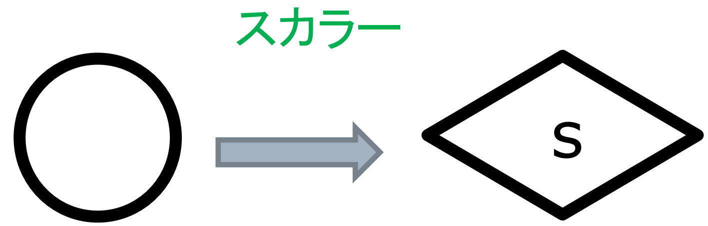


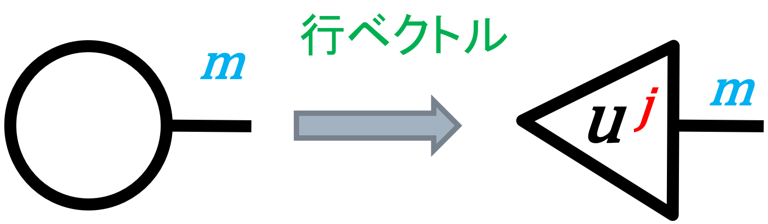
腕がないので
スカラーになる

DiracのKet記法と
Einsteinの縮約記法

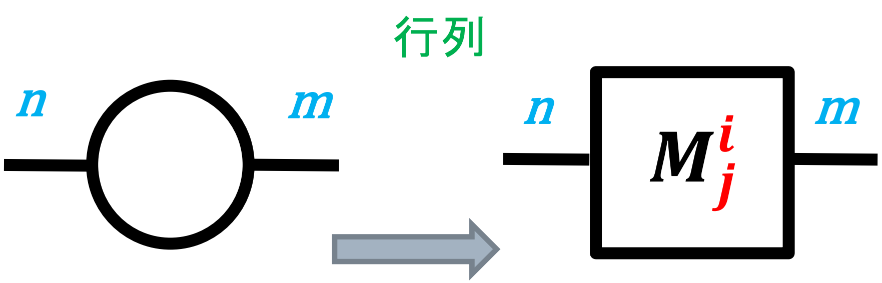
積の形の表示と積の成分の表示

$1 \leq i \leq n$





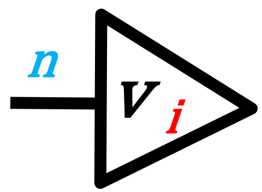
$1 \leq j \leq m$



$1 \leq i \leq n$

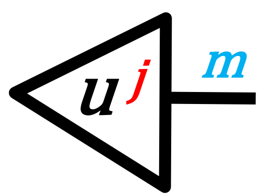
$1 \leq j \leq m$

DiracのKet記法との対応



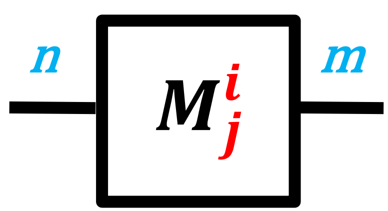
$1 \le i \le n$

|V> Ket ベクトル



$1 \le j \le m$

<V| Bra ベクトル



n x m 行列

M^i_j

$1 \le i \le n$

$1 \le j \le m$

Einsteinの縮約ルール

$u^i v_i$

のように、同じ添字 ***i*** が変数の上下に現れる時は、その ***i*** について和を取るものとする。

あるいは、その和 $\sum_i u^i v_i$ の省略形として

$u^i v_i$ を利用する。

$u^j M^i_j$

この例では、同じ添字 ***j*** が、変数の上下に現れている。

$M^i_j N^j_k$

この例でも、同じ添字 ***j*** が、上下に現れている。

Einsteinの縮約ルールの例

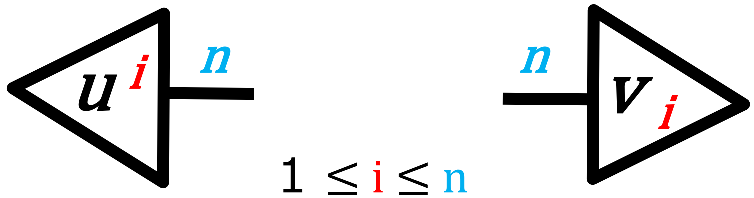
$$u^i v_i \quad \Longleftrightarrow \quad \sum_i u^i v_i$$

$$u^j M^i_j \quad \Longleftrightarrow \quad \sum_j u^j M^i_j$$

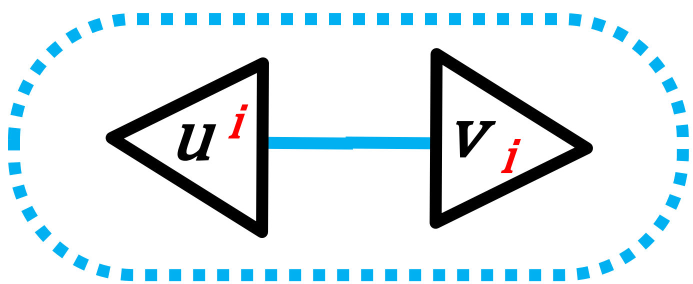
$$M^i_j N^j_k \quad \Longleftrightarrow \quad \sum_j M^i_j N^j_k$$

ベクトル・行列の積を成分で表す

ベクトルとベクトルの積の成分
内積

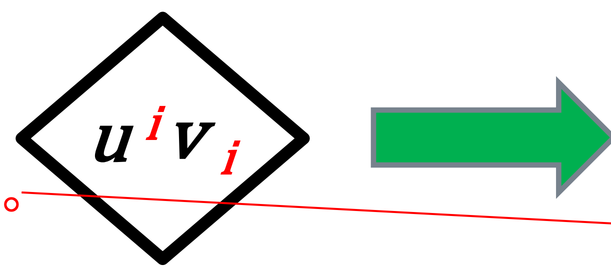


同じ指数 n を持つ
二つのベクトルの積



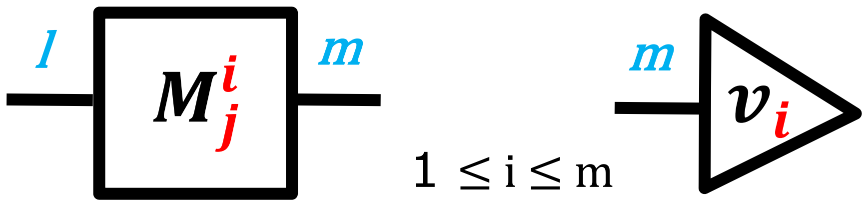
二つのベクトルの
contraction
腕がないので
スカラーになる

スカラーの値。
u^iとv_iの積。
ただし、iについて和をとる。



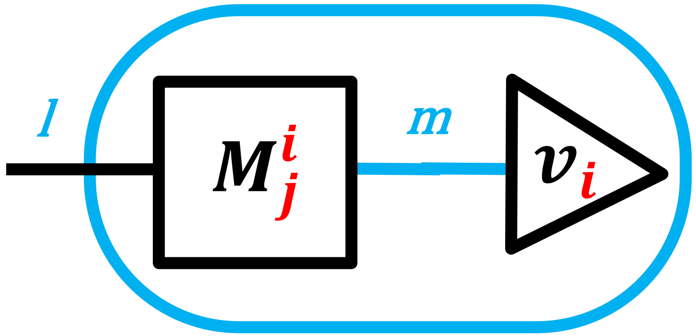
$$\boxed{\sum_i} u^i v_i$$

行列とベクトルの積の成分



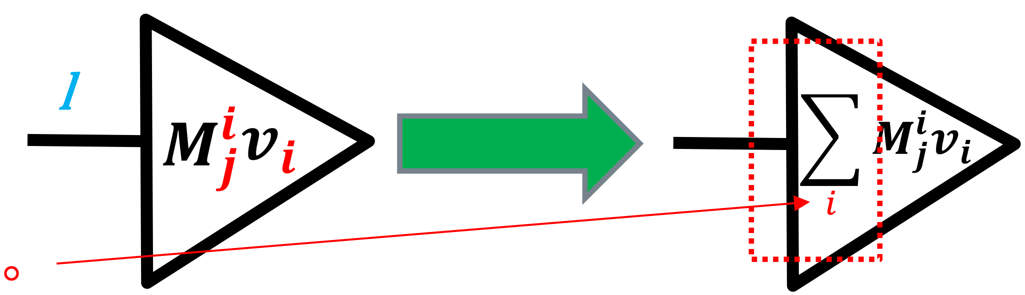
$1 \leq i \leq m$
$1 \leq j \leq l$

l x m 行列と
m(列)ベクトルの積

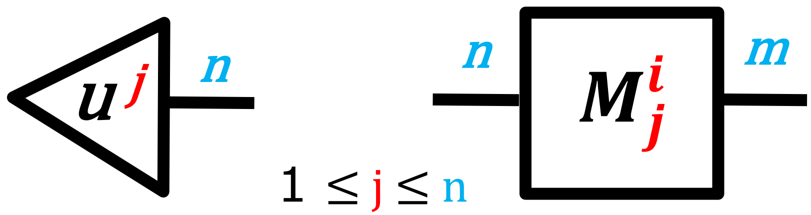


二つの
contraction
左に腕が一つ出た
l(列)ベクトルになる

l(列)ベクトルの成分の値。
M_j^i とv_iの積。
ただし、iについて和をとる。



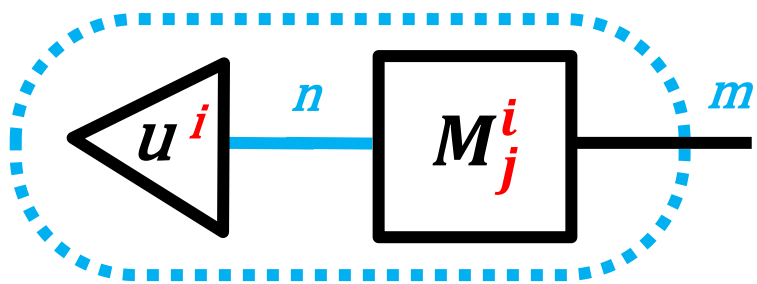
ベクトルと行列の積の成分



$1 \leq j \leq n$
$1 \leq i \leq m$

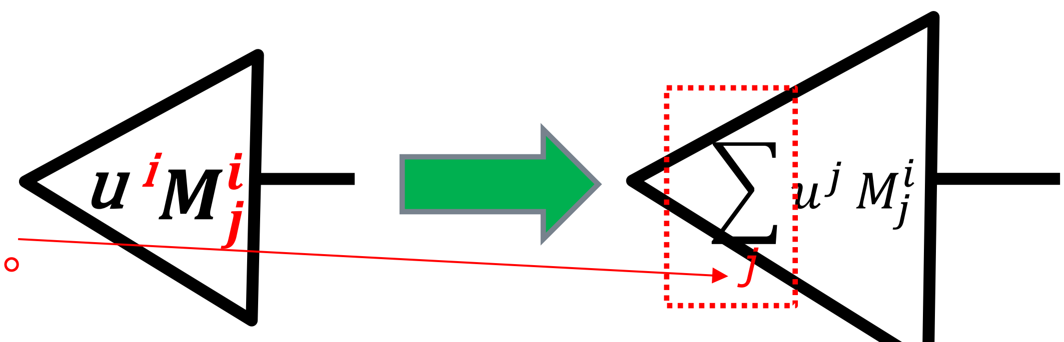
n（行）ベクトルと
n x m 行列の積

i

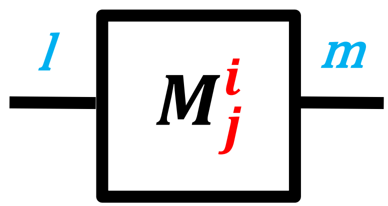


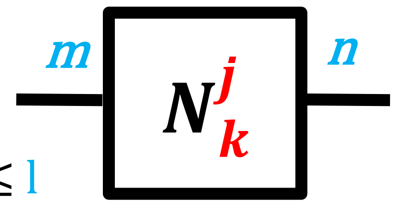
二つの
contraction
右に腕が一つ出た
m(行)ベクトルになる

m(行)ベクトルの成分
u^iとM^i_jの積。
ただし、jについて和をとる。



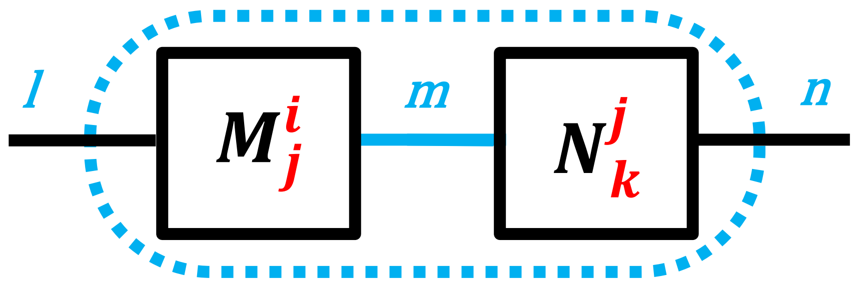
行列と行列の積の成分





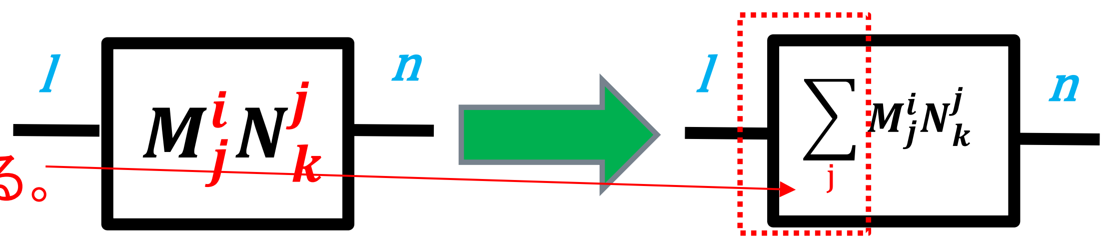
$1 \leq i \leq l$
$1 \leq j \leq m$
$1 \leq k \leq n$

i x m 行列と
m x n 行列の積



二つの
contraction
左右に腕が出た
l x n 行列になる

l x n 行列の成分
M^i_jとN^j_kの積。
ただし、jについて和をとる。



もう一つのノテーション

別のノテーション 0^k , あるいは $v_{[k]}$

$\mathbf{0}_i^{[k]}$, $\mathbf{0}^j_{[k]}$を、k番目の要素が1だが、それ以外の要素が全て0の列、あるいは行ベクトルとする。

基底ベクトルを |i> ≡ $0_i^{[k]}$, <j| ≡$0^j_{[k]}$と表すことができる。

$v_{[k]}$, $v^{[k]}$ を、ベクトルvの具体的なk版目の要素を表すものとする。

$$0^i_{[k]} v_i = v_{[k]}$$

$$\because\ 0^i_{[k]} v_i = \sum_{i \neq k} 0 \cdot \mathrm{v}_i + 1 \cdot v_{i=k} = v_{[k]}\ .$$

同様に、$v^j 0_j^{[k]} = v^{[k]}$

新しいノテーションでの
<m|M|n> = M_{mn} の証明

$$M^i_j 0^j_{[k]} = M^i_{[k]}$$

$$0^{[k]}_i M^i_j = M^{[k]}_j$$

$$0^{[m]}_i M^i_j 0^j_{[n]} = M^{[m]}_j 0^j_{[n]} = M^{[m]}_{[n]}$$