第 3 章　线性代数基础

前面章节介绍了狄拉克符号，并用它描述了量子态，定义了张量积、内积及外积。这些定义与线性代数中讲的完全一致，但狄拉克符号的引入使得很多运算更简洁明了。本章将进一步介绍与量子计算相关的线性代数知识。

3.1　线性无关与基

设 $|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle$ 是向量空间 V 中 n 个向量，若 $\forall \alpha_i \in \mathbb{C}$ 且有 $\sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i |v_i\rangle = 0$ 时蕴含 $\alpha_i = 0$，$i = 1, 2, \cdots, n$，则称 $|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle$ 是线性无关的。

若

$$\langle v_i | v_j \rangle = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \tag{3.1}$$

则称 $\{|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle\}$ 是一组正交模向量组。进一步，若 $\forall |v\rangle \in V$，都存在 $\alpha_1, \cdots, \alpha_n \in \mathbb{C}$ 使得 $|v\rangle = \sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i |v_i\rangle$，则称 $\{|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle\}$ 是 V 上的一组正交模基，并称 n 为 V 的维数，记为 $\dim(V)$。

3.2　线性算子与矩阵

设 V 和 W 是任意两个向量空间，A 是 V 到 W 的映射且满足 $\forall |v_i\rangle \in V$，$\forall a_i \in \mathbb{C}$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$ 有 $A\left(\sum\limits_{i=1}^{n} a_i |v_i\rangle\right) = \sum\limits_{i=1}^{n} a_i A |v_i\rangle$，则称 A 是 V 到 W 的一个线性算子。

下面讨论矩阵与线性算子之间的关系。设 V 和 W 是两向量空间，且 $\dim(V) = n, \dim(W) = m$，设 $A = [a_{ij}]_{m \times n}$ 是 $m \times n$ 矩阵，设 $\{|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle\}$ 是 V 的一组正交模基，$\{|w_1\rangle, \cdots, |w_m\rangle\}$ 是 W 的一组正交模基，定义 V 到

W 的一个映射，$\forall c_j \in \mathbb{C}$，$j = 1, 2, \cdots, n$，$T_A\left(\sum_{j=1}^{n} c_j|v_j\rangle\right) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}c_j|w_i\rangle$，则可证明 T_A 是 V 到 W 的一个线性算子。

若 T 是 V 到 W 的一个线性算子，$\{|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle\}$ 和 $\{|w_1\rangle, \cdots, |w_m\rangle\}$ 分别是 V 和 W 的正交模基，设 $T|v_j\rangle = \sum_{i=1}^{m} a_{ij}|w_i\rangle$，$j = 1, 2, \cdots, n$， 则 T 对应一个 $m \times n$ 矩阵 $A = [a_{ij}]_{m\times n}$。由此可得到如下定理。

定理 3.1　设 V 和 W 分别是 n 和 m 维向量空间，则所有 $m \times n$ 矩阵集与 V 到 W 的所有线性算子集之间存在一一对应。

实际上，量子计算基于复欧氏空间 $\mathbb{C}^n$ 上讨论，我们把 n 维向量空间看作 $\mathbb{C}^n$ 即可。

3.3　Pauli 矩阵

以下四个矩阵称为 Pauli 矩阵：

$$\begin{aligned} &\sigma_0 = I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, & &\sigma_1 = \sigma_x = X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \\ &\sigma_2 = \sigma_y = Y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, & &\sigma_3 = \sigma_z = Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{3.2}$$

在向量空间 $\mathbb{C}^2$ 上，由于 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 为 $\mathbb{C}^2$ 的一组正交模基，Pauli 矩阵分别等于如下四个线性算子：

$$T_I = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \tag{3.3}$$

$$T_X = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \tag{3.4}$$

$$T_Y = -i(|0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|) \tag{3.5}$$

$$T_Z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \tag{3.6}$$

3.4　Cauchy-Schwarz 不等式

下面用一个定理描述 Cauchy-Schwarz 不等式。

定理 3.2　对 Hilbert 空间中任意两个向量 $|v\rangle$ 和 $|w\rangle$（这里可以不要求单位向量），有 $|\langle v|w\rangle|^2 \leqslant \langle v|v\rangle\langle w|w\rangle$，且等号成立当且仅当 $|v\rangle$ 与 $|w\rangle$ 线性相关。

证明 $|v\rangle$ 为非零向量，否则自然成立。设 $|i_0\rangle = \dfrac{|v\rangle}{\sqrt{\langle v|v\rangle}}$，并将 $|i_0\rangle$ 扩张成空间的一组标准正交基 (也称为正交模基)，记为 $\{|j\rangle\}$，则

$$\begin{aligned}
|\langle v|w\rangle|^2 &= \langle w|v\rangle\langle v|w\rangle &(3.7)\\
&= \langle w|i_0\rangle\langle i_0|w\rangle\langle v|v\rangle &(3.8)\\
&\leqslant \sum_j \langle w|j\rangle\langle j|w\rangle\langle v|v\rangle &(3.9)\\
&= \langle w|\left(\sum_j |j\rangle\langle j|\right)|w\rangle\langle v|v\rangle &(3.10)\\
&= \langle w|w\rangle\langle v|v\rangle &(3.11)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{等号成立} &\Leftrightarrow \text{当 } j \neq i_0 \text{时，} \langle w|j\rangle = 0 &(3.12)\\
&\Leftrightarrow |w\rangle = \sum_j \alpha_j|j\rangle\text{且当 } j \neq i_0\text{时，} \alpha_j = 0 &(3.13)\\
&\Leftrightarrow |w\rangle = \alpha_{i_0}|i_0\rangle = \frac{\alpha_{i_0}|v\rangle}{\sqrt{\langle v|v\rangle}} &(3.14)
\end{aligned}$$

□

3.5 特征值与特征向量

设 A 是向量空间 V 上的线性算子，$|v\rangle$ 是 V 中一个非零向量，若 $A|v\rangle = \lambda|v\rangle$，其中 λ 是复数，则称 $|v\rangle$ 为 A 的特征向量，λ 为关于 $|v\rangle$ 的特征值。实际上，令特征函数 $c(\lambda) = \det(A - \lambda I) = 0$，可求出矩阵 A 的所有特征值，其中 $\det(A)$ 表示矩阵 A 的行列式。称上述方程 $\det(A - \lambda I) = 0$ 为关于 A 的特征方程。

关于特征值 λ 的特征空间为集合 $\{|v\rangle \in V|\ \ A|v\rangle = \lambda|v\rangle\}$（该集合是 V 的子空间，也称为关于 λ 的特征子空间）。若 $A = \sum\limits_i \lambda_i|i\rangle\langle i|$，其中 $|i\rangle$ 为 A 的特征向量且 $\{|i\rangle\}$ 形成一组正交模基，λ_i 为关于 $|i\rangle$ 的特征值，则称其为 A 的对角表示。然而，并非所有线性算子都存在对角表示。若线性算子 A 存在对角表示，则称 A 是可对角化的。

3.6　伴随算子和 Hermitian 算子

设 A 是 Hilbert 空间 V 上的线性算子，若存在 V 上的线性算子 B 使得 $\forall|v\rangle,|w\rangle \in V$，有 $(|v\rangle, A|w\rangle) = (B|v\rangle, |w\rangle)$，则称 B 为 A 的伴随算子（或 Hermitian 共轭算子），记为 $A^\dagger$。事实上，$A^\dagger$ 为 A 的共轭转置矩阵。

定义 3.1　若线性算子（或矩阵）A 满足 $A = A^\dagger$，则称 A 是自伴的或 Hermitian 的。

设 W 是向量空间 V 的子空间，设 $\{|1\rangle, \cdots, |k\rangle\}$ 为 W 的一组正交模基，$\{|1\rangle, \cdots, |k\rangle, \cdots, |n\rangle\}$ 为 V 的正交模基，定义算子 P 为 $P = \sum\limits_{i=1}^{k} |i\rangle\langle i|$，则称 P 为 V 到 W 上的投影算子。

定义 3.2　若线性算子（或矩阵）A 满足 $AA^\dagger = A^\dagger A$，则称 A 为正规算子（矩阵）。

定义 3.3　若线性算子（或矩阵）U 满足 $U^\dagger U = I$，则称 U 是酉算子（矩阵）。

定义 3.4　若对任意向量 $|v\rangle$，线性算子（或矩阵）A 满足 $(|v\rangle, A|v\rangle) \geqslant 0$，则称 A 是半正定算子（矩阵）。

3.7　算子函数

设 A 是正规算子，且 $A = \sum\limits_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$，$f$ 是一个函数，则定义算子函数

$$f(A) = \sum_i f(\lambda_i)|i\rangle\langle i| \tag{3.15}$$

设 $A = [a_{ij}]_{n\times n}$ 是任意 n 阶方阵，则 A 的迹定义为 $\mathrm{Tr}(A) = \sum\limits_{i=1}^{n} a_{ii}$。对任意两矩阵 A 与 B，有 $\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA)$；对任意酉矩阵 U 有 $\mathrm{Tr}(UAU^\dagger) = \mathrm{Tr}(A)$。

设 A 是线性算子，定义 $\mathrm{Tr}(A)$ 为 A 在任意正交模基下对应的矩阵的迹（不同的正交模基下 A 的迹不变）。等价地，$\mathrm{Tr}(A) = \sum\limits_i \langle i|A|i\rangle$，其中 $\{|i\rangle\}$ 为任意一组正交模基。

设 A 是线性算子，$|\psi\rangle$ 为任意向量，将 $\dfrac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}$ 扩充为一组正交模基，记为 $\{|i\rangle\}$，则

$$\mathrm{Tr}(A|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_i \langle i|A|\psi\rangle\langle\psi|i\rangle \tag{3.16}$$

$$= \frac{\langle\psi|A|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{3.17}$$

$$= \langle\psi|A|\psi\rangle \tag{3.18}$$

定理 3.3 （同时可对角化）设 A 和 B 为两个 Hermitian 算子，则 $AB = BA$ 当且仅当存在一组正交模基 $|i\rangle$ 和实数 a_i 及 b_i，使得 $A = \sum\limits_i a_i|i\rangle\langle i|$，$B = \sum\limits_i b_i|i\rangle\langle i|$。

3.8 算子分解定理

定理 3.4 （谱分解）设 V 为 Hilbert 空间，A 是作用于 V 上的线性算子，则 $AA^\dagger = A^\dagger A \iff A = \sum\limits_i \lambda_i|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$，其中 λ_i 为复数，$\{|\varphi_i\rangle\}$ 为一组正交模基。

证明 “$\Leftarrow$” 的证明是显然的，所以只要考虑 “$\Rightarrow$” 的证明。对 A 的像空间的维数 d 进行数学归纳。

若 $d = 1$，则可以验证定理结论成立；假设 $d \leqslant k$ 时定理结论也成立，下面证明 $d = k + 1$ 时定理结论成立。设 λ 是 A 的特征值，P 是到 λ 的特征子空间上的投影算子，Q 是 P 的正交补（Q 也是投影算子）。这时可以验证：$PAQ = QAP = 0$。因此，$A = (P + Q)A(P + Q) = PAP + QAQ$。

进一步，可以验证 $PAP = \lambda P$ 以及 QAQ 是正规算子。前者是显然的，所以只需证明后者。由于 $QA = QA(Q+P) = QAQ$，$QA^\dagger = QA^\dagger(Q+P) = QA^\dagger Q$，且由已知条件 $AA^\dagger = A^\dagger A$，所以可以得到 $QAQQA^\dagger Q = QA^\dagger QQAQ$。由于 PAP 的像空间的维数大于或等于 1，所以 QAQ 的像空间的维数小于或等于 k。根据归纳假设，定理证毕。 $\square$

定理 3.5　（极分解）设 A 为线性算子，则存在酉算子 U 和半正定算子 J 和 K，使得 $A = UJ = KU$，其中 $J = \sqrt{A^\dagger A}$，$K = \sqrt{AA^\dagger}$。

证明　设 $J = \sqrt{A^\dagger A} = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i| (\lambda_i \geqslant 0)$，记 $|\psi_i\rangle = A|i\rangle$，则 $\langle\psi_i|\psi_i\rangle = \langle i|A^\dagger A|i\rangle = \lambda_i^2$。进一步记 $|e_i\rangle = \dfrac{|\psi_i\rangle}{\lambda_i}(\lambda_i \neq 0)$，并扩充 $\{|e_i\rangle\}$ 为一组正交模基，令 $U = \sum_i |e_i\rangle\langle i|$ 即可，定理证毕。 □

定理 3.6　（奇异值分解）设 T 为从 V_1 到 V_2 的任一线性算子，则存在两正交模向量集合 $\{|a_i\rangle\}$ 和 $\{|b_j\rangle\}$ 以及非负实数 λ_i 使得 $T = \sum_i \lambda_i |a_i\rangle\langle b_i|$。

证明　设 $T = UJ$（U 为酉算子，J 为半正定算子），并设 $J = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$，则 $T = U\sum_i \lambda_i|i\rangle\langle i| = \sum_i \lambda_i U|i\rangle\langle i|$。令 $|a_i\rangle = U|i\rangle$，$|b_i\rangle = |i\rangle$ 即可，定理证毕。 □

以下的命题是显然的。

命题 3.1　设 $\mathcal{B} = \{|b_i\rangle | i \in B\}$ 是 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 的一个正交模基，其中 B 是指标集合，则 $\mathcal{H}$ 上的任意线性算子 T 可以表示为 $T = \sum_{n,m\in B} T_{n,m} |b_n\rangle\langle b_m|$，$T_{n,m} \in \mathbb{C}$。

定理 3.7　（Schmit 分解）设 $|\psi\rangle$ 是两系统 $\mathcal{A}$ 与 $\mathcal{B}$ 上的纯态，且 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$，即 $|\psi\rangle = \sum_{i,j} a_{ij}|i_{\mathcal{A}}\rangle|j_{\mathcal{B}}\rangle$，其中 $|i_{\mathcal{A}}\rangle$ 和 $|j_{\mathcal{B}}\rangle$ 分别为 $\mathcal{A}$ 与 $\mathcal{B}$ 的一组正交模基，则存在 $|\psi_{k,\mathcal{A}}\rangle$ 和 $|\psi_{k,\mathcal{A}}\rangle$ 使得 $|\psi\rangle = \sum_k \lambda_k |\psi_{k,\mathcal{A}}\rangle|\psi_{k,\mathcal{B}}\rangle$，其中 λ_k 为非负实数，且 $\sum_k \lambda_k^2 = 1$。

任意 A、$B \in L(V)$，定义 $(A, B) = \mathrm{Tr}(A^\dagger B)$。可以证明 (A, B) 为 $L(V)$ 上内积；进一步，若 d 是 V 的维数，则 $L(V)$ 的维数为 d^2。

设 $\{|\psi_i\rangle | i = 1, 2, \cdots, d\}$ 为 V 的一组正交模基，则 $\{|\psi_i\rangle\langle\psi_j| | i, j = 1, 2, \cdots, d\}$ 为 $L(V)$ 的一组正交模基。

设 $\mathcal{A}$ 与 $\mathcal{B}$ 为两 Hilbert 空间，$\{|a_i\rangle | i = 1, 2, \cdots, d_a\}$ 和 $\{|b_j\rangle | j = 1, 2, \cdots, d_b\}$ 分别为 $\mathcal{A}$ 和 $\mathcal{B}$ 的一组正交模基。$L(\mathcal{B}, \mathcal{A})$ 为 $\mathcal{B}$ 到 $\mathcal{A}$ 的所有线性算子构成的 Hilbert 空间，则 $\{|a_i\rangle\langle b_j| | i = 1, 2, \cdots, d_a, j = 1, 2, \cdots, d_b\}$ 为 $L(\mathcal{B}, \mathcal{A})$ 的一

组正交模基。记 $E_{ij}=|a_i\rangle\langle b_j|$。$L(\mathcal{B},\mathcal{A})$ 中的内积定义为 $(A,B)=\mathrm{Tr}(A^\dagger B)$，其中 $A,B\in L(\mathcal{B},\mathcal{A})$。

引理 3.1 $L(\mathcal{B},\mathcal{A})$ 与 $\mathcal{A}\otimes\mathcal{B}$ 之间存在一一映射。

证明 定义 $vec(E_{ij})=|a_i\rangle(|b_j\rangle)^*$ 以及 $vec\left(\sum\limits_{ij}\mu_{ij}E_{ij}\right)=\sum\limits_{ij}\mu_{ij}|a_i\rangle(|b_j\rangle)^*$，则 $\forall|\varphi\rangle\in\mathcal{A}$，$|\psi\rangle\in\mathcal{B}$，$vec(|\varphi\rangle\langle\psi|)=|\varphi\rangle(|\psi\rangle)^*$。可见，$vec$ 是 $L(\mathcal{B},\mathcal{A})$ 与 $\mathcal{A}\otimes\mathcal{B}$ 之间的一一映射。 $\square$

Schmit 分解定理的证明如下。

证明 设 $T_\psi\in L(\mathcal{B},\mathcal{A})$ 且 $\mathrm{vec}(T_\psi)=|\psi\rangle$。由奇异值分解，存在 $\mathcal{A}$ 与 $\mathcal{B}$ 上的两正交模向量集合 $\{|a_i\rangle\}$ 和 $\{|b_j\rangle\}$ 使得 $T_\psi=\sum\limits_i\lambda_i|a_i\rangle\langle b_i|$，因而 $|\psi\rangle=vec(T_\psi)=\sum\limits_i\lambda_i|a_i\rangle(|b_i\rangle)^*=\sum\limits_i\lambda_i|a_i\rangle|c_i\rangle$，令 $|\psi_{k,\mathcal{A}}\rangle=|a_k\rangle$，$|\psi_{k,\mathcal{B}}\rangle=|c_k\rangle$ 即可，定理证毕。 $\square$

习　　题

3.1 设 $\mathcal{V}$ 与 $\mathcal{W}$ 为两 Hilbert 空间，$\{|v_j\rangle\}$ 和 $\{|w_i\rangle\}$ 分别为 $\mathcal{V}$ 与 $\mathcal{W}$ 的正交模基。设 $T_A:\sum\limits_{j=1}^n c_j|v_j\rangle\to\sum\limits_{j=1}^n c_j\sum\limits_{i=1}^m a_{ij}|w_i\rangle$，证明 T_A 是线性算子。

3.2 证明以下四个式子。

（1）$T_I=|0\rangle\langle 0|+|1\rangle\langle 1|$；

（2）$T_X=|0\rangle\langle 1|+|1\rangle\langle 0|$；

（3）$T_Y=-i(|0\rangle\langle 1|-|1\rangle\langle 0|)$；

（4）$T_Z=|0\rangle\langle 0|-|1\rangle\langle 1|$。

3.3 给出 Pauli 矩阵的特征值、特征向量以及对角化表示。

3.4 证明矩阵 $\begin{bmatrix}1&0\\1&1\end{bmatrix}$ 不可对角化。

3.5 证明对任意两向量 $|w\rangle$ 和 $|v\rangle$ 有 $(|w\rangle\langle v|)^\dagger=|v\rangle\langle w|$。

3.6 证明对任意投影算子 P 满足 $P^2=P$。

3.7 设 A 是正规算子，证明 A 是 Hermitian 算子当且仅当 A 的特征值为实数。

3.8 证明：$H^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x,y\in\{0,1\}^n} (-1)^{x\cdot y}|x\rangle\langle y|$。

3.9 求 $\sqrt{\begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}}$ 和 $\ln \begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$。

3.10 证明 Pauli 矩阵满足：$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ 2I, & i = j, \end{cases}$ 其中 i、$j = 1$、2、3。

3.11 记 $\vec{v}\cdot\vec{\sigma} = \sum_{i=1}^{3} v_i\sigma_i$，其中 $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$ 为单位实向量，$\sigma_1 = X$，$\sigma_2 = Y$，$\sigma_3 = Z$，证明

$$\exp(i\theta\vec{v}\cdot\vec{\sigma}) = \cos(\theta)I + i\sin(\theta)\vec{v}\cdot\vec{\sigma}$$

3.12 证明对任意线性算子 A 及正交模基 $\{|\varphi_i\rangle | i = 1, \cdots, n\}$ 与 $\{|\psi_j\rangle | j = 1, \cdots, n\}$，有 $\sum_i \langle\varphi_i|A|\varphi_i\rangle = \sum_j \langle\psi_j|A|\psi_j\rangle$。

3.13 证明对任意线性算子 A、B 有 $\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA)$。

3.14 设 A 是线性算子，定义 $\mathrm{Tr}(A) = \sum_i \langle i|A|i\rangle$，其中 $\{|i\rangle\}$ 为一组正交模基，证明该定义的合理性，即对任意另一组正交模基 $\{|j\rangle\}$，有 $\sum_j \langle j|A|j\rangle = \sum_i \langle i|A|i\rangle$。

3.15 证明：在谱分解定理的证明中，

（1）当 $d = 1$ 时验证定理结论成立；

（2）$PAQ = QAP = 0$；

（3）$PAP = \lambda P$。

3.16 验证对任意 $|\Phi\rangle \in \mathcal{A}\otimes\mathcal{B}$，存在唯一的 $T \in L(\mathcal{B}, \mathcal{A})$ 使得 $vec(T) = |\Phi\rangle$。

3.17 设 $\mathcal{A}$ 与 $\mathcal{B}$ 为两 Hilbert 空间，证明对任意 $|\varphi\rangle \in \mathcal{A}$，$|\psi\rangle \in \mathcal{B}$，有 $vec(|\varphi\rangle\langle\psi|) = |\varphi\rangle(|\psi\rangle)^*$。

3.18 设 V 是二维向量空间，其基向量为 $|0\rangle$ 与 $|1\rangle$，A 是一从 V 到 V 的线性算子，满足 $A|0\rangle = |1\rangle$，$A|1\rangle = |0\rangle$。当输入基和输出基都为 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 时，写出 A 的一矩阵表示。当选用另一组基时，写出 A 不同的矩阵表示。

3.19 定义 $((y_1, \cdots, y_n), (z_1, \cdots, z_n)) \equiv \sum\limits_i y_i^* z_i$，证明该定义为 $\mathbb{C}^n$ 上一内积。

3.20 证明：对任意内积 $(\cdot, \cdot)$ 的第一个变量具有共轭线性性质，即

$$\left(\sum_i \lambda_i |w_i\rangle, |v\rangle\right) = \sum_i \lambda_i^* (|w_i\rangle, |v\rangle)$$

3.21 证明 Gram-Schmidt 算法生成向量空间 V 的一组正交模基。

3.22 在二维的 Hilbert 空间中，在标准正交基 $|0\rangle$ 及 $|1\rangle$ 下写出 Pauli 矩阵相关的算子表示，并将每一 Pauli 算子用外积形式表示。

3.23 证明：对任意线性算子 A_i 和复数 a_i，有

$$\left(\sum_i a_i A_i\right)^\dagger = \sum_i a_i^* A_i^\dagger$$

3.24 设 A 为一线性算子，证明 $(A^\dagger)^\dagger = A$。

3.25 证明 Pauli 矩阵是 Hermitian 和酉的。

3.26 证明 Hermitian 算子不同特征值对应的特征向量正交。

3.27 证明投影算子特征值为 0 或 1。

3.28 证明正算子一定是 Hermitian 算子。

3.29 证明对任意算子 A，$A^\dagger A$ 是半正定算子。

3.30 证明转置、复共轭与自伴运算关于张量积运算满足分配律，即 $(A \otimes B)^* = A^* \otimes B^*$；$(A \otimes B)^{\mathrm{T}} = A^{\mathrm{T}} \otimes B^{\mathrm{T}}$；$(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger$，其中 A 和 B 为矩阵。

3.31 给出 Hermitian 矩阵的极分解形式。

3.32 写出矩阵 $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ 的极分解并证明。

思 考 题

3.33 设 $A=\sum\limits_i \lambda_i|i\rangle\langle i|$，$f$ 为函数，则 $f(A)=\sum\limits_i f(\lambda_i)|i\rangle\langle i|$。问：为什么 $f(A)$ 的定义是合理的？

3.9 量子力学假设

量子力学的基本假设，有四条或五条等多种表述方式，本书采用四条方式进行叙述。读者需要熟练掌握并应用这些假设。

假设 1. 一个物理系统由一个 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 来刻画，该系统的状态由 $\mathcal{H}$ 中的向量来描述。

如用 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$ 来描述一个量子比特系统的状态，其中 $|\alpha|^2+|\beta|^2=1$，且 α、$\beta\in\mathbb{C}$。

假设 2. 一个封闭的量子系统的状态演化由酉变换来描述，即任一状态 $|\psi\rangle$ 到状态 $|\psi'\rangle$ 的变换满足 $|\psi'\rangle=U|\psi\rangle$，其中 U 是酉算子。

如 Hadamard 变换 $H=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}$。

假设 3. 量子测量用测量算子集 $\{M_m\}$ 来描述，且满足完备性等式 $\sum\limits_m M_m^\dagger M_m=I$。这些测量算子作用于被测量系统的状态，$m$ 是测量结果。如果测量前量子状态是 $|\psi\rangle$，那么得到 m 的概率是 $p(m)=\langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle$，且系统状态塌陷为

$$\frac{M_m|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle}} \tag{3.19}$$

例如，取 $M_0=|0\rangle\langle 0|$，$M_1=|1\rangle\langle 1|$，则 $\{M_0,M_1\}$ 构成关于单个量子比特的一组测量算子。若取 $|\psi\rangle=a|0\rangle+b|1\rangle$，则

$$p(0)=\langle\psi|M_0^\dagger M_0|\psi\rangle=|a|^2 \tag{3.20}$$

$$p(1)=\langle\psi|M_1^\dagger M_1|\psi\rangle=|b|^2 \tag{3.21}$$

且测量后这两种情形的状态分别为 $\dfrac{a}{|a|}|0\rangle$ 和 $\dfrac{b}{|b|}|1\rangle$。

我们讨论测量算子的一个应用：量子状态的区分。

设 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 是空间中两个量子态且 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \neq 0$，则不存在测量 $\{E_i|i=1,2\}$ 使得

$$\langle\psi_i|E_j^\dagger E_j|\psi_i\rangle = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \tag{3.22}$$

证明 若存在这样的测量，则 $E_2|\psi_1\rangle = 0$ 及 $E_1|\psi_2\rangle = 0$。令 $|\psi_2\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi\rangle$，其中 $\langle\psi_1|\psi\rangle = 0$，且 $|\beta| < 1$（否则 $\langle\psi_2|\psi_1\rangle = 0$）。这时，$E_2|\psi_2\rangle = \beta E_2|\psi\rangle$，因而 $1 = \langle\psi_2|E_2^\dagger E_2|\psi_2\rangle = |\beta|^2\langle\psi|E_2^\dagger E_2|\psi\rangle \leqslant |\beta|^2 < 1$，矛盾！故这样的测量不存在。 □

假设 4. 一个复合系统的状态空间可由各个子系统的张量积来描述。如，若 $|\psi_i\rangle$ 是第 i 个系统的状态，且有 n 个子系统，则复合系统的状态为 $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle$。

3.10 密度算子

描述量子系统除了用向量（称为状态）外，还可以用密度算子或密度矩阵（称为混合态）来描述。设一量子系统是状态 $|\psi_i\rangle$ 的概率为 p_i，则称 $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ 为一个纯态的系综，且系统的状态定义为密度算子 $\rho = \sum\limits_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$。

ρ 也称为密度矩阵。若一个封闭的量子系统的状态演化由酉算子 U 描述，则密度矩阵 ρ 的演化为

$$\rho \xrightarrow{U} \sum_i p_i U|\psi_i\rangle\langle\psi_i|U^\dagger = U\rho U^\dagger \tag{3.23}$$

若初始状态是 $|\psi_i\rangle$，则测得 m 的概率为

$$p(m|i) = \langle\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle = \mathrm{Tr}(M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) \tag{3.24}$$

由全概率公式，测得 m 的概率为

$$p(m) = \sum_i p_i p(m|i) \tag{3.25}$$

$$= \sum_i p_i \mathrm{Tr}(M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) \tag{3.26}$$

$$= \mathrm{Tr}(M_m^\dagger M_m \rho) \tag{3.27}$$

若初始状态为 $|\psi_i\rangle$，则测得 m 后的状态为

$$|\psi_i^m\rangle = \frac{M_m|\psi_i\rangle}{\sqrt{\langle\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle}} \tag{3.28}$$

因此，测量得到结果 m 后系统的状态为

$$\rho_m = \sum_i p(i|m)|\psi_i^m\rangle\langle\psi_i^m| \quad \left(p(i|m) = \frac{p(m,i)}{p(m)} = \frac{p_i p(m|i)}{p(m)}\right) \tag{3.29}$$

$$= \sum_i \frac{p_i p(m|i)}{p(m)} \frac{M_m|\psi_i\rangle\langle\psi_i|M_m^\dagger}{\langle\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle} \tag{3.30}$$

$$= \sum_i p_i \frac{M_m|\psi_i\rangle\langle\psi_i|M_m^\dagger}{p(m)} \tag{3.31}$$

$$= \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\mathrm{Tr}(M_m^\dagger M_m \rho)} \tag{3.32}$$

下面给出密度算子的基本性质。

定理 3.8　*ρ 是一个密度算子当且仅当*

(1) $\mathrm{Tr}(\rho)$=1；

(2) ρ 是半正定算子。

证明　“$\Rightarrow$” 若 ρ 是一个密度算子，则 ρ 表示为形式 $\rho = \sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$，其中 $\sum_i p_i = 1$。这时 (1) 和 (2) 显然满足。

“$\Leftarrow$” 由 (2) 知 ρ 有谱分解 $\rho = \sum_i \lambda_i|i\rangle\langle i|$，又由 (1) 知 1=$\mathrm{Tr}(\rho)$=$\sum_i \lambda_i$。因而，$\{\lambda_i, |i\rangle\}$ 构成一个纯态的系综，所以 ρ 为密度算子。　□

状态向量只能用于描述纯态。混合态的描述需要借助密度算子。可以用密度算子的方式重新描述量子力学的四个基本假设。

假设 1. 任意一个独立的物理系统由一个 Hilbert 空间来刻画，该系统的状态由一个密度算子来描述。如果该系统处于状态 ρ_i 的概率为 p_i，那么系统

的状态为

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i \tag{3.33}$$

假设 2. 一个封闭的量子物理系统的状态演化由酉算子描述。系统的状态在时间 t_1 为 ρ，通过一个酉算子 U 的作用演化到时间 t_2 的状态 ρ'，即

$$\rho' = U\rho U^\dagger \tag{3.34}$$

假设 3. 量子测量由一组测量算子 $\{M_m\}$ 构成，且满足 $\sum\limits_m M_m^\dagger M_m = I$，$m$ 是指测量后的结果。若系统当前状态为 ρ，则测量后得到 m 的概率 $p(m) = \mathrm{Tr}(M_m^\dagger M_m \rho)$ 且新的状态为

$$\frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\mathrm{Tr}(M_m^\dagger M_m \rho)} \tag{3.35}$$

假设 4. 一个复合物理系统的状态由各个分系统的状态张量而成。若系统 1 到系统 n 的状态分别为 $\rho_1, \rho_2, \cdots, \rho_n$，则复合系统的状态为 $\rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \cdots \otimes \rho_n$。

关于密度矩阵（算子），有以下性质（证明见参考文献 [1]）。

定理 3.9 若 ρ 是一密度算子且有表示 $\rho = \sum\limits_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum\limits_j q_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|$，其中 $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ 和 $\{q_j, |\varphi_j\rangle\}$ 都为系综的状态，则 $\sqrt{p_i}|\psi_i\rangle = \sum\limits_j u_{ij}\sqrt{q_j}|\varphi_j\rangle$，$i = 1, \cdots, m, j = 1, \cdots, n$，其中 $[u_{ij}]$ 为酉矩阵。

习 题

3.34 设 ρ 是一个密度算子，证明 $\mathrm{Tr}(\rho^2) \leqslant 1$，且 $\mathrm{Tr}(\rho^2) = 1$ 当且仅当 ρ 是一个纯态。

3.35 （1）证明任意混合态的二阶密度矩阵 ρ 可表示为 $\rho = \dfrac{I + \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{2}$，其中 $\boldsymbol{r}$ 为实的三维向量且 $||\boldsymbol{r}|| \leqslant 1$，$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$，向量 $\boldsymbol{r}$ 称为 ρ 的 Bloch 向量；

（2）写出 $\rho = \dfrac{I}{2}$ 的 Bloch 向量表示；

（3）证明 ρ 是纯态当且仅当 $||\boldsymbol{r}|| = 1$；

（4）证明纯态的 Bloch 向量表示与（1）的表示一致。

3.36　证明：

（1） Hadamard 门 H 是酉的；

（2） $H^2 = I$；

（3）求 H 的特征值与特征向量。

3.37　证明：

（1）$|\psi\rangle = \dfrac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$ 是纠缠态；

（2）Bell 基构成一组标准正交基。

3.11　偏迹

设一个复合的物理系统 AB 由两个子系统 A 与 B 构成，并设 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_A$ 和 $\mathcal{H}_B$ 分别描述 A 和 B，因而系统 AB 由 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 描述。若 $\rho^{AB} \in L(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ 为 AB 中的密度算子，则一个问题是：如何从 ρ^{AB} 中得到每个子系统的状态信息？为此需要介绍偏迹的定义。

令 $\rho^{AB} = \sum\limits_i \lambda_i |\psi_i\rangle_{AB}\ {}_{AB}\langle\psi_i|$，其中 $|\psi_i\rangle_{AB} \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$，根据 Schmidt 分解定理可设

$$|\psi_i\rangle_{AB} = \sum_j \mu_j^{(i)} |\psi_j^{(i)}\rangle_A |\psi_j^{(i)}\rangle_B \tag{3.36}$$

其中 $\{|\psi_j^{(i)}\rangle_A\}$ 和 $\{|\psi_j^{(i)}\rangle_B\}$ 分别为 $\mathcal{H}_A$ 和 $\mathcal{H}_B$ 中的正交模向量组。

这时，

$$|\psi_i\rangle_{AB}\ {}_{AB}\langle\psi_i| = \sum_{j,k} \mu_j^{(i)} (\mu_k^{(i)})^* |\psi_j^{(i)}\rangle_A |\psi_j^{(i)}\rangle_B\ {}_A\langle\psi_k^{(i)}|_B\langle\psi_k^{(i)}| \tag{3.37}$$

$$= \sum_{j,k} \mu_j^{(i)} (\mu_k^{(i)})^* |\psi_j^{(i)}\rangle_A\ {}_A\langle\psi_k^{(i)}|\ |\psi_j^{(i)}\rangle_B\ {}_B\langle\psi_k^{(i)}| \tag{3.38}$$

定义

$$\mathrm{Tr}_A(|\psi_i\rangle_{AB}\ {}_{AB}\langle\psi_i|) \tag{3.39}$$

$$= \sum_{j,k} \mu_j^{(i)} (\mu_k^{(i)})^* |\psi_j^{(i)}\rangle_B\ {}_B\langle\psi_k^{(i)}| \cdot \mathrm{Tr}(|\psi_j^{(i)}\rangle_A\ {}_A\langle\psi_k^{(i)}|) \tag{3.40}$$

类似地，定义

$$\begin{aligned}&\mathrm{Tr}_B(|\psi_i\rangle_{AB\ AB}\langle\psi_i|) && (3.41)\\ &\quad = \sum_{j,k}\mu_j^{(i)}(\mu_k^{(i)})^*|\psi_j^{(i)}\rangle_{A\ A}\langle\psi_k^{(i)}|\cdot\mathrm{Tr}(|\psi_j^{(i)}\rangle_{B\ B}\langle\psi_k^{(i)}|) && (3.42)\end{aligned}$$

进一步，定义

$$\mathrm{Tr}_A(\rho^{AB}) = \sum_i \lambda_i \mathrm{Tr}_A(|\psi_i\rangle_{AB\,AB}\langle\psi_i|) \tag{3.43}$$

和

$$\mathrm{Tr}_B(\rho^{AB}) = \sum_i \lambda_i \mathrm{Tr}_B(|\psi_i\rangle_{AB\,AB}\langle\psi_i|) \tag{3.44}$$

并记 $\rho^A = \mathrm{Tr}_B(\rho^{AB})$，$\rho^B = \mathrm{Tr}_A(\rho^{AB})$。

其实，ρ^A 与 ρ^B 分别描述了 ρ^{AB} 中关于系统 A 与 B 的状态信息。

当然，定义偏迹也可不需要应用 Schmidt 分解。设 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A\otimes\mathcal{H}_B$，不妨设 $|\psi\rangle = \sum\limits_{i,j}\lambda_{i,j}|\psi_i\rangle_A|\psi_j\rangle_B$，其中 $\{|\psi_i\rangle_A\}$ 与 $\{|\psi_j\rangle_B\}$ 分别为 $\mathcal{H}_A$ 与 $\mathcal{H}_B$ 的正交模基，则

$$\begin{aligned}|\psi\rangle\langle\psi| &= \sum_{i,j}\lambda_{i,j}|\psi_i\rangle_A|\psi_j\rangle_B\sum_{k,l}\lambda_{k,l\,A}^*\langle\psi_k|_B\langle\psi_l| && (3.45)\\ &= \sum_{i,j,k,l}\lambda_{i,j}\lambda_{k,l}^*|\psi_i\rangle_{AA}\langle\psi_k|\otimes|\psi_j\rangle_{BB}\langle\psi_l| && (3.46)\end{aligned}$$

定义

$$\mathrm{Tr}_A(|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_{i,j,k,l}\lambda_{i,j}\lambda_{k,l}^*\mathrm{Tr}(|\psi_i\rangle_{AA}\langle\psi_k|)|\psi_j\rangle_{BB}\langle\psi_l| \tag{3.47}$$

类似地，可定义 $\mathrm{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|)$。

简单地，设 $|\psi_A\rangle\langle\psi_A|\otimes|\psi_B\rangle\langle\psi_B| \in \mathcal{H}_A\otimes\mathcal{H}_B$，则根据以上一般的定义可知

$$\mathrm{Tr}_A(|\psi_A\rangle\langle\psi_A|\otimes|\psi_B\rangle\langle\psi_B|) = \langle\psi_A|\psi_A\rangle|\psi_B\rangle\langle\psi_B| \tag{3.48}$$

类似地，可定义 Tr_B。

实际上，对多个系统构成的复合系统 $\mathcal{H}_{A_1}\otimes\mathcal{H}_{A_2}\otimes\cdots\otimes\mathcal{H}_{A_k}$ 求偏迹可类似地定义，设 $\rho=|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\otimes|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\otimes\cdots\otimes|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\in\mathcal{H}_{A_1}\otimes\mathcal{H}_{A_2}\otimes\cdots\otimes\mathcal{H}_{A_k}$，其中 $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\in\mathcal{H}_{A_i}$，则定义

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_{A_i}(\rho)=\mathrm{Tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\otimes\cdots\otimes|\psi_{i-1}\rangle\langle\psi_{i-1}|\\ \otimes|\psi_{i+1}\rangle\langle\psi_{i+1}|\otimes\cdots\otimes|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\end{aligned}\tag{3.49}$$

其中 $i=1,2,\cdots,k$。

例 3.1　设

$$|\psi_{AB}\rangle=\frac{|00\rangle_{AB}+|11\rangle_{AB}}{\sqrt{2}}\tag{3.50}$$

$$\rho^{AB}=|\psi\rangle_{AB\,AB}\langle\psi|\tag{3.51}$$

$$=\frac{|00\rangle_{AB\,AB}\langle00|+|00\rangle_{AB\,AB}\langle11|+|11\rangle_{AB\,AB}\langle00|+|11\rangle_{AB\,AB}\langle11|}{2}\tag{3.52}$$

则

$$\mathrm{Tr}_A(\rho^{AB})=\frac{|0\rangle_{BB}\langle0|+|1\rangle_{BB}\langle1|}{2}\tag{3.53}$$

$$=\frac{I_B}{2}\tag{3.54}$$

$$\mathrm{Tr}_B(\rho^{AB})=\frac{I_A}{2}\tag{3.55}$$

习　　题

3.38　设 $\rho\in\mathcal{H}_{\mathcal{A}}\otimes\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$，证明 $\mathrm{Tr}_B((U\otimes I)\rho(U^\dagger\otimes I))=U(\mathrm{Tr}_B\rho)U^\dagger$。

3.39　（1）求一纯态 $\rho^{AB}\in\mathcal{H}_{\mathcal{AB}}$，使其满足 $\rho^{AB}\neq\mathrm{Tr}_B(\rho^{AB})\otimes\mathrm{Tr}_A(\rho^{AB})$。

（2）证明对于在系统 A 上的任意密度算子 ρ，在更大的系统 $A\otimes B$ 上，存在一纯态 $|\psi\rangle$，使得 $\rho=\mathrm{Tr}_B|\psi\rangle\langle\psi|$ 且 $\dim(A)\geqslant\dim(B)$。

3.12　超算子

在封闭的量子系统中，系统的状态 $|\psi\rangle$ 在酉算子 U 的作用下演化为 $U|\psi\rangle$。然而，当量子系统与外界发生作用时，整个物理系统的状态需要用混合态来描

述，其数学表示为密度算子（或矩阵），可记为 ρ。这时状态的演化需要用更广义的量子运算来作用，这其实是从算子空间到算子空间的算子，也称为超算子。当然，这里用的是一类特殊的超算子，本节对此进行具体介绍。

设 V 是有限维 Hilbert 空间，$L(V)$ 为 V 上所有线性算子构成的集合。实际上，$L(V)$ 也可以按以下内积定义构成一 Hilbert 空间：$(A,B)=\mathrm{Tr}(A^\dagger B)$。称 $L(V)$ 到 $L(V)$ 的线性算子为超算子。

设 $\rho\in L(V)$ 为一密度算子，$A_i\in L(V)$，$i=1,2,\cdots,k$，且 $\sum\limits_{i=1}^{k}A_i^\dagger A_i=I$，定义

$$\mathcal{T}(\rho)=\sum_{i=1}^{k}A_i\rho A_i^\dagger \tag{3.56}$$

其中称 A_i 为 Kraus 算子[2]。称以上算子 $\mathcal{T}$ 为可允许的量子运算，方程 (3.56) 称为 $\mathcal{T}$ 的算子和表示。显然，$\mathcal{T}$ 是超算子。

定义 3.5 设 $\mathcal{T}$ 为 $L(V)$ 到 $L(V)$ 的超算子，若 $\mathcal{T}$ 满足以下两条，则称 $\mathcal{T}$ 为完全正算子：(1) 对任意正算子 $A\in L(V)$，$\mathcal{T}(A)$ 也为正算子；(2) 设 R 为任意有限维 Hilbert 空间，$\mathcal{I}$ 为 $L(R)$ 上的超算子，也为恒等算子，则任意 $A\in L(R\otimes V)$，当 A 为正算子时，$(\mathcal{I}\otimes\mathcal{T})(A)$ 也为正算子。

实际上，上述方程 (3.56) 定义的可允许量子运算 $\mathcal{T}$ 是完全正算子，且保迹。$\mathcal{T}$ 为保迹是不难证明的，下面证明 $\mathcal{T}$ 是完全正的。

首先需要一个引理（证明作为习题）。

引理 3.2 设 $A_i\in L(V)$，则任意 $A\in L(R\otimes V)$ 有 $\sum\limits_i(\mathcal{I}\otimes A_i)A(\mathcal{I}\otimes A_i^\dagger)=(\mathcal{I}\otimes\mathcal{T})(A)$，其中 $\mathcal{I}$ 为 $L(R)$ 上的恒等算子，而 $\mathcal{T}$ 定义如方程 (3.56)，即 $\mathcal{T}(B)=\sum\limits_i A_iBA_i^\dagger$，对任意 $B\in L(V)$。

根据引理 3.2，可以直接证明 $\mathcal{T}$ 为完全正的。任意正算子 $A\in L(R\otimes V)$ 和任意 $|\psi\rangle\in R\otimes V$，有

$$\langle\psi|(\mathcal{I}\otimes\mathcal{T})(A)|\psi\rangle=\langle\psi|\sum_i(\mathcal{I}\otimes A_i)A(\mathcal{I}\otimes A_i^\dagger)|\psi\rangle \tag{3.57}$$

$$=\sum_i\langle\psi|(\mathcal{I}\otimes A_i)A(\mathcal{I}\otimes A_i^\dagger)|\psi\rangle\geqslant 0 \tag{3.58}$$

下面给出几个例子。

例 3.2　设量子系统 V 与外界环境 E 作用后系统表示为 $V\otimes E$，$\rho\in L(V)$ 为密度算子，$\rho_e\in L(E)$ 也为密度算子，U 为酉算子作用于整个系统，定义超算子 $\mathcal{T}$ 为

$$\mathcal{T}(\rho)=\mathrm{Tr}_e[U(\rho\otimes\rho_e)U^\dagger] \tag{3.59}$$

设 $\rho_e=\sum\limits_i\lambda_i|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$，其中 $\{|\varphi_i\rangle\}$ 为 E 的一组正交模基，并设 $\{|e_i\rangle\}$ 为 E 的另一组正交模基，则有

$$\mathcal{T}(\rho)=\sum_k(I_v\otimes\langle e_k|)U(\rho\otimes\rho_e)U^\dagger(I_v\otimes|e_k\rangle) \tag{3.60}$$

$$=\sum_k A_k\rho A_k^\dagger \tag{3.61}$$

其中 $A_k=\sum\limits_i\sqrt{\lambda_i}(I_v\otimes\langle e_k|)U(I_v\otimes|\varphi_i\rangle)$。

进一步有

$$\sum_k A_k^\dagger A_k \tag{3.62}$$

$$=\sum_k\left(\sum_i\sqrt{\lambda_i}(I_v\otimes\langle\varphi_i|)U^\dagger(I_v\otimes|e_k\rangle)\right)\left(\sum_j\sqrt{\lambda_j}(I_v\otimes\langle e_k|)U(I_v\otimes|\varphi_j\rangle)\right) \tag{3.63}$$

$$=\sum_k\sum_{i,j}\sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j}(I_v\otimes\langle\varphi_i|)U^\dagger(I_v\otimes|e_k\rangle)(I_v\otimes\langle e_k|)U(I_v\otimes|\varphi_j\rangle) \tag{3.64}$$

$$=\sum_{i,j}\sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j}(I_v\otimes\langle\varphi_i|)U^\dagger\cdot\sum_k(I_v\otimes|e_k\rangle)(I_v\otimes\langle e_k|)U(I_v\otimes|\varphi_j\rangle) \tag{3.65}$$

$$=\sum_{i,j}\sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j}(I_v\otimes\langle\varphi_i|)U^+\cdot(I_v\otimes I_e)\cdot U(I_v\otimes|\varphi_j\rangle) \tag{3.66}$$

$$=\sum_{i,j}\sqrt{\lambda_i}\sqrt{\lambda_j}(I_v\otimes\langle\varphi_i|)(I_v\otimes I_e)(I_v\otimes|\varphi_j\rangle) \tag{3.67}$$

$$=I_v \tag{3.68}$$

其中 I_e 与 I_v 分别为 E 与 V 上的恒等算子。

根据前面引理可知 $\mathcal{T}$ 为可允许的量子运算，也为完全正保迹算子。□

特别地，当环境的状态为纯态 $|\rho_0\rangle\langle\rho_0|$ 与内部量子系统 ρ 作用时，有

$$\mathcal{T}(\rho) = \mathrm{Tr}_e(U(\rho \otimes |\rho_0\rangle\langle\rho_0|)U^\dagger) \tag{3.69}$$

这时 $A_i = (I_v \otimes \langle e_k)U(I_v \otimes |e_0\rangle)$，其中 $\{|e_k\rangle\}$ 为环境系统的一组正交模基。

在前面算子和表示的可允许量子运算中，要求 $\sum\limits_i A_i^\dagger A_i = I$。其实，若该运算中没有涉及测量，可允许量子运算也可用算子和表示，只是 $\sum\limits_i A_i^\dagger A_i \leqslant I$。

例 3.3 设一物理系统 V 与外界环境 E 作用，密度算子 ρ 与 ρ_e 分别表示 V 与 E 的状态，U 是作用于 $\mathcal{H}_V \otimes \mathcal{H}_E$ 上的酉算子，$\{P_i\}$ 为 $\mathcal{H}_V \otimes \mathcal{H}_E$ 上的投影测量，这时量子运算为

$$\mathcal{T}_k(\rho) = \mathrm{Tr}_e(P_k U(\rho \otimes \rho_e)U^\dagger P_k) \tag{3.70}$$

设 $\rho_e = \sum\limits_j \mu_j|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|$，$\mu_j \geqslant 0$ 且 $\sum\limits_j \mu_j = 1$，并令 $\{|e_i\rangle\}$ 为 $\mathcal{H}_E$ 上的一组正交模基，则

$$\mathcal{T}_k(\rho) = \sum_i (I_v \otimes \langle e_i|)P_k U(\rho \otimes \rho_e)U^\dagger P_k(I_v \otimes |e_i\rangle) \tag{3.71}$$

$$= \sum_{i,j} \mu_j(I_v \otimes \langle e_i|)P_k U(\rho \otimes |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|)U^\dagger P_k(I_v \otimes |e_i\rangle) \tag{3.72}$$

其中 I_v 为 $\mathcal{H}_V$ 上的恒等算子。

令 $E_{i,j} = \sqrt{\mu_j}(I_v \otimes \langle e_i|)P_k U(I_v \otimes |\varphi_j\rangle)$，则可以验证上述 $\mathcal{T}_k(\rho)$ 为以下算子和表示：

$$\mathcal{T}_k(\rho) = \sum_{i,j} E_{ij}\rho E_{ij}^\dagger \tag{3.73}$$

例 3.4 考虑三维 Hilbert 空间，其正交模基为 $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle\}$，$A_i = |i\rangle\langle i|$，$i = 0, 1, 2$，$|\psi\rangle = \sum\limits_{i=0}^{2} \alpha_i|i\rangle$，$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$，则 $\mathcal{T}(\rho)$ 定义如下：

$$\mathcal{T}(\rho) = \sum_{i=0}^{2} A_i\rho A_i^\dagger \tag{3.74}$$

$$= \sum_{i=0}^{2} |\alpha_i|^2 |i\rangle\langle i| \tag{3.75}$$

习　题

3.40　设 V 是有限维 Hilbert 空间，$L(V)$ 为 V 上所有线性算子构成的集合。实际上，$L(V)$ 也可以按以下内积定义构成一 Hilbert 空间：$(A, B) = \mathrm{Tr}(A^\dagger B)$。证明：

（1）$L(V)$ 为向量空间；

（2）(A, B) 的定义为内积；

（3）$L(V)$ 的维数为 $d(V)^2$，其中 $d(V)$ 为 V 的维数。

3.41　证明由方程 (3.56) 定义的可允许量子运算 $\mathcal{T}$ 是保迹的。

3.42　证明引理 3.2（提示：利用 Schmidt 分解定理）。

3.43　证明等式 (3.73)。

3.13　小结

与经典物理相比，量子力学是对微观世界的精确描述。由于量子力学基于 Hilbert 空间理论，所以泛函分析是量子力学的数学基础。可参阅 Von Neumann 等著的 *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*。当然，掌握线性代数与矩阵分析的基本知识，即可开展量子计算的研究，而不需要学习量子力学。

本章先介绍了量子计算相关的线性代数基础，包括各种算子以及算子函数；然后专门系统地介绍了几种重要的算子（矩阵）分解定理，澄清了这些结果之间的相互关系。之后，我们分别用状态向量和密度算子两种方法，给出了量子计算中的四个基本假设的描述。需要指出的是，状态向量只能用来描述纯态，但密度算子可以描述纯态和混合态。为了描述复合物理系统中每个子系统的性质，我们给出了偏迹的概念和基本性质。混合态到混合态的演化过程，是密度算子到密度算子的映射，也就是一种超算子，所以，最后一节介绍了超算子的基本概念和性质。