

# 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  $\forall x \in H \quad \langle x | x \rangle \in \mathbb{R} \text{ и } \langle x | x \rangle \geq 0, \text{ причем } \langle x | x \rangle = 0 \text{ только при } x = 0.$

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  $\alpha$  —

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,

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