

Appendix: Linear algebra Masato Koashi

1. Complex linear space (複素線形空間)

\mathbb{C} : The set of complex numbers (複素数の集合)

複素線形空間とは、ある構造を持った集合の呼び名で、その集合の要素をとくにベクトルと呼ぶ。
その構造とは...ベクトルどうしの足し算と、スカラー倍(複素数を掛ける操作)がちゃんと定義されているということ。

ちゃんと定義を書くと次のようになる。

♣ A complex linear space [a linear space over \mathbb{C} (\mathbb{C} 上の線形空間), a vector space over \mathbb{C} (\mathbb{C} 上のベクトル空間)] is a set V with the following operations,

- sum (和) : $a + b \in V$ ($a, b \in V$),
- scalar multiple (スカラー倍) :
 $\alpha a \in V$ ($\alpha \in \mathbb{C}, a \in V$),

which satisfy the properties i)–viii).

i) $a + (b + c) = (a + b) + c$

ii) zero element (零元)

$$\exists 0 \in V; \forall a \in V; a + 0 = 0 + a = a$$

iii) inverse element (逆元)

$$\forall a \in V; \exists x (= -a) \in V; a + x = x + a = 0$$

iv) $a + b = b + a$

v) $\alpha(a + b) = \alpha a + \alpha b$

vi) $(\alpha + \beta)a = \alpha a + \beta a$

vii) $(\alpha\beta)a = \alpha(\beta a)$

viii) $1a = a$

♣ Elements of a linear space is called **vectors**.

部分空間とは...複素線形空間 V の部分集合で、それ自身が線形空間になっているもの。つまり、足し算やスカラー倍の結果が部分集合の外に出なければよい。

♣ A subset of V is called a **subspace** (部分空間) when it is a linear space itself.

◇ Any nonempty subset of V which is closed under addition and scalar multiplication is a subspace.

◇ An intersection of subspaces is a subspace.

Basis (基底) and dimension (次元)

線形空間の元を何個か集めた集合について、次の概念を思い出そう。

「ベクトルの集合 $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ の線形結合」

—足し算とスカラー倍の組み合わせで作ったベクトルを指す。一般に、次の形。

$$a = \alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 + \dots + \alpha_n a_n$$

「集合 $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ は線形独立である」

—その集合のどの要素も、自分以外の要素の線形結合で書けない場合。

「集合 $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ は線形従属である」

—線形独立の逆。ある要素が、自分以外の要素の線形結合で書ける場合。

「集合 $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ のスパン」

—集合 A の線形結合の形に書けるベクトルを全部集めると、それは部分空間になる。これを A のスパンと呼ぶ。 A によって生成される部分空間ともいう。

♣ We say a subset $A \subset V$ is **linearly independent** (線形独立) when

$$\begin{aligned} &\alpha_j \in \mathbb{C} (j = 1, \dots, k), \{b_1, b_2, \dots, b_k\} \subset A; \\ &\alpha_1 b_1 + \alpha_2 b_2 + \dots + \alpha_k b_k = 0 \\ &\implies (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) = (0, 0, \dots, 0). \end{aligned}$$

♣ We say a subset $A \subset V$ is **linearly dependent** (線形従属) when it is not linearly independent.

♡ $A \subset V$ is linearly dependent iff

$$\begin{aligned} &\exists k \geq 1; \exists \alpha_j (\neq 0) \in \mathbb{C} (j = 1, \dots, k), \\ &\exists \{b_1, b_2, \dots, b_k\} \subset A; \\ &\alpha_1 b_1 + \alpha_2 b_2 + \dots + \alpha_k b_k = 0. \end{aligned}$$

• The intersection of all the subspaces including a set $A \subset V$ is called the **span** of A (or the subspace generated by A).

♡ A vector b is in the span of A iff

$$\begin{aligned} &\exists k; \exists \alpha_j \in \mathbb{C}, \exists b_j \in A (j = 1, \dots, k); \\ &b = \alpha_1 b_1 + \alpha_2 b_2 + \dots + \alpha_k b_k \end{aligned}$$

(We say b is a **linear combination** (線形結合) of A in this case.)

線形空間 V のベクトルの集合で、
 「線形独立」
 「ベクトルを追加すると必ず線形従属になる」
 の両方を満足するものを V の基底と呼ぶ。言
 いかえれば、線形独立で、スパンが V 。
 基底 B が与えられると、 V の任意の元は、 B
 の線形結合の形に一意に書ける。

♣ A linearly independent set whose span is the whole space V is called a **basis** of V .

◇ When B is a basis of V , any element $a \in V$ is uniquely decomposed as

$$a = \alpha_1 b_1 + \alpha_2 b_2 + \cdots + \alpha_k b_k$$

$$[\alpha_j \in \mathbb{C}, b_j \in B (j = 1, \dots, k)].$$

証明のヒント： V が B のスパンだから、 a を B の線形結合で書く方法が必ずある。もし書き方が2種類以上あったら、 B が線形従属になってしまうことが簡単に示せる。

どんな線形空間でも基底は必ず存在する。それだけではなく、線形独立な集合があれば、いつでもそれにベクトルを追加して基底を作れる。

線形空間の基底はたくさんの種類があるが、どの基底もベクトルの個数は同じ。この数を線形空間の次元と呼ぶ。

一般には、次元が無限のこともあるが、以後は次元が有限の場合だけを考える。

◇ Every linear space has a basis.

◇ For any linearly independent set A of vectors in V , there exists a basis B of V including those vectors ($A \subset B$).

証明のヒント： A の線形結合で書けない(スパンに含まれない)ベクトル v があったら、それを A に追加した集合 $A + \{v\}$ は線形独立。これを繰り返せば最後には基底が完成するはず。(無限次元の場合は「無限」に絡んだ注意が必要なのでちょっと難しくなる。)

♡ All the bases of a linear space V have the same cardinality (濃度) .

集合の濃度とは、有限集合の場合は要素の数のこと。

♣ The cardinality of a basis of V is called the (Hamel) **dimension** (次元) of V (denoted by $\dim V$).

♣ When $\dim V$ is finite, we say V is **finite dimensional** (有限次元) .

• When $\dim V$ is infinite, we say V is **infinite dimensional** (無限次元) .

基底の要素の数が一定という上の定理は、次の定理からすぐに証明できる。

♡ If

i) V is the span of A ,

ii) $B \subset V$ is linearly independent, then $|A| \geq |B|$. ($|X|$ is the cardinality of a set X .)

$n := |A|$ が有限の場合の証明のヒント： $|B| \geq n + 1$ だとすると、どうしても B は線形従属になることが次のように示せる。

： B の要素 b_1 をとる。 $A + \{b_1\}$ は線形従属で、 $\{b_1\}$ は線形独立ということから、 A のある要素 a_1 が他の要素と b_1 の線形結合で書けることが示せる。すると、 a_1 を取り除いてもスパンは変わらないことになり、 $A + \{b_1\} - \{a_1\}$ のスパンは V だということがわかる。

： B の別の要素 b_2 をとる。 $A - \{a_1\} + \{b_1, b_2\}$ は線形従属で、 $\{b_1, b_2\}$ は線形独立ということから、 $A - \{a_1\}$ のある要素 a_2 が他の要素と b_1, b_2 の線形結合で書けることが示せる。すると、 a_2 を取り除いてもスパンは変わらないことになり、 $A + \{b_1, b_2\} - \{a_1, a_2\}$ のスパンは V だということがわかる。

：上の手続きを n 回繰り返すと、 $\{b_1, b_2, \dots, b_n\}$ のスパンが V という結論になる。 $\{b_1, b_2, \dots, b_n, b_{n+1}\}$ は線形従属。 B も線形従属。

2. Inner product space (内積空間)

二つのベクトル u, v に対して、下の i)–v) のルールに沿って複素数を対応させる写像を内積とよぶ。

内積の定義された線形空間を内積空間とよぶ。

内積の計算は i)–iii) のルールを使えばよい。
 $(\alpha a, b) = \bar{\alpha}(a, b)$ に注意。

同じベクトルどうしの内積 (a, a) は正の実数またはゼロで、その平方根を $\|a\|$ と書いてノルムとよぶ。これはベクトルの長さ、大きさだと思えばよい。

ノルムがゼロのベクトルは零ベクトルだけ。

内積がゼロの2つのベクトルは互いに直交するという。そうでない場合は非直交であるという。

♣ An **inner product space** is a linear space V over \mathbb{C} together with a map $(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ called **inner product** (内積) , satisfying

i) $(a, b) = \overline{(b, a)}$

ii) $(a, b_1 + b_2) = (a, b_1) + (a, b_2)$

iii) $(a, \alpha b) = \alpha(a, b)$

iv) $(a, a) \geq 0$

v) $(a, a) = 0$ iff $a = 0$

♣ When $(a, b) = 0$, we say a is **orthogonal** (直交) to b (b is orthogonal to a , a and b are orthogonal to each other).

♣ When $(a, b) \neq 0$, we say a and b are **nonorthogonal** (非直交) (to each other).

♣ $\|a\| := \sqrt{(a, a)}$ is called the **norm** (ノルム) defined by the inner product.

ノルムが1のベクトルの集合で、どの組み合わせも互いに直交するものを正規直交系とよぶ。

正規直交系は線形独立。
逆に、任意の線形独立な集合から、同じ個数で同じスパンを持つ正規直交系を作れる。(グラムシュミットの直交化)

♣ A subset X of an inner product space is called an **orthonormal set** (正規直交系) when for any $a, b \in X$,

- i) $(a, a) = 1$ ($\|a\| = 1$),
- ii) $(a, b) = 0$ if $a \neq b$.

♡ An orthonormal set is linearly independent.
◇ (Gram-Schmidt orthogonalization (直交化))
Suppose that $\{a_1, a_2, \dots, a_n, \dots\}$ is linearly independent. Define

$$\begin{aligned} v_1 &= a_1, & u_1 &= v_1 / \|v_1\| \\ v_2 &= a_2 - (u_1, a_2)u_1, & u_2 &= v_2 / \|v_2\| \\ &\dots & \dots & \\ v_n &= a_n - \sum_{k=1}^{n-1} (u_k, a_n)u_k, & u_n &= v_n / \|v_n\|, \end{aligned}$$

which is well-defined since all $v_j \neq 0$.
For every m , $\{u_j\}_{j=1}^m$ is an orthonormal set and its span is the same as that of $\{a_j\}_{j=1}^m$.

コーシーシュワルツの不等式
 $|(a, b)| \leq \|a\| \|b\|$
等号は a と b がスカラー倍の関係にあるときだけ。

◇ (Pythagorean theorem) Let $\{u_1, \dots, u_n\}$ be an orthonormal set in an inner product space V . Then for all $a \in V$,

$$\|a\|^2 = \sum_{k=1}^n |(u_k, a)|^2 + \left\| a - \sum_{k=1}^n (u_k, a)u_k \right\|^2$$

◇ (Bessel's inequality)

$$\|a\|^2 \geq \sum_{k=1}^n |(u_k, a)|^2$$

♡ (Cauchy-Schwarz inequality)

$$|(a, b)| \leq \|a\| \|b\|$$

The equality holds iff $\{a, b\}$ is linearly dependent ($b = 0$ or $a = \alpha b$, $\alpha \in \mathbb{C}$).

$b \neq 0$ のときの証明は、計算ですぐ確かめられる次の式を使う。

$$\left\| a - \frac{(b, a)}{\|b\|^2} b \right\|^2 = \|a\|^2 - \frac{|(a, b)|^2}{\|b\|^2}$$

◇ $\|a\| := \sqrt{(a, a)}$ satisfies

- i) $\|a\| = 0$ iff $a = 0$
- ii) $\|\alpha a\| = |\alpha| \|a\|$
- iii) $\|a + b\| \leq \|a\| + \|b\|$

Every inner product space is a normed linear space (ノルム空間) with the norm $\|a\|$.

◇ $d(a, b) := \|a - b\|$ satisfies

- i) $d(x, y) = 0$ iff $x = y$
- ii) $d(x, y) = d(y, x)$
- iii) $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$

Every inner product space is a metric space (距離空間) with the metric (距離、計量) $d(a, b)$.

3. Hilbert space (ヒルベルト空間)

有限次元の内積空間は、ヒルベルト空間とも呼ばれる。
(無限次元の場合はある条件(完備)を満たす内積空間をヒルベルト空間とよぶ。)

• We say a normed linear space V is **complete** (完備) when

$$\begin{aligned} \|x_n - x_m\| &\rightarrow 0 (n, m \rightarrow \infty) \\ \implies \lim x_n &= x \in V \end{aligned}$$

• A **Hilbert space** \mathcal{H} is an inner product space that is complete with respect to the norm defined by the inner product.

♡ If an inner product space is finite dimensional, it is a Hilbert space.

ヒルベルト空間 \mathcal{H} のベクトルの集合で、
 「正規直交系である」
 「ベクトルを追加すると必ず正規直交系ではなくなる」
 の両方を満足するものを正規直交基底とよぶ。
 どんな正規直交系も、ベクトルを追加して正規直交基底にできる。

$\{u_1, \dots, u_d\}$ が正規直交基底なら、任意のベクトルは

$$a = \sum_{j=1}^d (u_j, a) u_j$$

と分解できる。(有限次元なら、正規直交基底は線形空間 \mathcal{H} の基底でもある。)

ノルムについては、パーセバルの等式

$$\|a\|^2 = \sum_{j=1}^d |(u_j, a)|^2$$

が成り立つ。

ヒルベルト空間 \mathcal{H} の正規直交基底の要素の数は一定で、ヒルベルト空間 \mathcal{H} の次元と呼ぶ。(有限次元なら、これは線形空間としての次元に等しい。)

♣ If S is an orthonormal set in a Hilbert space \mathcal{H} and no other orthonormal set contains S as a proper subset, then S is called an **orthonormal basis** (正規直交基底) (or a **complete orthonormal system** (完全正規直交系)) of \mathcal{H} .

◇ Every Hilbert space has a basis.

◇ For any orthonormal set A of vectors in a Hilbert space \mathcal{H} , there exists a basis S of \mathcal{H} that contains A ($A \subset S$).

♡ Let $S = \{u_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$ be an orthonormal basis of \mathcal{H} . Then, for each $a \in \mathcal{H}$,

$$a = \sum_{\lambda \in \Lambda} (u_\lambda, a) u_\lambda$$

♡ (Parseval's identity)

$$\|a\|^2 = \sum_{\lambda \in \Lambda} |(u_\lambda, a)|^2$$

♡ All orthogonal bases of a Hilbert space \mathcal{H} have the same cardinality.

♣ The cardinality of an orthonormal basis of a Hilbert space \mathcal{H} is called the (Hilbert) **dimension** (次元) of \mathcal{H} (denoted by $\dim \mathcal{H}$).

♡ When the Hamel dimension is finite, Hilbert dimension = Hamel dimension.

◇ When the Hamel dimension is infinite, the Hilbert dimension is infinite and

Hilbert dimension \leq Hamel dimension.

• We say a Hilbert space is **separable** (可分) when it has a countable orthogonal basis.

4. Linear operators (線形演算子)

In the following, Hilbert spaces $(\mathcal{H}, \mathcal{H}_1, \dots)$ are assumed to be finite dimensional.

ヒルベルト空間からヒルベルト空間への写像 $T : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ で、和とスカラー倍の関係を保存するもの、つまり、下の (1) 式を満たすものを線形写像または線形演算子とよぶ。

複素数の集合 \mathbb{C} は、内積 $(\alpha, \beta) := \bar{\alpha}\beta$ が定義された次元 1 のヒルベルト空間と見なせる。

ヒルベルト空間から \mathbb{C} への線形写像をとくに線形汎関数とよぶ。

$T : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ に関して、 \mathcal{H}_1 の部分空間

$\text{Ker } T := \{x \in \mathcal{H}_1 : T(x) = 0\}$

を **kernel** (核) とよび、 \mathcal{H}_2 の部分空間

$\text{Ran } T := \{T(x) : x \in \mathcal{H}_1\}$

を **range** (値域) とよぶ。

range の次元を T の **ランク** とよぶ。

$\dim(\text{Ker } T) + \dim(\text{Ran } T) = \dim \mathcal{H}_1$

♣ We say a mapping $T : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ is a **linear operator** when

$$T(\alpha a + \beta b) = \alpha T(a) + \beta T(b) \quad (1)$$

for all $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ and $a, b \in \mathcal{H}_1$.

♡ \mathbb{C} is a Hilbert space of dimension 1 with the inner product $(\alpha, \beta) := \bar{\alpha}\beta$.

♣ A linear operator $f : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ is called a **linear functional** (線形汎関数).

♣ For a linear operator $T : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$,

• The subspace of \mathcal{H}_1 , $\text{Ker } T := \{x \in \mathcal{H}_1 : T(x) = 0\}$, is called the **kernel** (核) of T .

• The subspace of \mathcal{H}_2 , $\text{Ran } T := \{T(x) : x \in \mathcal{H}_1\}$, is called the **range** (値域) or the **image** (像) of T .

• The dimension of $\text{Ran } T$ is called the **rank** of T .

• The **operator norm** of $T : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ is defined as

$$\|T\| := \sup_{x \in \mathcal{H}_1 : \|x\|=1} \|T(x)\| = \sup_{x \in \mathcal{H}_1 : x \neq 0} \frac{\|T(x)\|}{\|x\|}$$

- ◇ $\|T(x)\| \leq \|T\| \|x\|$.
- For $A \subset \mathcal{H}$, we define the subspace $A^\perp := \{x \in \mathcal{H} : \forall a \in A; (a, x) = 0\}$.
- ◇ $A \subset B \Rightarrow A^\perp \supset B^\perp$
- ◇ $(A^\perp)^\perp \supset A$
- ◇ $A \subset B^\perp \Rightarrow A^\perp \supset B$
- When A is a subspace of \mathcal{H} , we say A^\perp is the **orthogonal complement** (直交補空間) of A .
- ◇ When A is a subspace of \mathcal{H} , $A \cap A^\perp = \{0\}$.
- ◇ (**Projection theorem**) When A is a subspace of \mathcal{H} , every $x \in \mathcal{H}$ can be uniquely written as $x = z + w$ where $z \in A$ and $w \in A^\perp$. ($\mathcal{H} = A \oplus A^\perp$)
- ◇ When A is a subspace of \mathcal{H} , $\dim A + \dim A^\perp = \dim \mathcal{H}$.
- ◇ When A is a subspace of \mathcal{H} , $(A^\perp)^\perp = A$.
- ♡ Suppose that $\dim \mathcal{H}_1 = d$. For every linear operator $T : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, $\dim(\text{Ker } T) + \dim(\text{Ran } T) = d$.

ヒルベルト空間 \mathcal{H} のベクトル y を固定したとき、入力 $x \in \mathcal{H}$ に対して複素数 (y, x) を返す写像は線形汎関数である。

逆に、任意の線形汎関数 $f : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ は、あるベクトル $y_f \in \mathcal{H}$ を用いて $f(x) = (y_f, x)$ と書ける。 f に対応する y_f は一意に決まる (リースの補題)。

♡ (**Riesz lemma**) For each linear functional $f : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$, there is a unique $y_f \in \mathcal{H}$ such that $\|f\| = \|y_f\|$ and

$$f(x) = (y_f, x).$$

証明のヒント : y_f の存在を示すには、正規直交基底 $\{u_j\}$ を考え、 $y_f = \sum_j \overline{f(u_j)} u_j$ とおく。一意性は、 y'_f も $f(x) = (y'_f, x)$ を満たすとすると、 $z := y_f - y'_f$ は、全ての $x \in \mathcal{H}$ について $(z, x) = 0$ を満たすことになるが、そのような z は $z = 0$ だけ。

• The set \mathcal{H}^* of all linear functionals $f : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ is called the **dual space** (双対空間) of \mathcal{H} .

ディラックの記法

ベクトル $x \in \mathcal{H}$ を $|x\rangle$ と書く。これはケットベクトルと呼ばれる。

線形演算子 T は、ハットをつけて \hat{T} と書くことが多い。さらに、引数の括弧を省き、常に右側に作用すると考える。つまり、 $T(x)$ と書くかわりに $\hat{T}|x\rangle$ と書く。 $U(T(x))$ も単に $\hat{U}\hat{T}|x\rangle$ と書く。

入力 $x \in \mathcal{H}$ に対して複素数 (y, x) を返す線形汎関数を、 $\langle y|$ と書く。これはブラベクトルと呼ばれる。

内積 (y, x) を、 $\langle y|x\rangle$ と書く。これは、 $\langle y|$ を $|x\rangle$ に作用させたと解釈してもよい。

例 : $(y, T(x))$ は、 $\langle y|\hat{T}|x\rangle$ と書ける。

例 : $|z\rangle\langle y|$ をベクトル $|x\rangle$ に作用させると、 $|z\rangle\langle y|x\rangle$ となる。ここで、 $\langle y|x\rangle$ は複素数だから、この出力もベクトルである。つまり、 $|z\rangle\langle y|$ は $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ の線形演算子と見なせる。

♣ Dirac notation

$a \in \mathcal{H}$ is denoted by $|a\rangle$, called a **ket vector**.

$(a, \cdot) \in \mathcal{H}^*$ is denoted by $\langle a|$, called a **bra vector**.

The inner product (a, b) is denoted by $\langle a|b\rangle$.

We often denote a linear operator with a hat ($\hat{\cdot}$), like $\hat{T} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$.

$$\hat{T}|a\rangle := T(a).$$

$$\langle b|\hat{T}|a\rangle = (b, T(a)).$$

A ket vector $|a\rangle$ can be regarded as a linear operator $T_a : \mathbb{C} \rightarrow \mathcal{H}$, defined by $T_a(\alpha) := \alpha|a\rangle$ for $\alpha \in \mathbb{C}$.

$|a\rangle\langle b|$ is a linear operator : $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$.

$$(|a\rangle\langle b|)|c\rangle = (b, c)a.$$

$\{u_1, \dots, u_d\}$ が \mathcal{H} の正規直交基底であるとき、

$$\sum_{j=1}^d |u_j\rangle\langle u_j| = \hat{1}$$

が成り立つ。右辺 $\hat{1}$ は恒等演算子 (入力そのまま出力になる) である。この関係を **Completeness (closure) relation** と呼ぶ。

式の好きな場所に左辺の和の形を挿入しても式は不変である。

例 :

$$\langle c|\hat{A}|b\rangle = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \langle c|u_i\rangle\langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle\langle u_j|b\rangle \quad (2)$$

♡ (Completeness relation, closure relation)

When $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_d\rangle\}$ is an orthonormal basis,

$$\sum_{j=1}^d |u_j\rangle\langle u_j| = \hat{1},$$

where $\hat{1}$ is the identity operator (恒等演算子) .

証明のヒント : どんなベクトル $|\phi\rangle$ も、正規直交基底で $|\phi\rangle = \sum_{j=1}^d |u_j\rangle\langle u_j|\phi\rangle$ と展開できることを思いだそう。

行列表現

\mathcal{H} の正規直交基底 $\{u_1, \dots, u_d\}$ をひとつ固定する。このとき、

$|b\rangle$ に対して d 次元の列ベクトル (第 j 成分が $b_j := \langle u_j | b \rangle$) を対応させる。 $|b\rangle = \sum_j b_j |u_j\rangle$

$\langle c|$ に対して d 次元の行ベクトル (第 i 成分が $c_i := \langle c | u_i \rangle$) を対応させる。 $\langle c| = \sum_i c_i \langle u_i |$

$\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ に対して $d \times d$ 行列 $[(i, j)$ 成分が $A_{ij} := \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle$] を対応させる。

$$\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} |u_i\rangle \langle u_j|$$

すると、 $\langle c | \hat{A} | b \rangle = \sum_{i,j} c_i A_{ij} b_j$ のように、全ての計算は行列の計算のルールに従う。

♡ (Matrix representation)

Fix an orthonormal basis $\{u_1, \dots, u_d\}$ for \mathcal{H} .

ket $|b\rangle \Rightarrow b_j := \langle u_j | b \rangle$ (column vector)

$$|b\rangle = \sum_j b_j |u_j\rangle$$

bra $\langle c| \Rightarrow c_i := \langle c | u_i \rangle$ (row vector)

$$\langle c| = \sum_i c_i \langle u_i |$$

operator $\hat{A} \Rightarrow A_{ij} := \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle$ ($d \times d$ matrix)

$$\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} |u_i\rangle \langle u_j|$$

線形演算子 $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ を考える。任意の $x \in \mathcal{H}_1$ 、 $y \in \mathcal{H}_2$ について、

$$(A^\dagger(y), x) = (y, A(x)) \quad (3)$$

を満たすような線形演算子 $A^\dagger : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1$ が、リースの補題により一意に定まる。この A^\dagger を A の随伴演算子 (adjoint) と呼ぶ。

随伴演算子の随伴演算子はもとの演算子である。つまり、 $(A^\dagger)^\dagger = A$ 。

$$(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger.$$

$$(BC)^\dagger = C^\dagger B^\dagger. \text{ 順番に注意。}$$

ケットベクトル $|a\rangle$ は、複素数 $\beta \in \mathbb{C}$ の入力に対して $\beta|a\rangle \in \mathcal{H}$ を出力する線形演算子 $\mathbb{C} \rightarrow \mathcal{H}$ と見なしてもよい。すると、 $(|a\rangle)^\dagger = \langle a|$ 、つまり、ケットとブラは互いに随伴演算子の関係。

複素数 α は、複素数 $\beta \in \mathbb{C}$ の入力に対して $\alpha\beta \in \mathbb{C}$ を出力する線形演算子 $\mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ と見なしてもよい。すると、 $(\alpha)^\dagger = \bar{\alpha}$ 、つまり、随伴演算子は複素共役に相当。

随伴演算子 A^\dagger の行列表現は？

(i, j) 成分の複素共役を計算すると、

$$\begin{aligned} \langle u_i | \hat{A}^\dagger | u_j \rangle &= (\langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle)^\dagger \\ &= (|u_j\rangle)^\dagger (\hat{A}^\dagger)^\dagger (\langle u_i |)^\dagger = \langle u_j | \hat{A} | u_i \rangle \end{aligned}$$

となり、 \hat{A} の行列表現の (j, i) 成分に等しい。つまり、随伴演算子の行列はもとの演算子の行列の転置複素共役をとったもの。

♡ Let $A : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ be a linear operator. There is a unique linear operator $A^\dagger : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1$ satisfying

$$(A^\dagger(y), x) = (y, A(x))$$

for all $x \in \mathcal{H}_1$ and all $y \in \mathcal{H}_2$. A^\dagger is called the (Hilbert space or Hermitian) **adjoint** (随伴演算子) of A .

$$\diamond \| \hat{A}^\dagger \| = \| \hat{A} \|$$

$$\diamond \| \hat{A}^\dagger \hat{A} \| = \| \hat{A} \|^2$$

$$\heartsuit (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$$

$$\heartsuit (\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$$

♡ For $\hat{B} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ and $\hat{C} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_3$,

$$(\hat{C}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{C}^\dagger.$$

$$\heartsuit (|a\rangle)^\dagger = \langle a|.$$

(Regard a ket as an operator $|a\rangle : \mathbb{C} \rightarrow \mathcal{H}$.)

$$\heartsuit (\alpha)^\dagger = \bar{\alpha}.$$

(Regard a complex number as an operator $\alpha : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$.)

$$\heartsuit \langle c | \hat{A} | b \rangle = \langle b | \hat{A}^\dagger | c \rangle.$$

$$\heartsuit \hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} |u_i\rangle \langle u_j| \Leftrightarrow \hat{A}^\dagger = \sum_{i,j} \overline{A_{ji}} |u_i\rangle \langle u_j|$$

(Transpose (転置) and complex conjugate (複素共役))

計算のルールのみまとめ

複素数： α, β, \dots

ケット： $|a\rangle, |b\rangle, \dots$

ブラ： $\langle a|, \langle b|, \dots$

線形演算子 \hat{A}, \hat{B}, \dots

足し算、掛け算、adjoint(\dagger)

adjoint は転置複素共役だと思えば、行列の計算のルールと全く同じ。

足し算掛け算は普通にやってよいが、掛け算の順番の交換はだめ。複素数だけは好きに順番を移して構わない。

$$(|a\rangle)^\dagger = \langle a|, (\alpha)^\dagger = \bar{\alpha}$$

X, Y は複素数、ケット、ブラ、線形演算子のいずれでもよいとして、

$$(X^\dagger)^\dagger = X$$

$$(X + Y)^\dagger = X^\dagger + Y^\dagger$$

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$$

5. Normal operators (正規演算子)

$A^\dagger = A$ を満たす線形演算子 $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ を自己随伴 (self-adjoint) 演算子またはエルミート演算子とよぶ。

自己随伴演算子の行列表現はエルミート行列。

自己随伴演算子の固有値は実数。

自己随伴演算子 \hat{A} は、ある正規直交基底 $\{u_1, \dots, u_d\}$ を用いて「対角化できる」、すなわち、

$$\hat{A} = \sum_{j=1}^d \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j|$$

と書ける。 $\{\lambda_1, \dots, \lambda_d\}$ は固有値。(スペクトル分解定理)

自己随伴演算子の kernel と range は直交する。

自己随伴演算子 \hat{A}, \hat{B} が可換 ($[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$) なら、同じ正規直交基底で同時対角化できる。

どんな線形演算子 \hat{T} も、自己随伴演算子 \hat{A}, \hat{B} を用いて $\hat{T} = \hat{A} + i\hat{B}$ と一意に分解できる。

♣ A linear operator $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ is called **self-adjoint** (自己随伴) or **Hermitian** (エルミート) when $A^\dagger = A$.

♡ Let $\{u_j\}$ be an orthonormal basis.

$\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} |u_i\rangle\langle u_j|$ is self-adjoint iff $A_{ij} = \overline{A_{ji}}$ (エルミート行列).

♡ The eigenvalues of a self-adjoint operator are real.

証明のヒント: $\hat{A}|u\rangle = \lambda|u\rangle \Rightarrow \lambda\langle u|u\rangle = \langle u|\hat{A}|u\rangle$.

$$\langle u|\hat{A}|u\rangle = \langle u|\hat{A}^\dagger|u\rangle = \langle u|\hat{A}|u\rangle.$$

♡ (**Spectral theorem**) A self-adjoint operator $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ can be decomposed as

$$\hat{A} = \sum_{j=1}^d \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j|,$$

where $\{|u_j\rangle\}$ is an orthonormal basis of \mathcal{H} , and $\{\lambda_j\}$ are the eigenvalues of \hat{A} .

証明のヒント: 固有値 ν_1 の固有空間を V_1 とする。任意の $|\phi\rangle \in V_1$ と $|\psi\rangle \in V_1^\perp$ について、 $\langle \psi|\hat{A}|\phi\rangle = \nu_1\langle \psi|\phi\rangle = 0$ 。ここで $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ を使うと、 $\langle \phi|\hat{A}|\psi\rangle = 0$ 。つまり、 $\hat{A}|\psi\rangle \in V_1^\perp$ となり、これは \hat{A} の V_1^\perp への制限の像が V_1^\perp に含まれることを示す。 $\hat{A} : V_1^\perp \rightarrow V_1^\perp$ も自己随伴であることから、また固有値 ν_2 を取ってきて繰り返しさえよ。

♡ If A is self-adjoint, $\langle u|v\rangle = 0$ for any $|u\rangle \in \text{Ker } A$ and for any $|v\rangle \in \text{Ran } A$. ($\mathcal{H} = \text{Ran } A \oplus \text{Ker } A$)

♡ Suppose that self-adjoint operators $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ and $\hat{B} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ satisfy $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Then, there exists an

orthonormal basis $\{|u_j\rangle\}$ and

$$\hat{A} = \sum_{j=1}^d \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j|, \quad \hat{B} = \sum_{j=1}^d \lambda'_j |u_j\rangle\langle u_j|$$

証明のヒント: 先の定理から、 \hat{A} の互いに異なる固有値 ν_1, ν_2, \dots の固有空間 V_1, V_2, \dots を用いて $\mathcal{H} = V_1 \oplus V_2 \oplus \dots \oplus V_m$ と書ける。すると、 \hat{B} の V_k への制限の像は V_k に含まれることが次のようにしてわかる。 $|\phi_k\rangle \in V_k$ 、 $|\phi_l\rangle \in V_l (k \neq l)$ なら、 $0 = \langle \phi_l|(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\phi_k\rangle = (\nu_l - \nu_k)\langle \phi_l|\hat{B}|\phi_k\rangle$ より $\langle \phi_l|\hat{B}|\phi_k\rangle = 0$ 。よって $\hat{B}|\phi_k\rangle \in V_k$ 。
♡ A linear operator $\hat{T} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ is uniquely decomposed as $\hat{T} = \hat{A} + i\hat{B}$, where \hat{A} and \hat{B} are self-adjoint.

証明のヒント: $\hat{A} = (\hat{T} + \hat{T}^\dagger)/2$, $\hat{B} = (\hat{T} - \hat{T}^\dagger)/(2i)$ 。

任意のベクトル $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して $\langle \phi|\hat{N}|\phi\rangle \geq 0$ を満たす線形演算子 $\hat{N} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ を正值 (positive) 演算子とよぶ。 $\hat{N} \geq 0$ と書くこともある。

正值演算子は自己随伴演算子であり、固有値は非負。

どんな線形演算子 \hat{T} でも、 $\hat{T}^\dagger\hat{T} \geq 0$

♣ A linear operator $\hat{N} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ is called **positive** (正值) or positive semidefinite when $\langle \phi|\hat{N}|\phi\rangle \geq 0$ for all $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$. We write $\hat{N} \geq 0$ when \hat{N} is positive.

♡ Every positive operator is self-adjoint, and its eigenvalues are nonnegative.

証明のヒント: 自己随伴演算子を使って $\hat{N} = \hat{A} + i\hat{B}$ と書く。常に $\langle \phi|\hat{N}|\phi\rangle$ が実だから、 $\langle \phi|\hat{B}|\phi\rangle = 0$ 、つまり \hat{B} の固有値は全てゼロで、 $\hat{B} = 0$ 。

• For every positive operator $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, there is a unique positive operator $\hat{B} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ satisfying $\hat{B}^2 = \hat{A}$. We write $\sqrt{\hat{A}} := \hat{B}$.

♡ For any linear operator $\hat{T} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$, $\hat{T}^\dagger\hat{T}$ is positive.

• $|\hat{T}| := \sqrt{\hat{T}^\dagger\hat{T}}$

$\hat{P}^2 = \hat{P}$ を満たす自己随伴演算子 $\hat{P} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ を射影演算子 (projection) とよぶ。

射影演算子の固有値は 0 か 1。

♣ A linear operator $\hat{P} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ is called (**orthogonal**) **projection** (射影演算子) when it is self-adjoint and $\hat{P}^2 = \hat{P}$.

$\hat{T}\hat{T}^\dagger = \hat{T}^\dagger\hat{T}$ を満たす線形演算子 $\hat{T} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ を正規 (normal) 演算子とよぶ。

正規演算子はある正規直交基底で対角化できる。

♣ A linear operator $\hat{T} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ is called **normal** when $\hat{T}\hat{T}^\dagger = \hat{T}^\dagger\hat{T}$.

♡ A linear operator $\hat{T} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ is normal iff it can be decomposed as

$$\hat{T} = \sum_{j=1}^d \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j|,$$

where $\{|u_j\rangle\}$ is an orthonormal basis of \mathcal{H} , and $\{\lambda_j\}$ are the eigenvalues of \hat{T} .

証明のヒント：自己随伴演算子を使って $\hat{T} = \hat{A} + i\hat{B}$ と書けば、 \hat{T} が正規演算子であることと $\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} = 0$ は同値。

内積を保存する、すなわち $\hat{U}|\phi\rangle$ と $\hat{U}|\psi\rangle$ の内積が常に $\langle\phi|\psi\rangle$ に等しくなる (言い換えると、 $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$ となる) 線形演算子 $\hat{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ をユニタリ演算子 (unitary) とよぶ。

$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}$ も成立。

ユニタリ演算子の行列表現はユニタリ行列。

ユニタリ演算子の固有値は絶対値 1 の複素数。

ユニタリ演算子はある正規直交基底で対角化できる。

♣ A linear operator U from \mathcal{H}_1 onto \mathcal{H}_2 satisfying $(U(x), U(y)) = (x, y)$ for all $x, y \in \mathcal{H}_1$ is called **unitary** (ユニタリ演算子) .

♡ A linear operator $\hat{U} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ is unitary iff $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$ and $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}$.

• A linear operator $U : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ satisfying $(U(x), U(y)) = (x, y)$ for all $x, y \in \mathcal{H}_1$ is called **isometry**.

◇ A linear operator $\hat{U} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ is isometry iff $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$.

♡ If \mathcal{H} is finite-dimensional and $\hat{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ satisfies $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$, then \hat{U} is unitary.

証明のヒント： $U|\phi\rangle = 0$ なら $|\phi\rangle = 0$ なので、 \hat{U} は単射。 $\dim \text{Ker } \hat{U} = 0$ なので、 $\dim \text{Ran } U = \dim \mathcal{H}$ 、従って \hat{U} は全射でもあり、 \hat{U}^{-1} が存在してこれは \hat{U}^\dagger に等しい。

♡ Let $\{u_j\}$ be an orthonormal basis.

$\hat{U} = \sum_{i,j} U_{ij} |u_i\rangle\langle u_j|$ is unitary iff

$$\sum_{k=1}^d U_{jk} \overline{U_{ik}} = \sum_{k=1}^d \overline{U_{ki}} U_{kj} = \delta_{i,j}$$

for all i, j . (ユニタリ行列)

♡ A unitary operator $\hat{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ can be decomposed as

$$\hat{U} = \sum_{j=1}^d \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j|, \quad |\lambda_j| = 1$$

where $\{|u_j\rangle\}$ is an orthonormal basis of \mathcal{H} , and $\{\lambda_j\}$ are the eigenvalues of \hat{U} .

$\{|u_j\rangle\}$ が正規直交基底で、 \hat{U} ユニタリ演算子なら、 $|v_j\rangle := \hat{U}|u_j\rangle$ として、 $\{|v_j\rangle\}$ も正規直交基底。

逆に、任意の正規直交基底 $\{|u_j\rangle\}$ 、 $\{|v_j\rangle\}$ に対して、 $|v_j\rangle := \hat{U}|u_j\rangle$ を満たすユニタリ演算子 \hat{U} が存在。

♡ Let $\{u_j\}$ be an orthonormal basis, and $\hat{U} = \sum_{i,j} U_{ij} |u_i\rangle\langle u_j|$ be unitary. Define

$$|v_j\rangle := \hat{U}|u_j\rangle = \sum_{i=1}^d U_{ij} |u_i\rangle.$$

Then $\{v_j\}$ is an orthonormal basis.

♡ Let $\{u_j\}$ and $\{v_j\}$ be orthonormal bases of \mathcal{H} . Then, there is a unitary operator $\hat{U} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ such that $|v_j\rangle = \hat{U}|u_j\rangle$.

証明のヒント： $\hat{U} := \sum_j |v_j\rangle\langle u_j|$.

線形演算子の分類のまとめ

正規演算子： $\hat{N}^\dagger\hat{N} = \hat{N}\hat{N}^\dagger$ 、対角化可能。

自己随伴演算子： $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ 、固有値は実。

正值演算子：固有値は非負。

射影演算子：固有値は 0 又は 1。

ユニタリ演算子： $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}$

♡ (Polar decomposition (極分解))

Any linear operator $\hat{T} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ is decomposed as $\hat{T} = \hat{U}|\hat{T}|$ where $\hat{U} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ is an isometry and $|\hat{T}| = \sqrt{\hat{T}^\dagger\hat{T}}$ is a positive operator. It is also decomposed as $\hat{T} = |\hat{T}^\dagger|\hat{U}$ with a positive operator $|\hat{T}^\dagger| = \sqrt{\hat{T}\hat{T}^\dagger}$.

証明のヒント： \hat{T} が逆を持つときは、 $\hat{U} = \hat{T}|\hat{T}|^{-1}$ とおいて $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$ を示す。

♣ The eigenvalues of $|\hat{T}| = \sqrt{\hat{T}^\dagger\hat{T}}$ are called **singular values** (特異値) of \hat{T} .

6. Tensor product (テンソル積)

2つのヒルベルト空間 \mathcal{H}_1 と \mathcal{H}_2 から、テンソル積空間 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ と呼ばれるヒルベルト空間が定義される。計算のルールは以下のとおり。

$|\phi\rangle \in \mathcal{H}_1, |\psi\rangle \in \mathcal{H}_2$ のとき、 $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$ は $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ のベクトルである。

$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ は線形空間だから、上の形のベクトルの線形結合もまた $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ のベクトルである。つまり、 $|\phi_j\rangle \in \mathcal{H}_1, |\psi_j\rangle \in \mathcal{H}_2, \alpha_j \in \mathbb{C}$ のとき $\sum_j \alpha_j |\phi_j\rangle \otimes |\psi_j\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 。

上記のように作られるベクトルの中には、見かけが違って同じベクトルだと見なされるものがある。同じと見なすルールは、

$|\phi\rangle \otimes (|\psi\rangle + |\psi'\rangle) = |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle + |\phi\rangle \otimes |\psi'\rangle$
 $(|\phi\rangle + |\phi'\rangle) \otimes |\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle + |\phi'\rangle \otimes |\psi\rangle$
 $\alpha(|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle) = (\alpha|\phi\rangle) \otimes |\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes (\alpha|\psi\rangle)$
 であり、 \otimes は掛け算に似ている。

どのベクトルがどのヒルベルト空間の元かが見やすいように、上記の $|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$ を $|\phi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2$ と書くことが多い。また、 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ のベクトルを表す場合は $|\Phi\rangle_{12}$ のように書く。

記号 \otimes を省いて $|\phi\rangle_1 |\psi\rangle_2$ と書いたり、さらに略して $|\phi\psi\rangle_{12}$ と書くこともある。このように記号でヒルベルト空間が区別されていれば、順番を入れ替えて $|\psi\rangle_2 \otimes |\phi\rangle_1$ と書いてもよい。

- Let V be a linear space and R be a subspace of V . For $x \in V$, the set $S(x) := \{x + y : y \in R\}$ is called a residue class (剰余類).
- ◊ If $x - x' \in R$, $S(x) = S(x')$.
If $x - x' \notin R$, $S(x) \cap S(x') = \emptyset$.
- The set of all residue classes forms a linear space by defining the sum and the scalar product as follows, which is well-defined.
 $S(x) + S(x') := S(x + x')$
 $\alpha S(x) := S(\alpha x)$
 This linear space is denoted by V/R and is called a **quotient space (商空間)**.
- (Tensor product of linear spaces) Let V_1 and V_2 be linear spaces. Let F be the linear space whose basis is $V_1 \times V_2 := \{\langle x, y \rangle : x \in V_1, y \in V_2\}$. Let R be the subspace of F spanned by the elements of the following forms:
 $\langle x + x', y \rangle - \langle x, y \rangle - \langle x', y \rangle, \langle x, y + y' \rangle - \langle x, y \rangle - \langle x, y' \rangle,$
 $\langle \alpha x, y \rangle - \alpha \langle x, y \rangle, \langle x, \alpha y \rangle - \alpha \langle x, y \rangle.$
 The quotient space F/R is denoted by $V_1 \otimes V_2$ and is called the **tensor product** of linear spaces V_1 and V_2 .

- When $x \in V_1$ and $y \in V_2$, $x \otimes y$ represents the element of $V_1 \otimes V_2$ that is the residue class including $\langle x, y \rangle$.
- ♡ $(x + x') \otimes y = x \otimes y + x' \otimes y,$
 $x \otimes (y + y') = x \otimes y + x \otimes y',$
 $(\alpha x) \otimes y = x \otimes (\alpha y) = \alpha(x \otimes y)$

テンソル積どうしの内積の計算のルール：

まず、 $|\Theta'\rangle_{12} := |\phi'\rangle_1 \otimes |\psi'\rangle_2$ と $|\Theta\rangle_{12} := |\phi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2$ の内積は、それぞれのヒルベルト空間で内積を計算し、結果を掛け算する。つまり、
 ${}_{12}\langle \Theta' | \Theta \rangle_{12} = {}_1\langle \phi' | \phi \rangle_1 \times {}_2\langle \psi' | \psi \rangle_2$

さらに内積のルールに従うと、一般の場合、つまり $|\Theta'\rangle_{12} := \sum_k \beta_k |\phi'_k\rangle_1 \otimes |\psi'_k\rangle_2$ と $|\Theta\rangle_{12} := \sum_j \alpha_j |\phi_j\rangle_1 \otimes |\psi_j\rangle_2$ の内積が次のように計算できる。
 ${}_{12}\langle \Theta' | \Theta \rangle_{12} = \sum_{k,j} \overline{\beta_k} \alpha_j {}_1\langle \phi'_k | \phi_j \rangle_1 {}_2\langle \psi'_k | \psi_j \rangle_2$

- ◊ Let \mathcal{H}_1 and \mathcal{H}_2 be Hilbert spaces, and define F and R as above. Define a map $(\cdot, \cdot) : F \rightarrow \mathbb{C}$ by
 $(\langle x, y \rangle, \langle x', y' \rangle) = (x, x')(y, y'),$
 $(a, b) = \overline{(b, a)},$
 $(a, b_1 + b_2) = (a, b_1) + (a, b_2),$
 $(a, \alpha b) = \alpha(a, b),$
 where $x, x' \in \mathcal{H}_1, y, y' \in \mathcal{H}_2, a, b, b_1, b_2 \in F$.
 If $a - a' \in R$ and $b - b' \in R$, then $(a, b) = (a', b')$. Thus we can define $(\cdot, \cdot) : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathbb{C}$.
- ◊ $(\phi, \phi) \geq 0$ for all $\phi \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. If $(\phi, \phi) = 0$, then $\phi = 0$. Thus (\cdot, \cdot) is an inner product.
- ♡ $(x \otimes y, x' \otimes y') = (x, x')(y, y')$
- ♣ (Tensor product of Hilbert spaces) We define $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ to be F/R with the inner product (\cdot, \cdot) defined above. It is called the **tensor product** of Hilbert spaces \mathcal{H}_1 and \mathcal{H}_2 .
- ♣ $x \otimes y \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ is often written as $|x\rangle_1 \otimes |y\rangle_2, |x\rangle_1 |y\rangle_2,$ or $|xy\rangle_{12}.$

$\{|u_i\rangle_1\}_{i=1,2,\dots,d_1}$ が \mathcal{H}_1 の正規直交基底で、
 $\{|v_j\rangle_2\}_{j=1,2,\dots,d_2}$ が \mathcal{H}_2 の正規直交基底であるとき、
 $\{|u_i\rangle_1 \otimes |v_j\rangle_2\}_{i=1,2,\dots,d_1; j=1,2,\dots,d_2}$
 は $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ の正規直交基底である。

次元については次のような関係がある。
 $\dim \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \dim \mathcal{H}_1 \dim \mathcal{H}_2.$

- ♡ When $\{u_i\}$ and $\{v_j\}$ are orthonormal bases of \mathcal{H}_1 and \mathcal{H}_2 , respectively, $\{u_i \otimes v_j\}$ is an orthonormal basis of $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. $\dim \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \dim \mathcal{H}_1 \dim \mathcal{H}_2.$

$\hat{A} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}'_1$, $\hat{B} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}'_2$ のとき、
 テンソル積空間の線形演算子
 $\hat{A} \otimes \hat{B} : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}'_1 \otimes \mathcal{H}'_2$
 が、
 $(\hat{A} \otimes \hat{B})(|\phi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2) = \hat{A}|\phi\rangle_1 \otimes \hat{B}|\psi\rangle_2$
 で定義される。(線形結合 $\sum_j \alpha_j |\phi_j\rangle_1 \otimes |\psi_j\rangle_2$
 に作用した結果は、 $\hat{A} \otimes \hat{B}$ が線形であること
 から自動的に定まる。)

例： $\hat{A} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}'_1$, ${}_2\langle\phi| : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathbb{C}$ のとき、
 $\hat{A} \otimes {}_2\langle\phi| : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}'_1$ が
 $(\hat{A} \otimes {}_2\langle\phi|)(|\phi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2) = \hat{A}|\phi\rangle_1 \times {}_2\langle\phi|\psi\rangle_2$
 で定義される。

$\hat{A} \otimes \hat{1} : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}$ を、略して単に
 \hat{A} と書くことがある。つまり、作用する相手
 とヒルベルト空間が一致しない場合は、適当
 に恒等演算子を補って考える。

♣ For $\hat{A} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}'_1$ and $\hat{B} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}'_2$, we define
 a linear operator $\hat{A} \otimes \hat{B} : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}'_1 \otimes \mathcal{H}'_2$ by
 $(\hat{A} \otimes \hat{B})(|\phi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2) = \hat{A}|\phi\rangle_1 \otimes \hat{B}|\psi\rangle_2$ and requiring
 the linearity.

♣ $\hat{A} \otimes \hat{1} : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}$ is sometimes denoted just
 by \hat{A} .

演算子の計算のルール：

$$\hat{A} \otimes (\hat{B} + \hat{B}') = \hat{A} \otimes \hat{B} + \hat{A} \otimes \hat{B}'$$

$$\hat{A} \otimes (\alpha \hat{B}) = \alpha(\hat{A} \otimes \hat{B})$$

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger \otimes \hat{B}^\dagger$$

$$\hat{A} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}'_1, \hat{B} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}'_2$$

$$\hat{C} : \mathcal{H}'_1 \rightarrow \mathcal{H}''_1, \hat{D} : \mathcal{H}'_2 \rightarrow \mathcal{H}''_2$$

のとき、

$$(\hat{C} \otimes \hat{D})(\hat{A} \otimes \hat{B}) = \hat{C}\hat{A} \otimes \hat{D}\hat{B}$$

(入力と出力のつじつまが合っていることに
 注意。たとえ $(\hat{D} \otimes \hat{C})(\hat{A} \otimes \hat{B})$ と書いてあっ
 ても、計算結果はやはり $\hat{C}\hat{A} \otimes \hat{D}\hat{B}$ となる。)

どんな線形演算子 $\hat{Q} : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$
 も、テンソル積の形の演算子に分解できる。

$$\hat{Q} = \sum_j \alpha_j \hat{A}_j \otimes \hat{B}_j$$

$$(\hat{A}_j : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1, \hat{B}_j : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_2, \alpha_j \in \mathbb{C})$$

自己随伴演算子どうしのテンソル積は自己随
 伴演算子。

正規演算子どうしのテンソル積は正規演算子。

$$\hat{A}|u\rangle_1 = \lambda|u\rangle_1, \hat{B}|v\rangle_2 = \nu|v\rangle_2 \text{ なら}$$

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})(|u\rangle_1 \otimes |v\rangle_2) = \lambda\nu(|u\rangle_1 \otimes |v\rangle_2)$$

正值演算子どうしのテンソル積は正值演算子。

射影演算子どうしのテンソル積は射影演算子。

ユニタリ演算子どうしのテンソル積はユニタ
 リ演算子。

♡ For $\hat{A} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}'_1$, $\hat{B} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}'_2$, $\hat{C} : \mathcal{H}'_1 \rightarrow \mathcal{H}''_1$, and
 $\hat{D} : \mathcal{H}'_2 \rightarrow \mathcal{H}''_2$,

$$(\hat{C} \otimes \hat{D})(\hat{A} \otimes \hat{B}) = \hat{C}\hat{A} \otimes \hat{D}\hat{B}$$

♡ Let $\{|u_i\rangle_1\}$ and $\{|v_j\rangle_2\}$ be orthonormal bases of \mathcal{H}_1
 and \mathcal{H}_2 , respectively. Any operator \hat{Q} acting on $\mathcal{H}_1 \otimes$
 \mathcal{H}_2 is decomposed as

$$\hat{Q} = \sum_{i,j,i',j'} Q_{ij,i'j'} |u_i\rangle_1 \otimes |v_j\rangle_2 \langle u_{i'}| \otimes \langle v_{j'}|$$

$$= \sum_{i,j,i',j'} Q_{ij,i'j'} |u_i\rangle_{11} \langle u_{i'}| \otimes |v_j\rangle_{22} \langle v_{j'}|.$$

$$\♡ (\hat{A} \otimes \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger \otimes \hat{B}^\dagger$$

♡ The tensor product of self-adjoint operators is self-
 adjoint.

♡ The tensor product of positive operators is positive.

♡ The tensor product of unitary operators is unitary.

7. Trace (トレース)

演算子 $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ に対して、複素数

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}) := \sum_{j=1}^d \langle u_j | \hat{A} | u_j \rangle$$

を \hat{A} のトレースと呼ぶ。ここで、 $\{|u_j\rangle\}_{j=1,2,\dots}$ は \mathcal{H} の正規直交基底である。正規直交基底はいろいろあるが、トレースは正規直交基底の選び方には依存しない。

トレースは線形である、すなわち、
 $\mathrm{Tr}(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}) = \alpha\mathrm{Tr}(\hat{A}) + \beta\mathrm{Tr}(\hat{B})$

$\hat{B} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ 、 $\hat{C} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1$ のとき、
 $\mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{B})$

とくに、

$$\mathrm{Tr}(|a\rangle\langle b|) = \langle b|a\rangle$$

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \mathrm{Tr}(\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}) \quad (\hat{U} \text{ はユニタリ})$$

$$\mathrm{Tr}(\hat{A} \otimes \hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{A})\mathrm{Tr}(\hat{B})$$

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}^\dagger) = \overline{\mathrm{Tr}(\hat{A})}$$

♣ Let $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ be a linear operator acting on a Hilbert space \mathcal{H} . We define the **trace** of \hat{A} by

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}) := \sum_{j=1}^d \langle u_j | \hat{A} | u_j \rangle$$

for an orthonormal basis $\{|u_j\rangle\}_{j=1,2,\dots,d}$ of \mathcal{H} . This definition is independent of the choice of the orthonormal basis $\{|u_j\rangle\}$.

♡ The mapping $\hat{A} \mapsto \mathrm{Tr}(\hat{A})$ is linear.

♡ For $\hat{B} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ and $\hat{C} : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1$,

$$\mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{B}).$$

♡ $\mathrm{Tr}(|a\rangle\langle b|) = \langle b|a\rangle$

♡ $\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \mathrm{Tr}(\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U})$ when \hat{U} is unitary.

$$\mathrm{Tr}(\hat{A} \otimes \hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{A})\mathrm{Tr}(\hat{B})$$

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}^\dagger) = \overline{\mathrm{Tr}(\hat{A})}$$

♣ For a linear operator \hat{T} , $\|\hat{T}\|_1 := \mathrm{Tr}|\hat{T}| = \mathrm{Tr}\sqrt{\hat{T}^\dagger \hat{T}}$ is called the **trace norm** of \hat{T} .

♡ When \hat{A} is a normal operator with the eigenvalues $\{\lambda_j\}$, $\|\hat{A}\|_1 = \sum_j |\lambda_j|$.

♡ For $\hat{T} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, $\|\hat{T}\|_1 = \max\{\mathrm{Tr}(\hat{T}\hat{V}) \mid \hat{V} \text{ is unitary}\}$
 証明のヒント: $|\mathrm{Tr}(\hat{T}\hat{V})| = |\mathrm{Tr}(|\hat{T}|\hat{U}\hat{V})| \leq \mathrm{Tr}|\hat{T}|$ を示す。

$\hat{Q}_{AB} : \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \rightarrow \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ に対して、部分トレースと呼ばれる演算子 $\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}) : \mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_A$ を、次のように定める。まず、特殊な場合として、

$$\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_A \otimes \hat{Q}_B) = [\mathrm{Tr}(\hat{Q}_B)]\hat{Q}_A$$

一般の場合は、部分トレースは線形であると要請すると、答えは決まってしまう。つまり、 $\hat{Q}_{AB} = \sum_j \hat{Q}_A^{(j)} \otimes \hat{Q}_B^{(j)}$ と分解されるなら、

$$\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}) = \sum_j \mathrm{Tr}(\hat{Q}_B^{(j)})\hat{Q}_A^{(j)}$$

$\{|v_j\rangle_B\}_{j=1,2,\dots}$ が \mathcal{H}_B の正規直交基底であれば、

$$\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}) = \sum_j {}_B\langle v_j | \hat{Q}_{AB} | v_j \rangle_B$$

これを部分トレースの定義と考えてもよい。

$$\mathrm{Tr}[\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})] = \mathrm{Tr}(\hat{Q}_{AB})$$

$$\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}\hat{R}_A) = \mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})\hat{R}_A$$

$$\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}\hat{R}_B) = \mathrm{Tr}_B(\hat{R}_B\hat{Q}_{AB})$$

$$\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}^\dagger) = [\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})]^\dagger$$

\hat{Q}_{AB} が自己随伴演算子なら、 $\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})$ も自己随伴演算子。

\hat{Q}_{AB} が正值演算子なら、 $\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})$ も正值演算子。

♣ Consider $\hat{Q}_{AB} : \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \rightarrow \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. We define a **partial trace** (部分トレース) of \hat{Q}_{AB} , $\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})$, to be a linear operator acting on \mathcal{H}_A determined by the following conditions:

(1) The mapping $\hat{Q}_{AB} \mapsto \mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})$ is linear.

$$(2) \mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_A \otimes \hat{Q}_B) = [\mathrm{Tr}(\hat{Q}_B)]\hat{Q}_A.$$

♡ $\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}) = \sum_j {}_B\langle v_j | \hat{Q}_{AB} | v_j \rangle_B$ for any orthonormal basis $\{|v_j\rangle_B\}$ for \mathcal{H}_B .

$$\mathrm{Tr}[\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})] = \mathrm{Tr}(\hat{Q}_{AB})$$

$$\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}\hat{R}_A) = \mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})\hat{R}_A$$

$$\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}\hat{R}_B) = \mathrm{Tr}_B(\hat{R}_B\hat{Q}_{AB})$$

$$\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}^\dagger) = [\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})]^\dagger$$

♡ If \hat{Q}_{AB} is self-adjoint, $\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})$ is self-adjoint.

♡ If \hat{Q}_{AB} is positive, $\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB})$ is positive.