

Матричный формализм

М. В. Волков

Уральский федеральный университет
Институт естественных наук и математики
кафедра алгебры и фундаментальной информатики

2022/2023 учебный год

Напомним *физико-математический словарь* из предыдущей лекции:

Квантовая система	(Конечномерное) гильбертово пространство H
Состояние системы	Неотрицательный оператор $R: H \rightarrow H$ со следом 1
Наблюдаемая	Самосопряженный оператор $A: H \rightarrow H$
Результаты наблюдения	Собственные значения оператора A
Ожидаемое значение A в состоянии R	$\text{tr}(RA)$
Преобразование системы	Унитарный оператор на H

Цель данной лекции — обсудить понятия из правого столбца, напомнить их свойства и зафиксировать некоторые обозначения.

В данном курсе *гильбертово пространство* H — это конечномерное линейное (векторное) пространство над полем комплексных чисел \mathbb{C} , в котором определено *скалярное произведение*, т.е. отображение $\langle \bullet | \bullet \rangle: H \times H \rightarrow \mathbb{C}$, удовлетворяющее следующим аксиомам:

- 1 $\forall x, y_1, y_2 \in H \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad \langle x | \alpha y_1 + \beta y_2 \rangle = \alpha \langle x | y_1 \rangle + \beta \langle x | y_2 \rangle$;
- 2 $\forall x, y \in H \quad \langle y | x \rangle = \overline{\langle x | y \rangle}$;
- 3 $\forall x \in H \quad \langle x | x \rangle \in \mathbb{R}$ и $\langle x | x \rangle \geq 0$, причем $\langle x | x \rangle = 0$ только при $x = 0$.

Другими словами, это в точности то, что курсе линейной алгебры второго семестра называлось *унитарным пространством*.

В силу 1 и 2 скалярное произведение *полулинейно* по первому аргументу:

$$\forall x_1, x_2, y \in H \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C} \quad \langle \alpha x_1 + \beta x_2 | y \rangle = \bar{\alpha} \langle x_1 | y \rangle + \bar{\beta} \langle x_2 | y \rangle.$$

Напомним еще формулу, выражающую скалярное произведение векторов через их координаты в ортонормированном базисе:

$$\text{если } x = \begin{bmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \vdots \\ \zeta_n \end{bmatrix}, \text{ а } y = \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{bmatrix}, \text{ то } \langle x | y \rangle = \sum_{i=1}^n \bar{\zeta}_i \eta_i.$$

Отметим отличие в обозначениях: угловые скобки и $|$ вместо запятой между аргументами произведения. Это — часть *обозначений Дирака*.

Будем пользоваться обозначениями $\langle x|$ для векторов-строк (*бра-вектора*) и $|y\rangle$ для векторов-столбцов (*кет-вектора*). Мы делим обозначение $\langle x|y\rangle$ (bra-c-ket) на две «половинки». При этом $\langle x| = |x\rangle^*$, где звездочка обозначает *эрмитово сопряжение матриц*, т.е. транспонирование плюс комплексное сопряжение. Следовательно, скалярное произведение $\langle x|y\rangle$ равно произведению $\langle x| \cdot |y\rangle$ как матриц (по правилу «строка на столбец»).

Действительно, если $|x\rangle = \begin{bmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \vdots \\ \zeta_n \end{bmatrix}$, а $|y\rangle = \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{bmatrix}$, то $\langle x| = [\bar{\zeta}_1 \ \bar{\zeta}_2 \ \dots \ \bar{\zeta}_n]$ и

$$\langle x| \cdot |y\rangle = [\bar{\zeta}_1 \ \bar{\zeta}_2 \ \dots \ \bar{\zeta}_n] \cdot \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^n \bar{\zeta}_i \eta_i = \langle x|y\rangle.$$

Мы фиксируем некоторый ортонормированный базис в H и отождествляем вектора из H с их координатными *столбцами* в этом базисе.

Когда $H := H_2$ двумерно, мы обозначаем базисные вектора через $|0\rangle$ и $|1\rangle$.

Таким образом, $|0\rangle := \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, а $|1\rangle := \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$.

В общем случае мы будем работать с 2^n -мерным пространством H_{2^n} — n -й *тензорной степенью* пространства H_2 .

Напомним, что если K и L — конечномерные векторные пространства, $\{e_i\}_{i=1,\dots,n}$ — базис в K , а $\{f_j\}_{j=1,\dots,m}$ — базис в L , то их *тензорным произведением* $K \otimes L$ называется векторное пространство с базисом $e_i \otimes f_j$.

Базис $H_{2^n} := \underbrace{H_2 \otimes \dots \otimes H_2}_{n \text{ раз}} \otimes H_2$ состоит из всевозможных векторов вида

$|k_{n-1}\rangle \otimes \dots \otimes |k_1\rangle \otimes |k_0\rangle$, где $k_{n-1}, \dots, k_1, k_0 \in \{0, 1\}$.

Будем записывать такой вектор как $|k_{n-1} \dots k_1 k_0\rangle$ или просто как $|k\rangle$, где k — натуральное число с двоичным представлением $k_{n-1} \dots k_1 k_0$.

Итак, базис H_{2^n} состоит из векторов $|k\rangle$, где $k = 0, 1, \dots, 2^n - 1$.

Например, базис пространства H_4 состоит из векторов

$$\begin{aligned}
 |0\rangle = |00\rangle &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, & |1\rangle = |01\rangle &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \\
 |2\rangle = |10\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, & |3\rangle = |11\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.
 \end{aligned}$$

Это согласуется с определением **тензорного произведения** матриц: если

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}, \text{ а } B = \begin{bmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{p1} & \cdots & b_{pq} \end{bmatrix}, \text{ то}$$

$$A \otimes B := \begin{bmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix}.$$

Что сделано и что осталось сделать

Квантовая система	(Конечномерное) гильбертово пространство H
— сейчас мы находимся здесь —	
Состояние системы	Неотрицательный оператор $R: H \rightarrow H$ со следом 1
Наблюдаемая	Самосопряженный оператор $A: H \rightarrow H$
Результаты наблюдения	Собственные значения оператора A
Ожидаемое значение A в состоянии R	$\text{tr}(RA)$
Преобразование системы	Унитарный оператор на H

Оператор $R: H \rightarrow H$ называется *неотрицательным*, если $\langle u | Ru \rangle$ — неотрицательное действительное число для любого $u \in H$.

Докажем, что неотрицательный оператор будет самосопряженным.

Лемма

Если $\langle u | Ru \rangle = 0$ для всех $u \in H$, то $R = 0$.

Доказательство. Возьмем $u = x + y$. Тогда

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x + y | R(x + y) \rangle = \langle x | Rx \rangle + \langle x | Ry \rangle + \langle y | Rx \rangle + \langle y | Ry \rangle \\ &= \langle x | Ry \rangle + \langle y | Rx \rangle, \quad \text{так как } \langle x | Rx \rangle = \langle y | Ry \rangle = 0. \end{aligned}$$

Теперь возьмем $u = x - iy$. Тогда

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x - iy | R(x - iy) \rangle = \langle x | Rx \rangle - i\langle x | Ry \rangle + i\langle y | Rx \rangle + \langle y | Ry \rangle \\ &= -i(\langle x | Ry \rangle - \langle y | Rx \rangle), \quad \text{так как } \langle x | Rx \rangle = \langle y | Ry \rangle = 0. \end{aligned}$$

Итак, $\langle x | Ry \rangle + \langle y | Rx \rangle = 0$ и $\langle x | Ry \rangle - \langle y | Rx \rangle = 0$. Складывая эти два равенства, получаем $\langle x | Ry \rangle = 0$. Взяв в роли x вектор Ry , заключаем, что $Ry = 0$. Поскольку в роли y можно выбрать любой вектор из H , заключаем, что $R = 0$.

Напомним определяющее свойство *сопряженного оператора*:

$$\langle x | Ay \rangle = \langle A^* x | y \rangle.$$

Оператор $A: H \rightarrow H$ называется *самосопряженным*, если $A = A^*$.

Предложение

Если $\langle u | Ru \rangle \in \mathbb{R}$ для всех $u \in H$, то R — самосопряженный оператор.

Доказательство. Поскольку $\langle u | Ru \rangle$ — действительное число, имеем

$$\langle u | Ru \rangle = \overline{\langle u | Ru \rangle} = \langle Ru | u \rangle = \langle u | R^* u \rangle.$$

Поэтому $\langle u | (R - R^*)u \rangle = 0$ для любого $u \in H$. Применяя лемму, заключаем, что $R - R^* = 0$, т.е. $R = R^*$.

Наш словарь говорит, что состояния системы — это неотрицательные операторы со следом 1. Типичный такой оператор — это произведение $|x\rangle\langle x|$, где x — вектор длины 1. Действительно, раз x — вектор длины 1, x можно дополнить до ортонормированного базиса в H . В этом базисе

$$|x\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \langle x| = [1 \ 0 \ \dots \ 0] \quad \text{и} \quad |x\rangle\langle x| = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}.$$

След матрицы для $|x\rangle\langle x|$ равен 1, но след оператора не зависит от выбора базиса, в котором вычисляется его матрица. Значит, $\text{tr}(|x\rangle\langle x|) = 1$.

Теперь возьмем произвольный вектор $u \in H$ и подсчитаем $\langle u | (|x\rangle\langle x|)u \rangle$.

Продолжая вычислять в том же базисе, имеем $(|x\rangle\langle x|)u = \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$, где α —

первая координата вектора u . Отсюда $\langle u | (|x\rangle\langle x|)u \rangle = \bar{\alpha}\alpha \geq 0$.

Итак, *каждый вектор длины 1 определяет состояние системы.*

Что сделано и что осталось сделать

Квантовая система	(Конечномерное) гильбертово пространство H
Состояние системы	Неотрицательный оператор $R: H \rightarrow H$ со следом 1
— сейчас мы находимся здесь —	
Наблюдаемая	Самосопряженный оператор $A: H \rightarrow H$
Результаты наблюдения	Собственные значения оператора A
Ожидаемое значение A в состоянии R	$\text{tr}(RA)$
Преобразование системы	Унитарный оператор на H

Наш словарь говорит, что наблюдаемые — это самосопряженные операторы на H , а возможные результаты наблюдения за наблюдаемой A — это собственные значения оператора A .

Собственные значения самосопряженного оператора действительны.

Далее сказано, что ожидаемое значение A в состоянии R — это $\text{tr}(RA)$.

Понятно, что это ожидаемое значение тоже должно быть действительным.

Однако то, что $\text{tr}(RA)$ — действительное число, отнюдь не очевидно (ведь оператор RA не обязан быть самосопряженным). Докажем это.

Предложение

Если A и B — самосопряженные матрицы, то $\text{tr}(AB) \in \mathbb{R}$.

Первое доказательство основано на прямом вычислении. Пусть

$A = (\alpha_{ij})_{n \times n}$, $B = (\beta_{ij})_{n \times n}$. Тогда

$\text{tr}(AB) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \beta_{ji} = \sum_{i,j=1}^n \alpha_{ij} \beta_{ji}$. С другой стороны,

$$\overline{\text{tr}(AB)} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \overline{\alpha_{ij} \beta_{ji}} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_{ji} \beta_{ij} \quad (\text{так как } A = A^* \text{ и } B = B^*)$$

$$= \sum_{i,j=1}^n \alpha_{ji} \beta_{ij} = \sum_{i,j=1}^n \alpha_{ij} \beta_{ji} = \text{tr}(AB).$$

Второе доказательство не оперирует прямо с элементами матриц A и B .

$$\begin{aligned} \overline{\operatorname{tr}(AB)} &= \operatorname{tr}(\overline{AB}) = \operatorname{tr}(A^T B^T) && \text{так как } A = A^* = \overline{A}^T \text{ и } B = B^* = \overline{B}^T \\ &= \operatorname{tr}((BA)^T) && \text{так как } A^T B^T = (BA)^T \\ &= \operatorname{tr}(BA) && \text{так как } \operatorname{tr}(C) = \operatorname{tr} C^T \text{ для любой матрицы } C \\ &= \operatorname{tr}(AB) && \text{так как } \operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA). \end{aligned}$$

Здесь применено хорошо известное свойство $\operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA)$. Оно верно и в ситуации, когда A и B — матрицы размеров $n \times k$ и $k \times n$ соответственно.

Используем свойство $\operatorname{tr}(AB) = \operatorname{tr}(BA)$, чтобы вычислить ожидаемое значение наблюдаемой A в состоянии, определяемом вектором x длины 1.

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(|x\rangle\langle x|A) &= \operatorname{tr}(\langle x|A|x\rangle) && \text{переставили множители } |x\rangle \text{ и } \langle x|A \\ &= \langle x|A|x\rangle && \text{так как } \langle x|A|x\rangle \text{ — число.} \end{aligned}$$

Итак, ожидаемое значение наблюдаемой A в состоянии, определяемом вектором x длины 1, равно $\langle x|A|x\rangle$. Это действительное число, которое можно понимать и как скалярное произведение кет-векторов $|x\rangle$ и $A|x\rangle$.

Что сделано и что осталось сделать

Квантовая система	(Конечномерное) гильбертово пространство H
Состояние системы	Неотрицательный оператор $R: H \rightarrow H$ со следом 1
Наблюдаемая	Самосопряженный оператор $A: H \rightarrow H$
Результаты наблюдения	Собственные значения оператора A
Ожидаемое значение A в состоянии R	$\text{tr}(RA)$
— сейчас мы находимся здесь —	
Преобразование системы	Унитарный оператор на H

Оператор $U: H \rightarrow H$ называется **унитарным**, если $U^* = U^{-1}$.

Эквивалентное определение: $\langle x | y \rangle = \langle Ux | Uy \rangle$ для всех $x, y \in H$.

В терминах матрицы — столбцы составляют ортонормированный базис.

Мы постоянно используем **преобразование Адамара** (Hadamard).

На H_2 оно задается матрицей $R_2 := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$.

Для $H_{2^n} = \underbrace{H_2 \otimes \cdots \otimes H_2}_{n \text{ раз}} \otimes H_2$ матрицей преобразования Адамара будет

соответствующая тензорная степень матрицы R_2 , т.е.

$$R_{2^n} := \underbrace{R_2 \otimes \cdots \otimes R_2}_{n \text{ раз}}.$$

Например, $R_4 = R_2 \otimes R_2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$.

Применение преобразования Адамара к вектору $|0\rangle$ дает вектор, в котором «равномерно» представлены все базисные вектора. Например,

$$R_4|0\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle + |3\rangle).$$