2-6 つづき

復習 $A \geq 0$（非負定値）

$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow} \forall x \in \mathcal{H}, \langle x | Ax \rangle \geq 0$

$\Longleftrightarrow$ A はエルミート，固有値がすべて非負

同様に $A > 0$（正定値）

$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow} \forall x \in \mathcal{H}, \langle x | Ax \rangle > 0$

$\Longleftrightarrow$ A はエルミート，固有値がすべて正

Lem 以下は同値

(1) $A \geq 0$

(2) $\exists B \geq 0, \ A = B^2$

（cf. $x \in \mathbb{R}, x \geq 0, \ x = \sqrt{x}^2$）

(3) $\exists C, \ A = C^* C$

証明 (2) ⇒ (3) 明らか．C として B をとれば．B はエルミートなので $B^* = B$

---

(3) ⇒ (1)

$\forall x \in \mathcal{H}$ について $\langle x | Ax \rangle = \langle x | C^* C x \rangle$

$= \langle Cx | Cx \rangle \geq 0$

---

(1) ⇒ (2)

A はエルミートなので，固有値分解を考えると．

$$A = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k|$$

where, λ_k：固有値，$|e_k\rangle$：固有ベクトル

$\forall k \ \lambda_k \geq 0$

今. B を次のように構成する.

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

すると. $B^2 = A$

$$B^2 = \left(\sum_{k=1}^{n} \sqrt{\lambda_k}|e_k\rangle\langle e_k|\right)\left(\sum_{l=1}^{n} \sqrt{\lambda_l}|e_l\rangle\langle e_l|\right)$$

$$= \sum_{k,l=1}^{n} \sqrt{\lambda_k}\sqrt{\lambda_l}\, |e_k\rangle\langle e_k| e_l\rangle\langle e_l|$$

$$= \sum_{k,l=1}^{n} \sqrt{\lambda_k}\sqrt{\lambda_l}\, \delta_{k,l} |e_k\rangle\langle e_l|$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \sqrt{\lambda_k}\sqrt{\lambda_k}\, |e_k\rangle\langle e_k| = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k| = A$$

— 固有ベクトルでの成分表示.

$$A = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} & & & \\ & \sqrt{\lambda_2} & & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \sqrt{\lambda_n} \end{bmatrix}$$

Remark. $B = \sqrt{A}$ と書く.

— 作用素の順序

$$A \geq B \overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow} A - B \geq 0.$$

$$A > B \overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow} A - B > 0.$$

※ 作用素の順序は成分ごとの大小ではなく、引き算したものが非負(正)定値となっている。

2-ヌ 作用素の表現

○ベクトルの表現

$n = \dim \mathcal{H}$. $x \in \mathcal{H}$. $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \cdots, |e_n\rangle$: ONS
(正規直交基底)

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

左から $\langle e_k|$ をかける.

$$\langle e_k | x \rangle = \langle e_k | \left(\sum_{i=1}^{n} x_i | e_i \rangle \right)$$
$$= \sum_{i=1}^{n} x_i \langle e_k | e_i \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i \delta_{ki}$$
$$= x_k$$

よって $\langle e_k | x \rangle$ は x の k 番目の成分となっている.
※物理では波動関数 $x(k)$ に相当する.

Thm (完全性条件, complete relation)
任意の ONS
$|e_k\rangle$ $(k \in \{1, 2, \cdots, n\})$
について,
$$\sum_{k=1}^{n} |e_k\rangle\langle e_k| = I$$
(単位行列, 恒等作用素)

証明
$\forall |x\rangle \in \mathcal{H}$ について,
$$\left(\sum_{k=1}^{n} |e_k\rangle\langle e_k|\right)|x\rangle = \sum_{k=1}^{n} \langle e_k | x \rangle | e_k \rangle$$
$$= \sum_{k=1}^{n} x_k | e_k \rangle$$
$$= |x\rangle$$
$\square$

○作用素の表現

任意のONS $|e_k\rangle$ $k\in\{1,2,\cdots,n\}$ について、

$$A|e_i\rangle=\sum_{j=1}^{n}A_{ji}|e_j\rangle \quad —\ (*)$$

ここで、A_{ji} は作用素 A の表現行列の成分。

<u>A_{ji} を求めたい。</u>

$$A = IAI \quad \text{完全性条件より}$$

$$=\left(\sum_j|e_j\rangle\langle e_j|\right)A\left(\sum_k|e_k\rangle\langle e_k|\right)$$

$$=\sum_k\sum_j\langle e_j|A|e_k\rangle|e_j\rangle\langle e_k|$$

ここで $A|e_i\rangle$ を考えると、

$$A|e_i\rangle=\left(\sum_k\sum_j\langle e_j|A|e_k\rangle|e_j\rangle\langle e_k|\right)|e_i\rangle$$

$$=\sum_k\sum_j\langle e_j|A|e_k\rangle|e_j\rangle\ \delta_{k,i}$$

$$=\sum_j\langle e_j|A|e_i\rangle|e_j\rangle$$

(*)の式と比較することにより

$$A_{ji}=\langle e_j|A|e_i\rangle$$

<u>まとめ</u> $|e_1\rangle,\cdots,|e_n\rangle$: ONSによる作用素の表現

$$A=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\langle e_j|A|e_i\rangle|e_j\rangle\langle e_i|$$

$$=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\langle e_i|A|e_j\rangle|e_i\rangle\langle e_j|$$

$$=\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\langle e_k|A|e_l\rangle|e_k\rangle\langle e_l|$$

※作業変数(i,j,k,lなど)はつけかえてもかわらない。

※正規直交 or 完全性条件が成り立つ基底でなければならない

表現行列の成分は、 $A_{ji} = \langle e_j | A e_i \rangle$ になる。

2-8 トレース

Def

$\{|e_i\rangle\}$: ONS とすると、作用素 A のトレースは、

$$\mathrm{Tr} A := \sum_{i=1}^{n} \langle e_i | A e_i \rangle$$

(表現行列の対角成分の和) と定義される。

Remark.

トレースは ONS に依らない。

∵ 別の ONS を考える。 $\{|f_j\rangle\}_{j=1}^{n}$ をとる。

f によるトレースを $\mathrm{Tr}_{(f)} A$、 e によるそれを $\mathrm{Tr}_{(e)} A$ などと書くことにする。

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_{(f)} A &= \sum_{j=1}^{n} \langle f_j | A | f_j \rangle \\
&= \sum_{j=1}^{n} \langle f_j | I A I | f_j \rangle \qquad \text{完全性条件により} \\
&= \sum_{j=1}^{n} \langle f_j | \left(\sum_{i=1}^{n} |e_i\rangle\langle e_i| \right) A \left(\sum_{k=1}^{n} |e_k\rangle\langle e_k| \right) | f_j \rangle \\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} \langle f_j | e_i \rangle \langle e_i | A | e_k \rangle \langle e_k | f_j \rangle \\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} \langle e_k | f_j \rangle \langle f_j | e_i \rangle \langle e_i | A | e_k \rangle \\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} \langle e_k | \underbrace{\left(\sum_{j=1}^{n} |f_j\rangle\langle f_j| \right)}_{= I} | e_i \rangle \langle e_i | A | e_k \rangle \\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} \langle e_k | e_i \rangle \langle e_i | A | e_k \rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} \delta_{k,i} \langle e_i | A | e_k \rangle \\
&= \sum_{i=1}^{n} \langle e_i | A | e_i \rangle = \mathrm{Tr}_{(e)} A
\end{aligned}$$

∴ トレースは ONS に依らない

トレースの性質

(1) $\mathrm{Tr}A$ は A について線形（線形汎関数）

・$\mathrm{Tr}(A+B) = \mathrm{Tr}A + \mathrm{Tr}B$

$$\because\ \mathrm{Tr}(A+B) = \sum_i \langle e_i|(A+B)|e_i\rangle = \sum_i \langle e_i|A|e_i\rangle + \sum_i \langle e_i|B|e_i\rangle$$
$$= \mathrm{Tr}A + \mathrm{Tr}B.$$

・$\mathrm{Tr}(cA) = c\,\mathrm{Tr}A$.（$c$ はスカラー）

$$\because\ \mathrm{Tr}(cA) = \sum_i \langle e_i|cA|e_i\rangle = c\sum_i \langle e_i|A|e_i\rangle$$
$$= c\,\mathrm{Tr}A.$$

(2) $\mathrm{Tr}AB = \mathrm{Tr}BA$.

$$\because\ \mathrm{Tr}AB = \sum_i \langle e_i|AB|e_i\rangle = \sum_i \langle e_i|AIB|e_i\rangle$$
$$= \sum_i \langle e_i|A\Big(\sum_j |e_j\rangle\langle e_j|\Big)B|e_i\rangle$$
$$= \sum_{i,j} \langle e_i|A|e_j\rangle\langle e_j|B|e_i\rangle.$$

一方，$\mathrm{Tr}BA = \sum_j \langle e_j|BA|e_j\rangle = \sum_j \langle e_j|BIA|e_j\rangle$

$$= \sum_j \langle e_j|B\Big(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\Big)A|e_j\rangle$$
$$= \sum_{i,j} \langle e_j|B|e_i\rangle\langle e_i|A|e_j\rangle$$
$$= \sum_{i,j} \langle e_i|A|e_j\rangle\langle e_j|B|e_i\rangle$$
$$= \mathrm{Tr}AB.$$

$\lrcorner$

(3) $\mathrm{Tr}\, A^* = \overline{\mathrm{Tr}\, A}$ （行列 $A^* = (\overline{a_{ji}})$）

$\because$ $\mathrm{Tr}\, A^* = \sum_i \langle e_i | A^* | e_i \rangle = \sum_i (A^*)_{ii}$

$= \sum_i (\overline{A})_{ii} = \overline{\mathrm{Tr}\, A}$ $\lrcorner$

(4) A がエルミートのとき $(A^* = A)$, $\mathrm{Tr}\, A \in \mathbb{R}$.

$\because$ $\mathrm{Tr}\, A = \mathrm{Tr}\, A^* = \overline{\mathrm{Tr}\, A}$

$\therefore$ $\mathrm{Tr}\, A \in \mathbb{R}$. $\lrcorner$

(5) $A \geq B \Rightarrow \mathrm{Tr}\, A \geq \mathrm{Tr}\, B$ $(\mathrm{Tr}\, A - \mathrm{Tr}\, B \geq 0)$

特に $B = 0$ のとき

$A \geq 0 \Rightarrow \mathrm{Tr}\, A \geq 0$.

$\because$ $\mathrm{Tr}\, A - \mathrm{Tr}\, B = \mathrm{Tr}(A - B) = \sum_i \langle e_i | A - B | e_i \rangle$

$A \geq B$ の定義は $A - B \geq 0$, $\forall |x\rangle \in \mathcal{H} \Rightarrow \langle x | A - B | x \rangle \geq 0$

$\therefore$ $\forall i$ $\langle e_i | A - B | e_i \rangle \geq 0$.

$\therefore$ $\mathrm{Tr}\, A - \mathrm{Tr}\, B \geq 0$. $\lrcorner$

2-9 Hilbert-Schmidt 内積

$$\mathcal{L}(\mathcal{H}) = \{A \mid A : \mathcal{H} \underset{\text{linear}}{\longrightarrow} \mathcal{H}\}$$

$\mathcal{H}$から$\mathcal{H}$への線形写像全体, 正方行列全体.

和 : $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \Rightarrow A + B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$

スカラー倍 : $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}),\ c \in \mathbb{C} \Rightarrow cA \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$

和とスカラー倍に対して閉じているので$\mathcal{L}(\mathcal{H})$は
ベクトル空間になっている.

<u>Def</u> $\mathcal{L}(\mathcal{H})$上の Hilbert-Schmidt 内積

$A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$

$$\langle\langle A, B \rangle\rangle := \mathrm{Tr}\, A^* B$$

内積の条件

右について線形 $A, B_1, B_2 \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned}\langle\langle A, c_1 B_1 + c_2 B_2 \rangle\rangle &= \mathrm{Tr}\, A^* (c_1 B_1 + c_2 B_2) \\ &= c_1 \mathrm{Tr}\, A^* B_1 + c_2 \mathrm{Tr}\, A^* B_2 \\ &= c_1 \langle\langle A, B_1 \rangle\rangle + c_2 \langle\langle A, B_2 \rangle\rangle\end{aligned}$$

左について反線形 $A_1, A_2, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned}\langle\langle c_1 A_1 + c_2 A_2, B \rangle\rangle &= \mathrm{Tr}\, (c_1 A_1 + c_2 A_2)^* B \\ &= \overline{c_1}\, \mathrm{Tr}\, A_1^* B + \overline{c_2}\, \mathrm{Tr}\, A_2^* B \\ &= \overline{c_1} \langle\langle A_1, B \rangle\rangle + \overline{c_2} \langle\langle A_2, B \rangle\rangle\end{aligned}$$

(2) $\overline{\langle\langle A, B\rangle\rangle} = \langle\langle B, A\rangle\rangle$.

∵ $\overline{\langle\langle A, B\rangle\rangle} = \overline{\mathrm{Tr}\, A^*B}$

$= \mathrm{Tr}(A^*B)^* = \mathrm{Tr}\, B^*(A^*)^*$

$= \mathrm{Tr}\, B^*A = \langle\langle B, A\rangle\rangle$ ┘

(3) $\langle\langle A, A\rangle\rangle \geq 0$.

$\langle\langle A, A\rangle\rangle = 0 \Leftrightarrow A = 0$.

∵

$\langle\langle A, A\rangle\rangle = \mathrm{Tr}\, A^*A$.

$A^*A \geq 0$ ∵ $\langle x | A^*A | x\rangle = \langle Ax | Ax\rangle \geq 0$.

∴ 2-8 (5) $A \geq 0 \Rightarrow \mathrm{Tr}\, A \geq 0$ より

$\langle\langle A, A\rangle\rangle \geq 0$. ┘

等号成立条件

$\langle\langle A, A\rangle\rangle = \mathrm{Tr}\, A^*A = \sum_i \langle e_i | A^*A | e_i\rangle$

$= \sum_i \underbrace{\langle Ae_i | Ae_i\rangle}_{\geq 0}$.

$\langle\langle A, A\rangle\rangle = 0$

$\Leftrightarrow \forall i,\ \langle Ae_i | Ae_i\rangle = \|Ae_i\|^2 = 0$.

$\Leftrightarrow \forall i\ \ A|e_i\rangle = 0$.

$\Leftrightarrow A = 0$. ┘

次週 $A \geq 0,\ B \geq 0 \Rightarrow \mathrm{Tr}\, AB \geq 0$.