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 $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ 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。
$a = \alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 + \cdots \alpha_n a_n$

「集合 $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ 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 $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ 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 $\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$ 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
$\alpha_j \in \mathbb{C}(j = 1, \ldots k)$, $\{b_1, b_2, \ldots, b_k\} \subset A$;
$\alpha_1 b_1 + \alpha_2 b_2 + \cdots \alpha_k b_k = 0$
$\Longrightarrow (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k) = (0, 0, \ldots, 0)$.
♣ 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
$^\exists k \geq 1; {}^\exists \alpha_j (\neq 0) \in \mathbb{C}(j = 1, \ldots k)$,
$^\exists \{b_1, b_2, \ldots, b_k\} \subset A$;
$\alpha_1 b_1 + \alpha_2 b_2 + \cdots \alpha_k b_k = 0$.

• 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
$^\exists k; {}^\exists \alpha_j \in \mathbb{C}, {}^\exists b_j \in A (j = 1, \ldots k)$;
$b = \alpha_1 b_1 + \alpha_2 b_2 + \cdots \alpha_k b_k$
(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。$(\alpha a, b) = \overline{\alpha}(a, b)$ 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 $(\cdot,\cdot) : V \times V \to \mathbb{C}$ 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 $\{a_1, a_2, \ldots, a_n, \ldots\}$ is linearly independent. Define

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

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 $\{u_1, \ldots, u_n\}$ 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
$\|x_n - x_m\| \to 0 (n, m \to \infty)$
$\Longrightarrow \lim x_n = x \in V$

• 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。

$\{u_1, \cdots, u_d\}$ 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 a 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 $(\mathcal{H}, \mathcal{H}_1, \ldots)$ 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 $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ 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 $(\alpha, \beta) := \overline{\alpha}\beta$ 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。

$T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ に関して、$\mathcal{H}_1$ の部分空間
$\mathrm{Ker}\, T := \{x \in \mathcal{H}_1 : T(x) = 0\}$
を **kernel**(核) とよび、$\mathcal{H}_2$ の部分空間
$\mathrm{Ran}\, T := \{T(x) : x \in \mathcal{H}_1\}$
を **range**(値域) とよぶ。
range の次元を T の**ランク**とよぶ。

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

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

$$T(\alpha a + \beta b) = \alpha T(a) + \beta T(b) \tag{1}$$

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 $(\alpha, \beta) := \overline{\alpha}\beta$.
♣ A linear operator $f : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ is called a **linear functional (線形汎関数)** .
♣ For a linear operator $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$,

- The subspace of $\mathcal{H}_1$, $\mathrm{Ker}\, T := \{x \in \mathcal{H}_1 : T(x) = 0\}$, is called the **kernel (核)** of T.
- The subspace of $\mathcal{H}_2$, $\mathrm{Ran}\, T := \{T(x) : x \in \mathcal{H}_1\}$, is called the **range (値域)** or the image (像) of T.
- The dimension of $\mathrm{Ran}\, T$ is called the **rank** of T.

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

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

$\diamond$ $\|T(x)\| \le \|T\|\|x\|$.
• For $A \subset \mathcal{H}$, we define the subspace $A^\perp := \{x \in \mathcal{H} : {}^\forall a \in A; (a,x) = 0\}$.
$\diamond$ $A \subset B \Rightarrow A^\perp \supset B^\perp$
$\diamond$ $(A^\perp)^\perp \supset A$
$\diamond$ $A \subset B^\perp \Rightarrow A^\perp \supset B$
• When A is a subspace of $\mathcal{H}$, we say $A^\perp$ is the **orthogonal complement (直交補空間)** of A.
$\diamond$ When A is a subspace of $\mathcal{H}$, $A \cap A^\perp = \{0\}$.
$\diamond$ (**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 $w \in A^\perp$. ($\mathcal{H} = A \oplus A^\perp$)
$\diamond$ When A is a subspace of $\mathcal{H}$, $\dim A + \dim A^\perp = \dim \mathcal{H}$.
$\diamond$ When A is a subspace of $\mathcal{H}$, $(A^\perp)^\perp = A$.
♡ Suppose that $\dim \mathcal{H}_1 = d$. For every linear operator $T : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$, $\dim(\mathrm{Ker}\, T) + \dim(\mathrm{Ran}\, T) = d$.

> 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 $f : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ 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 $f : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$, 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 $f : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ 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 $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 ($\hat{}$), like $\hat{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$.
$\hat{T}|a\rangle := T(a)$.
$\langle b|\hat{T}|a\rangle = (b, T(a))$.
A ket vector $|a\rangle$ can be regarded as a linear operator $T_a : \mathbb{C} \to \mathcal{H}$, defined by $T_a(\alpha) := \alpha|a\rangle$ for $\alpha \in \mathbb{C}$.
$|a\rangle\langle b|$ is a linear operator : $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$.
$(|a\rangle\langle b|)|c\rangle = (b,c)a$.

> $\{u_1, \ldots, u_d\}$ 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 (入力が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 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_d\rangle\}$ 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 $\{u_1, \ldots, u_d\}$ 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。$\langle c| = \sum_i c_i\langle u_i|$

$\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 $\{u_1, \ldots, u_d\}$ 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 $A : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ を考える。任意の $x \in \mathcal{H}_1$、$y \in \mathcal{H}_2$ について、

$$(A^\dagger(y), x) = (y, A(x)) \tag{3}$$

を満たすような線形演算子 $A^\dagger : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$ 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、$(A^\dagger)^\dagger = A$。

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

$(BC)^\dagger = C^\dagger B^\dagger$。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 $\mathbb{C} \to \mathcal{H}$ 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 $\mathbb{C} \to \mathbb{C}$ と見なしてもよい。すると、$(\alpha)^\dagger = \overline{\alpha}$、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、
$\overline{\langle u_i|\hat{A}^\dagger|u_j\rangle} = (\langle u_i|\hat{A}^\dagger|u_j\rangle)^\dagger$
$= (|u_j\rangle)^\dagger(\hat{A}^\dagger)^\dagger(\langle u_i|)^\dagger = \langle u_j|\hat{A}|u_i\rangle$
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 $A : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ be a linear operator. There is a unique linear operator $A^\dagger : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$ 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.
⋄ $\|\hat{A}^\dagger\| = \|\hat{A}\|$
⋄ $\|\hat{A}^\dagger\hat{A}\| = \|\hat{A}\|^2$
♡ $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$
♡ $(\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$
♡ For $\hat{B} : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ and $\hat{C} : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_3$,
$(\hat{C}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{C}^\dagger$.
♡ $(|a\rangle)^\dagger = \langle a|$.
(Regard a ket as an operator $|a\rangle : \mathbb{C} \to \mathcal{H}$.)
♡ $(\alpha)^\dagger = \overline{\alpha}$.
(Regard a complex number as an operator $\alpha : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$.)
♡ $\overline{\langle c|\hat{A}|b\rangle} = \langle b|\hat{A}^\dagger|c\rangle$.
♡ $\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij}|u_i\rangle\langle u_j| \Leftrightarrow \hat{A}^\dagger = \sum_{i,j} \overline{A_{ji}}|u_i\rangle\langle u_j|$
(Transpose (転置) and complex conjugate (複素共役))

計算のルールのまとめ
複素数：$\alpha, \beta, \ldots$
ケット：$|a\rangle, |b\rangle, \ldots$
ブラ：$\langle a|, \langle b|, \ldots$
線形演算子 $\hat{A}, \hat{B}, \ldots$
足し算、掛け算、adjoint(†)

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。

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

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 $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 $\{u_1, \ldots, u_d\}$ 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。$\{\lambda_1, \ldots, \lambda_d\}$ 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 $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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：$\hat{A}|u\rangle = \lambda|u\rangle \Rightarrow \lambda\langle u|u\rangle = \langle u|\hat{A}|u\rangle$. $\overline{\langle u|\hat{A}|u\rangle} = \langle u|\hat{A}^\dagger|u\rangle = \langle u|\hat{A}|u\rangle$.
♡ (**Spectral thoerem**) A self-adjoint operator $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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。$\hat{A} : V_1^\perp \to V_1^\perp$ も自己随伴であることから、また固有値 v_2 を取ってきて繰り返せばよい。
♡ 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 $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ and $\hat{B} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 $\nu_1, \nu_2, \ldots$ の固有空間 $V_1, V_2, \ldots$ を用いて $\mathcal{H} = V_1 \oplus V_2 \oplus \cdots \oplus V_m$ 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 $\hat{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 $\hat{N} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ を**正値 (positive) 演算子**とよぶ。$\hat{N} \geq 0$ と書くこともある。

正値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 $\hat{N} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ is called **positive (正値)** 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 $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, there is a unique positive operator $\hat{B} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ satisfying $\hat{B}^2 = \hat{A}$. We write $\sqrt{\hat{A}} := \hat{B}$.
♡ For any linear operator $\hat{T} : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$, $\hat{T}^\dagger\hat{T}$ 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 $\hat{P} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 $\hat{P} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 $\hat{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 $\hat{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ is called **normal** when $\hat{T}\hat{T}^\dagger = \hat{T}^\dagger\hat{T}$.
♡ A linear operator $\hat{T} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 $\hat{U} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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 $\hat{U} : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ is unitary iff $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$ and $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{1}$.
• A linear operator $U : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ satisfying $(U(x), U(y)) = (x, y)$ for all $x, y \in \mathcal{H}_1$ is called **isometry**.
⋄ A linear operator $\hat{U} : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ is isometry iff $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$.
♡ If $\mathcal{H}$ is finite-dimensional and $\hat{U} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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。$\dim \mathrm{Ker}\, \hat{U} = 0$ なので、$\dim \mathrm{Ran}\, U = \dim \mathcal{H}$、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 $\hat{U} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ can be decomposed as

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

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 $\hat{U} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ 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。
> 正値演算子：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 $\hat{T} : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ is decomposed as $\hat{T} = \hat{U}|\hat{T}|$ where $\hat{U} : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ 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、見かけが違っても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 $(\cdot, \cdot) : F \to \mathbb{C}$ 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 $(\cdot, \cdot) : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \to \mathbb{C}$.
⋄ $(\phi, \phi) \geq 0$ 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 $|xy\rangle_{12}$.

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

$\hat{A}:\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_1'$、$\hat{B}:\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_2'$ のとき、
テンソル積空間の線形演算子
$\hat{A}\otimes\hat{B}:\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_1'\otimes\mathcal{H}_2'$
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：$\hat{A}:\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_1'$、${}_2\langle\phi|:\mathcal{H}_2\to\mathbb{C}$ のとき、
$\hat{A}\otimes{}_2\langle\phi|:\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_1'$ 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。

$\hat{A}\otimes\hat{1}:\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}\to\mathcal{H}_2\otimes\mathcal{H}$ 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 $\hat{A}:\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_1'$ and $\hat{B}:\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_2'$, we define a linear operator $\hat{A}\otimes\hat{B}:\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_1'\otimes\mathcal{H}_2'$ 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.
♣ $\hat{A}\otimes\hat{1}:\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}\to\mathcal{H}_2\otimes\mathcal{H}$ is sometimes denoted just by $\hat{A}$.

演算子の計算のルール：
$\hat{A}\otimes(\hat{B}+\hat{B}')=\hat{A}\otimes\hat{B}+\hat{A}\otimes\hat{B}'$
$\hat{A}\otimes(\alpha\hat{B})=\alpha(\hat{A}\otimes\hat{B})$
$(\hat{A}\otimes\hat{B})^\dagger=\hat{A}^\dagger\otimes\hat{B}^\dagger$

$\hat{A}:\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_1'$, $\hat{B}:\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_2'$
$\hat{C}:\mathcal{H}_1'\to\mathcal{H}_1''$, $\hat{D}:\mathcal{H}_2'\to\mathcal{H}_2''$
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 $\hat{Q}:\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ も、テンソル積の形の演算子に分解できる。
$\hat{Q}=\sum_j\alpha_j\hat{A}_j\otimes\hat{B}_j$
$(\hat{A}_j:\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_1$、$\hat{B}_j:\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_2$、$\alpha_j\in\mathbb{C})$

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。

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

正値演算子どうしのテンソル積は正値演算子。
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 $\hat{A}:\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_1'$, $\hat{B}:\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_2'$, $\hat{C}:\mathcal{H}_1'\to\mathcal{H}_1''$, and $\hat{D}:\mathcal{H}_2'\to\mathcal{H}_2''$,
$(\hat{C}\otimes\hat{D})(\hat{A}\otimes\hat{B})=\hat{C}\hat{A}\otimes\hat{D}\hat{B}$
♡ 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
$\hat{Q}=\sum_{i,j,i',j'}Q_{ij,i'j'}|u_i\rangle_1\otimes|v_j\rangle_{21}\langle u_{i'}|\otimes{}_2\langle v_{j'}|$
$=\sum_{i,j,i',j'}Q_{ij,i'j'}|u_i\rangle_{11}\langle u_{i'}|\otimes|v_j\rangle_{22}\langle v_{j'}|$.
♡ $(\hat{A}\otimes\hat{B})^\dagger=\hat{A}^\dagger\otimes\hat{B}^\dagger$
♡ 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 $\hat{A}:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$ 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、$\{|u_j\rangle\}_{j=1,2,\ldots}$ 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、
$\mathrm{Tr}(\alpha\hat{A}+\beta\hat{B}) = \alpha\mathrm{Tr}(\hat{A})+\beta\mathrm{Tr}(\hat{B})$

$\hat{B}:\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_2$、$\hat{C}:\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_1$ のとき、
$\mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{B})$
とくに、
$\mathrm{Tr}(|a\rangle\langle b|) = \langle b|a\rangle$
$\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \mathrm{Tr}(\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U})$ ($\hat{U}$ 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 $\hat{A}:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$ 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 $\{|u_j\rangle\}_{j=1,2,\ldots,d}$ 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 $\hat{B}:\mathcal{H}_1\to\mathcal{H}_2$ and $\hat{C}:\mathcal{H}_2\to\mathcal{H}_1$,
$\mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{B})$.
♡ $\mathrm{Tr}(|a\rangle\langle b|) = \langle b|a\rangle$
♡ $\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \mathrm{Tr}(\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U})$ 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 $\hat{T}:\mathcal{H}\to\mathcal{H}$, $\|\hat{T}\|_1 = \max\{\mathrm{Tr}(\hat{T}\hat{V})|\hat{V}\text{ is unitary}\}$
　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。

$\hat{Q}_{AB}:\mathcal{H}_A\otimes\mathcal{H}_B\to\mathcal{H}_A\otimes\mathcal{H}_B$ に対して、**部分トレース**と呼ばれる演算子 $\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}):\mathcal{H}_A\to\mathcal{H}_A$ 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、
$\mathrm{Tr}_B(\hat{Q}_{AB}) = \sum_j\mathrm{Tr}(\hat{Q}_B^{(j)})\hat{Q}_A^{(j)}$

$\{|v_j\rangle_B\}_{j=1,2,\ldots}$ 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。

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

♣ Consider $\hat{Q}_{AB}:\mathcal{H}_A\otimes\mathcal{H}_B\to\mathcal{H}_A\otimes\mathcal{H}_B$. 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.