محاسبات کوانتمی (۲۲۶۷۱) ترم بهار ۱۳۹۱-۱۳۹۰

مدرس: سلمان ابوالفتح بیگی — نویسنده: نادر قاسمی

# جلسه ۲

---

در این درسنامه به مروری کلی از جبر خطی می‌پردازیم که هدف اصلی آن آشنایی با نماد گذاری دیراک [1] و مباحثی از جبر خطی است که در مکانیک کوانتمی مورد استفاده قرار می‌گیرند.

## ۱ فضای برداری

مجموعه $V$ را یک فضای برداری روی میدان اعداد مختلط $\mathbb{C}$ می‌گوییم هرگاه دو عمل جمع بردارها و ضرب اسکالر بر روی آن تعریف شده باشد:

$$+ : \mathrm{V} \longrightarrow \mathrm{V} \quad \text{و} \quad \cdot : \mathrm{V} \longrightarrow \mathrm{V} \tag{۱}$$

بعد فضایی که در آن کار می کنیم را $\dim V = d < \infty$ در نظر می‌گیریم. دیراک بردارهای $V$ را به صورت $|v\rangle$ نشان می‌دهد. در یک فضای برداری یک پایه مشخص می‌کنیم به طوری که هر بردار را بتوان به صورت یکتا بر حسب ترکیبی خطی از اعضای پایه نوشت:

$$\{|v_0\rangle, |v_1\rangle, |v_2\rangle, \cdots, |v_{d-1}\rangle\}. \tag{۲}$$

$$\forall |v\rangle \in V, \quad |v\rangle = \sum_{i=0}^{d-1} \alpha_i |v_i\rangle,$$

و لذا به هر بردار، می‌توان یک بردار ستونی نسبت داد

$$|v\rangle \mapsto \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{d-1} \end{pmatrix}.$$

گاهی برای سادگی اعضای پایه $|v_i\rangle$ را با $|i\rangle$ نشان می‌دهیم.

---

[1] Dirac's notation

## ۲ ضرب داخلی

عمل دوتایی $(.,.) : V \times V \longrightarrow \mathbb{C}$ را یک ضرب داخلی می‌گوییم هرگاه در شرایط زیر صدق کند:

۱. نسبت به مولفه دوم خطی باشد:

$$(|v\rangle, \alpha|\omega\rangle + |\omega'\rangle) = (|v\rangle, |\omega\rangle) + \alpha(|v\rangle, |\omega'\rangle)$$

۲. وقتی جای بردارها را عوض می کنیم مزدوج شود:

$$(|v\rangle, |\omega\rangle) = (|\omega\rangle, |v\rangle)^*$$

۳. حاصلضرب داخلی هر بردار با خودش مثبت باشد:

$$(|v\rangle, |v\rangle) \geq 0$$

$$(|v\rangle, |v\rangle) = 0 \Longleftrightarrow |v\rangle = 0$$

از خاصیت‌های ۱ و ۲ نتیجه می شود که :

$$(\alpha|v\rangle, |\omega\rangle) = \alpha^*(|v\rangle, |\omega\rangle)$$

حال می‌توان برای فضای $V$ پایه‌ی متعامد یکه‌ی $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \ldots, |d-1\rangle\}$ را در نظر گرفت. به این معنی که :

$$(|i\rangle, |j\rangle) = \delta_{ij}$$

که در آن $\delta_{ij}$ «دلتای کرونکر» به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j, \\ 0 & i \neq j. \end{cases}$$

در این صورت هر بردار در فضای $V$ را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$|v\rangle = \sum_{i=0}^{d-1} (|i\rangle, |v\rangle)|i\rangle.$$

### ۱.۲ اندازه روی فضای $V$

در یک فضای ضرب داخلی، نرم[۲] روی $V$ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\| |v\rangle \| = (|v\rangle, |v\rangle)^{\frac{1}{2}}.$$

فاصله بین دو بردار را نیز به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$d(|v\rangle, |\omega\rangle) = \| |v\rangle - |\omega\rangle \|.$$

بنابراین $d(\cdot,\cdot)$ یک متر است چون نامساوی مثلث برای آن برقرار است و $d(|v\rangle, |\omega\rangle) = 0$ است اگر و فقط اگر $|\omega\rangle = |v\rangle$.

[۲] Norm

### ۲.۲ فضای دوگان

برای فضای برداری $V$، فضای دوگان[۳] آن به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$V^* = \{f : V \to \mathbb{C} | \text{ خطی باشد } f\}$$

حال اگر فضای برداری ضرب داخلی باشد و بُعد فضا متناهی باشد یک تناظر یک به یک بین فضای برداری و فضای دوگان آن وجود خواهد داشت.

$$T : V \longrightarrow V^*$$

$$T(|\upsilon\rangle) = f_{|\upsilon\rangle}$$

$$f_{|\upsilon\rangle}(|\omega\rangle) = (|\upsilon\rangle, |\omega\rangle)$$

از آنجا که ضرب داخلی نسبت به مؤلفه‌ی دوم خطی است، در رابطه بالا $f_{|\upsilon\rangle}$ خطی است و $f_{|\upsilon\rangle} \in V^*$. یک به یک و پوشا بودن $T$ به راحتی قابل بررسی است.

$$f_{|\upsilon\rangle}(|\omega\rangle) = (|\upsilon\rangle, |\omega\rangle) = (\alpha_0^*, \alpha_1^*, \cdots, \alpha_{d-1}^*) \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{d-1} \end{pmatrix} = \sum_{i=0}^{d-1} \alpha_i^* \beta_i$$

که در آن

$$\langle \upsilon | := f_{|\upsilon\rangle} = (\alpha_0^*, \alpha_1^*, \cdots, \alpha_{d-1}^*),$$

$$|\omega\rangle = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{d-1} \end{pmatrix},$$

بردارهای متناظر در پایه‌ی متعامد یکه‌ی $\{|\upsilon_0\rangle, \ldots, |\upsilon_{d-1}\rangle\}$ هستند.

بنابراین به ازای هر بردار $|\upsilon\rangle$ ،یک بردار متناظر در فضای دوگان وجود دارد که با $\langle \upsilon|$ نمایش داده می‌شود و یک «بِرا» نامیده می‌شود، و داریم:

$$(|\upsilon\rangle, |\omega\rangle) = f_{|\upsilon\rangle}(|\omega\rangle) = \langle \upsilon || \omega \rangle \equiv \langle \upsilon | \omega \rangle.$$

## ۳ عملگرهای خطی

مجموعه‌ی عملگرهای خطی از یک فضای $V$ به فضای $W$ را با

$$\mathbf{L}(V, W) = \{M : V \longrightarrow W | \quad \text{ خطی باشد } M\}$$

---

[۳] Dual space

نمایش می‌دهیم. اگر یک پایه‌ی متعامد یکه‌ی $\{|\upsilon_0\rangle, |\upsilon_1\rangle, |\upsilon_2\rangle, \cdots, |\upsilon_{d-1}\rangle\}$ را برای $V$ و یک پایه‌ی متعامد یکه $\{|\omega_0\rangle, |\omega_1\rangle, |\omega_2\rangle, \cdots, |\omega_{d'-1}\rangle\}$ را برای $W$ در نظر بگیریم، به هر عملگر خطی $M$ می‌توان یک ماتریس نسبت داد.

**مثال:** برای هر $0 \leq i \leq d-1$ و $0 \leq j \leq d'-1$ تعریف کنید:

$$E_{ij} : V \longrightarrow W$$

$$E_{ij}|\upsilon\rangle = \langle \upsilon_i|\upsilon\rangle|\omega_j\rangle.$$

از آنجا که $\langle \upsilon_i|\upsilon\rangle$ یک عدد است می توان آنرا سمت راست $|\omega_j\rangle$ برد

$$E_{ij}|\upsilon\rangle = |\omega_j\rangle\langle \upsilon_i|\upsilon\rangle \Rightarrow E_{ij} = |\omega_j\rangle\langle \upsilon_i|$$

$|\omega_j\rangle$ یک بردار ستونی و $\langle \upsilon_i|$ یک بردار سطری است، پس حاصل ضرب آنها یک ماتریس است. در این جا به وضوح سادگی نمادگذاری دیراک را می بینیم.

**مثال:**

$$|\upsilon\rangle = \sum_{i=0}^{d-1}(|\upsilon_i\rangle, |\upsilon\rangle)|\upsilon_i\rangle = \sum_{i=0}^{d-1}\langle \upsilon_i|\upsilon\rangle|\upsilon_i\rangle = \sum_{i=0}^{d-1}|\upsilon_i\rangle\langle \upsilon_i||\upsilon\rangle.$$

در نتیجه $I = \sum_{i=0}^{d-1}|\upsilon_i\rangle\langle \upsilon_i|$ عملگر همانی است. یعنی برای هر پایه‌ی متعامد یکه‌ی $\{|\upsilon_0\rangle, \ldots, |\upsilon_{d-1}\rangle\}$ می‌توان عملگر $I$ را به صورت زیر نوشت

$$I = \sum_{i=0}^{d-1}|\upsilon_i\rangle\langle \upsilon_i|.$$

حال برای عملگر خطی دلخواه $M : V \longrightarrow W$ داریم

$$\begin{aligned} M = I_W M I_V &= \left(\sum_{j=0}^{d'-1}|\omega_j\rangle\langle \omega_j|\right) M \left(\sum_{i=0}^{d-1}|\upsilon_i\rangle\langle \upsilon_i|\right) \\ &= \sum_{j=0}^{d-1}\sum_{i=0}^{d-1}|\omega_j\rangle\langle \omega_j|M|\upsilon_i\rangle\langle \upsilon_i| \\ &= \sum_{j=0}^{d-1}\sum_{i=0}^{d-1}\langle \omega_j|M|\upsilon_j\rangle|\omega_j\rangle\langle \upsilon_i|. \end{aligned}$$

توجه کنید که در اینجا منظور از $\langle \omega|M|\upsilon\rangle$ این است که ابتدا $M$ باید روی $|\upsilon\rangle$ اثر می‌کند: $\langle \omega|M|\upsilon\rangle = (|\omega\rangle, M|\upsilon\rangle)$ . بنابراین

$$M = \sum_{ij}\langle \omega_j|M|\upsilon_i\rangle E_{ij} = \sum_{ij}\gamma_{ij}E_{ij}$$

که در آن $\gamma_{ij} = \langle \omega_j|M|\upsilon_i\rangle$ . این همان نمایش ماتریسی عملگر $M$ در پایه‌های مشخص شده برای $V$ و $W$ است.

$\mathbf{L}(V)$

مجموعه عملگرهای خطی از یک فضای به خودش را با $\mathbf{L}(V) = \mathbf{L}(V, V)$ نشان می‌دهیم. $N \in \mathbf{L}(V)$ به صورت

$$N = \sum_{i=0}^{d-1} \lambda_i |\upsilon_i\rangle\langle\upsilon_i|$$

را عملگری قطری در پایه‌ی متعامد یکه‌ی $\{|\upsilon_0\rangle, |\upsilon_1\rangle, |\upsilon_2\rangle, \cdots, |\upsilon_d - 1\rangle\}$ می‌گوییم. $|\upsilon_j\rangle$ بردار ویژه‌ی $N$ با مقدار ویژه‌ی $\lambda_j$ است:

$$N|\upsilon_j\rangle = \sum_{i=0}^{d-1} \lambda_i |\upsilon_i\rangle\langle\upsilon_i|.|\upsilon_j\rangle = \lambda_j |\upsilon_j\rangle.$$

## ۴ الحاقی

برای عملگر $M : V \to W$ الحاقی[۴] آن عملگری است $M^\dagger : W \to V$ که

$$(|\omega\rangle, M|\upsilon\rangle) = (M^\dagger|\omega\rangle, |\upsilon\rangle).$$

به راحتی قابل بررسی است که $E_{ij}^\dagger = (|\omega_j\rangle\langle\upsilon_i|)^\dagger = |\upsilon_i\rangle\langle\omega_j|$. همچنین اثبات خواص زیر ساده است:

۱. $(M + \alpha N)^\dagger = M^\dagger + \alpha^* N^\dagger$

۲. $(MN)^\dagger = N^\dagger M^\dagger$

۳. $(M^\dagger)^\dagger = M$

در نتیجه برای $M = \sum_{i,j} \gamma_{ij} |\omega_j\rangle\langle\upsilon_i|$ خواهیم داشت

$$M^\dagger = \sum_{i,j} \gamma_{ij}^* |\upsilon_i\rangle\langle\omega_j|.$$

یعنی الحاقی یک عملگر در پایه‌های $\{|\upsilon_0\rangle, |\upsilon_1\rangle, |\upsilon_2\rangle, \cdots, |\upsilon_{d-1}\rangle\}$ و $\{|\omega_0\rangle, |\omega_1\rangle, |\omega_2\rangle, \cdots, |\omega_{d'-1}\rangle\}$ از مزدوج و سپس ترانهاده کردن ماتریس متناظر آن بدست می‌آید.

**تعریف:** $M \in \mathbf{L}(V)$ را هرمیتی[۵] (خود الحاق ) می گوییم اگر $M^\dagger = M$ .

$U \in \mathbf{L}(V)$ را یکانی[۶] می گوییم اگر $UU^\dagger = U^\dagger U = I$ .

$T \in \mathbf{L}(V)$ را بهنجار[۷] می گوییم اگر با الحاقی خود جابجا شود : $TT^\dagger = T^\dagger T$ .

[۴] Adjoint
[۵] Hermitian
[۶] Unitary
[۷] Normal

عملگرهای هرمیتی و یکانی، بهنجار هستند.

**قضیه:** $M$ در یک پایه‌ی متعامد یکه قطری شدنی است اگر و فقط اگر $M$ بهنجار باشد .

**قضیه:**

- مقادیر ویژه عملگر نرمال $M$ همگی حقیقی اند اگر و فقط اگر $M$ هرمیتی باشد.
- مقادیر ویژه عملگر نرمال $M$ همگی فازند اگر و فقط اگر $M$ یکانی باشد. مقدار ویژه‌ی $\lambda$ فاز است اگر $|\lambda| = 1$ .

**قضیه:** $U$ ضرب داخلی را حفظ می کند اگر و فقط اگر $U$ یکانی باشد

$$(U|\omega\rangle, U|v\rangle) = (|\omega\rangle, |v\rangle) \Leftrightarrow UU^\dagger = U^\dagger U = I.$$

**قضیه:** دو عملگر نرمال $T$ و $S$ در یک پایه‌ی متعامد یکه، همزمان قطری شدنی هستند اگر و فقط اگر جابجا شوند یعنی

$$[T, S] = TS - ST = 0.$$

### ۱.۴ مثبت نیمه معین

عملگر $M \in \mathbf{L}(V)$ را مثبت نیمه معین[۸] گویند هرگاه

$$\forall|v\rangle \in V : \quad \langle v|M|v\rangle \geqslant 0.$$

در این صورت می‌نویسم $M \geq 0$. همچنین $M \in \mathbf{L}(V)$ را مثبت معین[۹] گویند هرگاه

$$\forall|v\rangle : \langle v|M|v\rangle > 0,$$

و می‌نویسیم $M > 0$.

**قضیه:** $M$ مثبت نیمه معین است اگر و فقط اگر

- $M$هرمیتی باشد: $M^\dagger = M$ و
- همه مقادیر ویژه $M$ نامنفی باشند

**مثال:**

- به ازای هر $A \in \mathbf{L}(V)$، $AA^\dagger$ مثبت نیمه معین است

[۸] Positive semidefinite
[۹] Positive definite

- اگر $M$ یک عملگر مثبت نیمه معین باشد آنگاه

$$\forall A : A^\dagger M A \geq 0.$$

- به ازای $M \geq 0$ و $\alpha \in \mathbb{R}$ که $\alpha > 0$ داریم $\alpha M \geq 0$ .
- به ازای هر $M, N \geq 0$ داریم $M + N \geq 0$ .

**تمرین:** برای هر $M, N \geq 0$ که $[M, N] = 0$، نشان دهید $MN \geq 0$ .

## ۵ Singular value decomposition

قضیه‌ی زیر قوی‌تر از قضیه‌ای است که در کتاب آورده شده ولی اثبات آن به همان شیوه است.

**قضیه:** برای هر ماتریس $A_{m\times n}$، ماتریس‌های $U_{m\times \ell}$، $D_{\ell\times\ell}$ و $V_{\ell\times n}$ وجود دارند که $D$ قطری است و $D > 0$ (یعنی همه اعضای روی قطر آن حقیقی و مثبت هستند) و $U^\dagger U = I_\ell = VV^\dagger$ و

$$A = UDV.$$

## ۶ ضرب تانسوری

نوشتاری جداگانه برای این بخش در نظر گرفته شده است.