

第3章 ヒルベルト空間

本節では、量子系の理解のために必要な無限次元線形空間の理論であるヒルベルト空間の基本的事柄を概説する。

0.1 基本定理

数体 \mathbf{K} (実数体 \mathbf{R} または複素数体 \mathbf{C} ; これらをスカラー体ともいう) 上の線形空間の任意の元 $x, y, z \in X$ と任意の $\lambda \in \mathbf{K}$ に対して、

1. $\langle x, x \rangle \geq 0, = 0 \Leftrightarrow x = 0,$
2. $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle},$
3. $\langle x, \lambda y + z \rangle = \lambda \langle x, y \rangle + \langle x, z \rangle$

の条件を満たす数 $\langle x, y \rangle \in \mathbf{K}$ (スカラー値) が定まるとき、 $\langle x, y \rangle$ を x と y の内積といい、内積をもつ線形空間を内積空間という。ここで、 $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$ とおくと、次の重要な定理が成立する。

定理 1 (3.1) (シュワルツ (Schwarz) の不等式) 内積空間 X において、

$$|\langle x, y \rangle| \leq \|x\| \cdot \|y\| \quad (\forall x, y \in X)$$

が成立する。ここで等号の成立は、 x と y が線形従属のときである。

この不等式より、 $\|\cdot\|$ が X 上のノルムを定めることは容易に示される。すなわち、任意の $x, y, z \in X$, $\lambda \in \mathbf{K}$ に対して、

1. $\|x\| \geq 0, = 0 \Leftrightarrow x = 0,$
2. $\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|,$
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

が満たされる。

一般にノルム $\|\cdot\|$ をもつ線形空間をノルム空間という。ノルム空間 X において、点列 $\{x_n\} \subset X$ が $\|x_n - x_m\| \rightarrow 0$ ($m, n \rightarrow \infty$) のとき、 $\{x_n\}$ をコーシー (Cauchy) 列という。コーシー列 $\{x_n\}$ が常に収束するとき、すなわち $x \in X$ が存在し、 $\|x_n - x\| \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$) のとき、 X は完備であるという。さらに、完備なノルム空間をバナッハ (Banach) 空間という。

内積空間 X がノルム $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$ に関して完備であるとき、 X を ($\mathbf{K} = \mathbf{R}$ のとき実、 $\mathbf{K} = \mathbf{C}$ のとき複素) ヒルベルト (Hilbert) 空間という。以下、ヒルベルト空間を \mathcal{H} で表す。

定理 2 (3.2) (1) **中線定理** : 内積空間 X に対して,

$$\|x + y\|^2 + \|x - y\|^2 = 2(\|x\|^2 + \|y\|^2) \quad (\forall x, y \in X).$$

(2) 複素ノルム空間 X が (1) を満たすとき, 任意の $x, y \in X$ に対して, **偏極化**

$$\langle x, y \rangle = \frac{1}{4} \left(\|x + y\|^2 - \|x - y\|^2 + i \|ix + y\|^2 - i \|ix - y\|^2 \right)$$

によって, X 上に内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ が導入される. 逆に, 複素内積空間 X は常にこの等式を満たす. 特に, X がバナッハ空間で (1) を満たすとき, X はヒルベルト空間になる.

この定理の証明はここでは省略する (文献 [HY] 参照).

ここで, ヒルベルト空間 \mathcal{H} の例を四つ挙げておこう.

(例 1) $\mathcal{H} \equiv \mathbf{R}^n$, $\langle x, y \rangle \equiv \sum_{k=1}^n x_k y_k$.

(例 2) $\mathcal{H} \equiv \mathbf{C}^n$, $\langle x, y \rangle \equiv \sum_{k=1}^n \bar{x}_k y_k$.

(例 3) $l^2 \equiv \left\{ x = (x_1, x_2, \dots) \in \mathbf{K}^\infty; \sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2 < \infty \right\}$ は,

$$\langle x, y \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \bar{x}_k y_k \quad (\forall x, \forall y \in l^2)$$

を内積とするヒルベルト空間になる.

(例 4) $(\Omega, \mathfrak{F}, \mu)$ を測度空間, $M(\Omega)$ を (Ω, \mathfrak{F}) 上の可測関数全体とし, $f, g \in M(\Omega)$ に対して f, g の同値関係 $f \sim g$ を $f \sim g \Leftrightarrow \mu(\{\omega \in \Omega; f(\omega) \neq g(\omega)\}) = 0$ で定義する. このとき,

$$L^2(\Omega; \mu) \equiv \left\{ f \in M(\Omega) / \sim; \int_{\Omega} |f(\omega)|^2 d\mu(\omega) < +\infty \right\}$$

は,

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} \overline{f(\omega)} g(\omega) d\mu(\omega)$$

を内積とするヒルベルト空間になる.

ところで, 元 $x, y \in \mathcal{H}$ が $\langle x, y \rangle = 0$ のとき, x と y は**直交する**といい, $x \perp y$ で表す. $\langle x_i, x_j \rangle = 0$ ($i \neq j$) となる族 $\{x_j\} \subset \mathcal{H}$ を**直交系**といい, さらに $\|x_j\| = 1$ ($\forall j$) のとき, $\{x_j\}$ を**正規直交系** (orthonormal system; **ONS** と書く) という. $\langle x_j, x_j \rangle = 0$ ($\forall j$) ならば常に $x = 0$ のとき, $\{x_j\}$ を**完全** (complete) といい, **完全正規直交系**を **CONS** と書く. 可算個の CONS をもつヒルベルト空間を**可分なヒルベルト空間**といい, 以下, ヒルベルト空間の可分性を仮定する. ヒルベルト空間の可算個の元 $\{x_j; j \in \mathbf{N}\}$ に対して,

$x = \sum_{j=1}^{\infty} x_j$ とは, ある $x \in \mathcal{H}$ が存在して, 任意の $\varepsilon > 0$ に対して $n_0 \in \mathbf{N}$ が存在し, $\left\| \sum_{j=1}^n x_j - x \right\| < \varepsilon$ ($\forall n \geq n_0$) のことをいう. このとき, $x = \sum_{j=1}^{\infty} x_j$ を $\{x_j; j \in \mathbf{N}\}$ の和という. 以下, ヒルベルト空間における直交性と CONS に関する有用な結果を述べよう.

定理 3 (3.3) (グラム - シュミット (*Gram-Schmidt*) の直交化法) $\{x_n\} \subset \mathcal{H}$ を互いに線形独立な元の集合とする. このとき,

$$e_1 = \frac{x_1}{\|x_1\|},$$

$$e_n = \frac{y_n}{\|y_n\|}, y_n = x_n - \sum_{k=1}^{n-1} \langle e_k, x_n \rangle e_k \quad (n = 2, 3, \dots)$$

とおくと, $\{e_n; n \in \mathbf{N}\}$ は \mathcal{H} の ONS である.

ヒルベルト空間 \mathcal{H} において線形独立な元の集合はいくらでもとれる. したがって, 上述の直交化法を適用すれば, ONS はいくらでも構成できることになる. よって, CONS も必ず構成することができる.

定理 4 (3.4) (1) ピタゴラス: $x \perp y \Rightarrow \|x + y\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2$. (2) 有限な ONS $\{x_k\}$ ($k = 1, 2, \dots, n$) に対して,

$$\|x\|^2 = \left\| x - \sum_{k=1}^n \langle x_k, x \rangle x_k \right\|^2 + \sum_{k=1}^n |\langle x_k, x \rangle|^2.$$

(3) ベッセル (*Bessel*) の不等式: ONS $\{x_n\} \subset \mathcal{H}$ に対し,

$$\sum_n |\langle x_n, x \rangle|^2 \leq \|x\|^2.$$

定理 5 (3.5) (展開定理) ONS $\{x_n\} \subset \mathcal{H}$ と任意の $x, y \in \mathcal{H}$ に対し, 次は同値である: (1) $\{x_n\}$ が CONS. (2) フーリエ (*Fourier*) 展開: $x = \sum_n \langle x_n, x \rangle x_n$. (ここで $\langle x_n, x \rangle$ を x のフーリエ係数, 右辺をフーリエ級数, この等式を CONS $\{x_n\}$ による x のフーリエ展開という). (3) パーセヴァル (*Parseval*) の等式: $\langle x, y \rangle = \sum_n \langle x, x_n \rangle \langle x_n, y \rangle$. (4) リース - フィッシャー (*Riesz-Fischer*) の等式: $\|x\|^2 = \sum_n |\langle x_n, x \rangle|^2$.

さて, \mathcal{H} の線形部分空間を単に \mathcal{H} の部分空間といい, \mathcal{H} のノルム $\|\cdot\|$ で閉じている部分空間を \mathcal{H} の閉部分空間という. いま, \mathcal{K} を \mathcal{H} の任意の部分集合とすると, $\mathcal{K}^\perp \equiv \{x \in \mathcal{H}; \langle x, y \rangle = 0, \forall y \in \mathcal{K}\}$ は \mathcal{H} の閉部分空間となり, これを \mathcal{K} の直交補空間という. \mathcal{H} の二つの閉部分空間 \mathcal{K}, \mathcal{L} において,

$$\langle x, y \rangle = 0 \quad (\forall x \in \mathcal{K}, \forall y \in \mathcal{L})$$

であるとき、 \mathcal{K} と \mathcal{L} は互いに直交するといひ、 $\mathcal{K} \perp \mathcal{L}$ で表す。このとき、直和 $\mathcal{K} \oplus \mathcal{L} \equiv \{x + y; x \in \mathcal{K}, y \in \mathcal{L}\}$ も \mathcal{H} の閉部分空間となる。

定理 6 (3.6) (最短距離定理) \mathcal{K} が \mathcal{H} の閉部分空間であるとき、 $x \in \mathcal{H}$ に対して $d \equiv \mathbf{dist}(x, \mathcal{K}) \equiv \inf \{\|x - z\|; z \in \mathcal{K}\}$ とおくと、 $y \in \mathcal{K}$ が一意に存在して $d = \|x - y\|$ となる。(このとき、 $x \mapsto y$ を $y \equiv P_{\mathcal{K}}x$ とおき、 $P_{\mathcal{K}}$ を \mathcal{H} から \mathcal{K} への射影作用素という.)

定理 7 (3.7) (射影定理) \mathcal{K} が \mathcal{H} の閉部分空間であるとき、次が成立する：
(1) $x - P_{\mathcal{K}}x \in \mathcal{K}^{\perp}$. (2) 任意の $x \in \mathcal{H}$ は一意に $x = y + z$ ($y \in \mathcal{K}, z \in \mathcal{K}^{\perp}$) と表され、

$$y = P_{\mathcal{K}}x, z = P_{\mathcal{K}^{\perp}}x.$$

(3) $\mathcal{H} = \mathcal{K} \oplus \mathcal{K}^{\perp}$.

この定理の系として、次の (1)~(3) が成り立つ。

系 8 (3.8) (1) \mathcal{H} の部分集合 \mathcal{K} に対して、 $\mathcal{K}^{\perp\perp} = (\mathcal{K}^{\perp})^{\perp}$ は \mathcal{K} を含む最小の閉部分空間である。(2) $\text{ONS } \mathcal{K} = \{x_j\}$ が完全 (CONS) $\Leftrightarrow \mathcal{K}^{\perp} = \{0\} \Leftrightarrow \mathcal{K}^{\perp\perp} = \mathcal{H}$. (3) \mathcal{H} の閉部分空間 \mathcal{K} に対して、射影作用素 $P_{\mathcal{K}}$ は線形かつべき等 (i.e., $P_{\mathcal{K}}(\lambda x + \mu y) = \lambda P_{\mathcal{K}}x + \mu P_{\mathcal{K}}y$, $P_{\mathcal{K}}^2 = P_{\mathcal{K}}$).

\mathcal{H} 上で定義され \mathbf{K} に値をとる関数 f が

$$f(\lambda x + \mu y) = \lambda f(x) + \mu f(y) \quad (\forall x, y \in \mathcal{H}, \forall \lambda, \mu \in \mathbf{K})$$

のとき、 f を \mathcal{H} 上の線形汎関数という。

定理 9 (3.9) \mathcal{H} 上の線形汎関数 f に対して、次は同値である：(1) $M > 0$ が存在して $|f(x)| \leq M \|x\|$ ($\forall x \in \mathcal{H}$). (2) f は零元 $0 \in \mathcal{H}$ で連続。(3) f はある $x_0 \in \mathcal{H}$ で連続。(4) f はすべての $x \in \mathcal{H}$ で連続。

上の定理の条件を満たすとき、 f は有界であるという。 \mathcal{H} 上の有界線形汎関数の全体を \mathcal{H}^* で表す。

定理 10 (3.10) 任意の $f \in \mathcal{H}^*$ に対して、次が成立する：

$$\sup_{\|x\| \leq 1} |f(x)| = \sup_{\|x\|=1} |f(x)| = \sup_{\|x\| \neq 0} \frac{|f(x)|}{\|x\|} = \inf\{M > 0; |f(x)| \leq M \|x\|, \forall x \in \mathcal{H}\}.$$

これを $\|f\|$ とおき、 f のノルムという。

このノルムより \mathcal{H}^* はノルム空間になる。内積により定義される線形汎関数については、次の定理が成り立つ。

定理 11 (3.11) 任意の $x \in \mathcal{H}$ に対して, $f_x(y) = \langle x, y \rangle$ ($y \in \mathcal{H}$) とおくと, $f_x \in \mathcal{H}^*$ であり, $\|f_x\| = \|x\|$.

定理 12 (3.12) (リーズ (Riesz) の定理) 各 $f \in \mathcal{H}^*$ に対して, $x_f \in \mathcal{H}$ が一意に存在して

$$f(y) = \langle x_f, y \rangle \quad (\forall y \in \mathcal{H}).$$

対応 $x \in \mathcal{H} \mapsto f_x \in \mathcal{H}^*$ は共役線形 (i.e., $f_{\lambda x} = \bar{\lambda} f_x$) な等距離写像 (i.e. $\|f_x\| = \|x\|$) であるから, \mathcal{H} が実ヒルベルト空間ならば $\mathcal{H} = \mathcal{H}^*$ である. さらに x と f_x を同一視することにより, \mathcal{H} が複素ヒルベルト空間の場合でも $\mathcal{H} = \mathcal{H}^*$ と考えてよい [UO1,UOH,HY].

0.2 直和ヒルベルト空間とテンソル積ヒルベルト空間

この節では, 二つのヒルベルト空間 \mathcal{H} と \mathcal{K} の直和とテンソル積について論じよう. \mathcal{H} と \mathcal{K} の直和

$$\mathcal{H} \oplus \mathcal{K} \equiv \{x \oplus y; x \in \mathcal{H}, y \in \mathcal{K}\}$$

は,

$$x_1 \oplus y_1 + x_2 \oplus y_2 \equiv (x_1 + x_2) \oplus (y_1 + y_2),$$

$$\lambda(x \oplus y) \equiv \lambda x \oplus \lambda y$$

によって線形空間となる. また,

$$\langle x_1 \oplus y_1, x_2 \oplus y_2 \rangle \equiv \langle x_1, x_2 \rangle + \langle y_1, y_2 \rangle$$

は内積の条件を満たし, これにより $\mathcal{H} \oplus \mathcal{K}$ はヒルベルト空間になる. これを \mathcal{H} と \mathcal{K} の直和ヒルベルト空間という. ここで $x = x \oplus \mathbf{0}$ ($x \in \mathcal{H}$), $y = \mathbf{0} \oplus y$ ($y \in \mathcal{K}$) と同一視すると, \mathcal{H}, \mathcal{K} は $\mathcal{H} \oplus \mathcal{K}$ の閉部分空間となり, $\mathcal{H}^\perp = \mathcal{K}$, $\mathcal{K}^\perp = \mathcal{H}$ の関係にある. 無限個のヒルベルト空間の直和も, 同様の仕方で定義される.

二つのヒルベルト空間 \mathcal{H} と \mathcal{K} と, $x \in \mathcal{H}$, $y \in \mathcal{K}$ に対して, 直積空間

$$\mathcal{H} \times \mathcal{K} \equiv \{(u, v); u \in \mathcal{H}, v \in \mathcal{K}\}$$

上の共役双線形な汎関数 $x \otimes y$ を

$$x \otimes y(u, v) \equiv \langle u, x \rangle \langle v, y \rangle$$

で定める. このような共役双線形な汎関数の有限個の線形結合全体のなす線形空間を $\mathcal{H} \odot \mathcal{K}$ で表す. $f = \sum_{i=1}^n \lambda_i x_i \otimes y_i$, $g = \sum_{k=1}^m \mu_k u_k \otimes v_k \in \mathcal{H} \odot \mathcal{K}$ に対して

$$\langle f, g \rangle \equiv \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^m \overline{\lambda_i} \mu_k \langle x_i, u_k \rangle \langle y_i, v_k \rangle$$

と定める.

定理 13 (3.13) 上の $\langle f, g \rangle$ は f, g の表現に無関係に定まる $\mathcal{H} \odot \mathcal{K}$ 上の内積である.

\mathcal{H}, \mathcal{K} をこの内積で完備化したヒルベルト空間を \mathcal{H} と \mathcal{K} のテンソル積ヒルベルト空間といい, $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ で表す. ところで $\{x_i\}$ を \mathcal{H} の CONS, $\{y_k\}$ を \mathcal{K} の CONS とすると $\{x_i \otimes y_k\}$ が $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ の CONS となることが容易にわかる.

0.3 有界作用素

線形空間 \mathbf{R}^n 上の行列を無限次元線形空間であるヒルベルト空間に一般化したものが以下で述べる線形作用素である.

以下, ヒルベルト空間は, 特に断わらない限り複素ヒルベルト空間とする.

\mathcal{H}, \mathcal{K} をヒルベルト空間とし, \mathcal{D} を \mathcal{H} の部分空間とする. \mathcal{D} 上で定義され, \mathcal{K} に値をとる写像 A が

$$A(\lambda x + \mu y) = \lambda Ax + \mu Ay \quad (\forall x, y \in \mathcal{D}, \forall \lambda, \mu \in \mathbf{C})$$

を満たすとき, A を \mathcal{H} から \mathcal{K} への線形作用素または単に作用素という. \mathcal{D} を A の定義域といい, $\text{dom } A$ で表す. また, 集合 $\{Ax; x \in \mathcal{D}\}$ を A の値域といい, $\text{ran } A$ で表す. 作用素 A で, $\text{dom } A = \mathcal{H}$ かつ定数 $M > 0$ が存在して

$$\|Ax\| \leq M \|x\| \quad (\forall x \in \mathcal{H})$$

を満たすとき, A を \mathcal{H} から \mathcal{K} への有界作用素という. このような A の全体を $\mathbf{B}(\mathcal{H}, \mathcal{K})$ で表す. $\mathbf{B}(\mathcal{H}, \mathcal{K})$ における線形演算を

$$(\lambda A + \mu B)x \equiv \lambda Ax + \mu Bx \quad (x \in \mathcal{H}, A, B \in \mathbf{B}(\mathcal{H}, \mathcal{K}), \lambda, \mu \in \mathbf{C})$$

で定義し, $A \in \mathbf{B}(\mathcal{H}, \mathcal{K})$ のノルムを

$$\begin{aligned}\|A\| &\equiv \sup_{\|x\| \leq 1} \|Ax\| = \inf \{M > 0; \|Ax\| \leq M \|x\| (\forall x \in \mathcal{H})\} \\ &= \sup \{\|Ax\|; \|x\| = 1, x \in \mathcal{H}\}\end{aligned}$$

で定めることによって, $\mathbf{B}(\mathcal{H}, \mathcal{K})$ はバナッハ空間になる.

定理 14 (3.14) $F : \mathcal{H} \times \mathcal{K} \rightarrow \mathbf{C}$ が双線形汎関数 (i.e., $F(x, y)$ が x について共役線形, y について線形) であり, 有界 (i.e., $M > 0$ が存在して $|F(x, y)| \leq M \|x\| \|y\|, \forall x \in \mathcal{H}, \forall y \in \mathcal{K}$) であるとき, $A \in \mathbf{B}(\mathcal{K}, \mathcal{H})$ と $B \in \mathbf{B}(\mathcal{H}, \mathcal{K})$ が一意に存在して,

$$F(x, y) = \langle x, Ay \rangle = \langle Bx, y \rangle \quad (\forall x \in \mathcal{H}, \forall y \in \mathcal{K})$$

となる.

以下, $\mathcal{H} = \mathcal{K}$ の場合, すなわち $\mathbf{B}(\mathcal{H}, \mathcal{H})$ を $\mathbf{B}(\mathcal{H})$ で表す.

系 15 (3.15) 作用素 $A \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$ に対して, 作用素 $A^* \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$ が一意に存在して

$$\langle x, Ay \rangle = \langle A^*x, y \rangle \quad (\forall x, y \in \mathcal{H}).$$

この A^* を A の共役作用素という. 特に $A = A^*$ のとき, A を自己共役という. 任意の $x \in \mathcal{H}$ に対して, $\langle x, Ax \rangle \geq 0$ のとき, A を正作用素といい, $A \geq 0$ で表す. $A \geq 0$ のとき, 正の作用素 B が存在して $A = B^2$ と書ける. この B を \sqrt{A} で表す. 正作用素は自己共役である (このことは, 実ヒルベルト空間では成立しない [UO2, HY]).

次の作用素 $A \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$ は重要である:

- (1) A が正規作用素 $\stackrel{def}{\Leftrightarrow} A^*A = AA^*$,
- (2) A が射影作用素 $\stackrel{def}{\Leftrightarrow} A = A^* = A^2$,
- (3) A が等距離作用素 $\stackrel{def}{\Leftrightarrow} \|Ax\| = \|x\| \quad (\forall x \in \mathcal{H})$,
- (4) A がユニタリー作用素 $\stackrel{def}{\Leftrightarrow} A^*A = AA^* = I$ (ただし, I は \mathcal{H} 上の恒等作用素),
- (5) A が半等距離作用素 $\stackrel{def}{\Leftrightarrow} A$ が $(\ker A)^\perp$ 上で等距離作用素 (ただし, $\ker A \equiv \{x \in \mathcal{H}; Ax = 0\}$).

問題 16 $A^*A \geq 0$ かつ $\|A^*\| = \|A\| = \|A^*A\|^{1/2}$ ($\forall A \in \mathbf{B}(\mathcal{H})$) を証明せよ.