

1 简介

我最近在上量子复杂度理论这门课。虽然去年学过量子计算，但这门课似乎又引入了一堆新东西，而且特别数学。

我的线性代数好不到哪里去，所以不得不把它整理一下记下来。

1.1 量子状态

量子态分为**纯态**和**混合态**。纯态就是量子态的叠加：

$$|\varphi\rangle = \sum_i |b_i\rangle$$

而混合态则是纯态的概率分布：

$$\rho = \sum_i \lambda_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

其中 $\sum \lambda_i = 1$ 。

在之前学过的量子计算里，我们能看到的東西都是纯态。那么，为什么要发明混合态呢？

考虑 Bell 态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ 。它的第一个量子比特就可以用混合态表示：

$$\rho_1 = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|$$

所以，复合系统的局部状态可能是混合态。

需要注意的是，这里的混合态定义是 $|\varphi\rangle$ 投影矩阵的叠加。如果直接写作 $\sum \lambda_i |\varphi_i\rangle$ ，一方面是无法保证归一化，另一方面是这只不过是纯态的线性组合，还是纯态。所以，混合态是**矩阵**，不能用 $|\cdot\rangle$ 记号表示。

1.2 谱定理

谱定理 (spectrum theorem) 说的是，如果 A 是 Hermitian 矩阵，那么它一定可以写成

$$A = \sum_i \lambda_i |b_i\rangle\langle b_i|$$

其中 λ_i 是 A 的特征值，而且一定是实数； $|b_i\rangle$ 是正交归一的一组基。所以，我们可以将 Hermitian 矩阵某种程度上看作是实数向量。

1.3 密度矩阵

如果 Hermitian 矩阵 ρ 是半正定的（所有特征值非负），而且 $\text{Tr}(\rho) = 1$ ，那么 ρ 就是**密度矩阵**。

线性代数的知识正在攻击我。实际上，虽然 Tr 的定义是主对角线之和，但是它等于特征值之和。这是因为 A 的特征多项式 $\det(\lambda I - A)$ 的所有零点自然是 λ_i ；而直接展开的话，又会发现 $\det(\lambda I - A)$ 的 λ^{n-1} 一项系数等于 $-\sum a_{ii}$ 。那么根据韦达定理，自然有

$$\sum_i a_{ii} = \sum_i \lambda_i$$

所以，既然要求特征值非负，而且和为 1，我们就可以将密度矩阵看作是它的正交基上的概率分布。这里 Hermitian 矩阵的作用正是为了确认基是正交的，这就是我们最开始要引入谱定理的原因。

密度矩阵描述了一个量子态的所有物理信息。不过，它无法描述量子态的制备历史，因为两种不同的制备方式可能会获得同一个密度矩阵。考虑

$$\frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{2}|+\rangle\langle+| + \frac{1}{2}|-\rangle\langle-| = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

所以通过半 $|0\rangle$ 半 $|1\rangle$ ，和通过半 $|+\rangle$ 半 $|-\rangle$ 制备出来的量子态其实是一模一样的。这种恰好等于 $\frac{I}{2}$ 的混合态称为**最大混合态** (*maximally mixed state*)，因为它的本征值是均匀的，每一个都是 $\frac{1}{2}$ 。对于 n 维的混合态，最大混合态自然是 $\frac{I}{n}$ 。

在 $|0\rangle, |1\rangle$ 这组基下，密度矩阵的非对角项表示**相干** (*coherence*)。考虑

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix}$$

那么 ρ_{ij} 其实是等于 $\langle i|\rho|j\rangle$ 的。那么非对角元素 ρ_{ij} 自然表示了 $|i\rangle$ 和 $|j\rangle$ 有多大的关系。实际上，要看相不相干还是得看 $\langle i|\rho|j\rangle$ ，只是恰好这里可以直接通过那几个元素读出来而已。

如果非对角元是 0，那么在这个基下 ρ 是无相干的。最大混合态在任何基下都无相干。

1.4 投影测量

投影测量 (*projective measurements*) 一般简称 PVM，由一组矩阵 $\{M_i\} (1 \leq i \leq k)$ 确定，其中每个 M_i 都是 Hermitian 的，而且要求 M_i 是幂等的 ($M_i^2 = M_i$)。 M_i 是个投影，一定不可逆。我当时在这里纠结了半天，认为这个条件加上 $M_i = M_i^\dagger$ 必然有 $M_i = I$ ，才发现 M_i^{-1} 不见得存在。

我们还要求 $\sum M_i = I$ ，才将这样一组 M_i 称作 PVM。

既然是测量，我们可以用这些 M_i 去测量一个纯态 $|\psi\rangle$ ，得到 k 种不同的结果。结果 i 的概率是

$$\|M_i|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|M_i^\dagger M_i|\psi\rangle = \langle\psi|M_i|\psi\rangle$$

测量后，状态的方向坍缩到了 $M_i|\psi\rangle$ 。还需要叠加一个归一化，除以 $\|M_i|\psi\rangle\|$ 才行。

注意到， $\|M_i|\psi\rangle\|^2$ 其实等于 $\text{Tr}(M_i|\psi\rangle\langle\psi|)$ 。这是因为 $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(BCA)$ ，从而

$$\text{Tr}(M_i|\psi\rangle\langle\psi|) = \text{Tr}(\langle\psi|M|\psi\rangle) = \langle\psi|M|\psi\rangle$$

最后一步是因为那个值就是个实数，而实数的 Tr 自然是它本身。

注意到纯态 $|\psi\rangle$ 写作混合态时，其实是 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ ，而 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 又在 PVM 里出现了一次。那么直觉告诉我们，对任意的混合态 ρ ，用 $\{M_i\}$ 测量后概率理应也是 $\text{Tr}(M_i\rho)$ 。

在测量出结果 i 之后的坍缩则是

$$\frac{M_i\rho M_i}{\text{Tr}(M_i\rho)}$$

。

要理解这个，我们还是先看纯态是怎么样的。对于 $|\psi\rangle$ ，它坍缩到 $M_i|\psi\rangle$ 。写成混合态的话，就是对于 $|\psi\rangle\langle\psi|$ ，它坍缩后的分子是 $(M_i|\psi\rangle)(M_i|\psi\rangle)^\dagger$ ，而这恰好是 $M_i|\psi\rangle\langle\psi|M_i$ （毕竟 M_i 是 Hermitian 的）。所以，如果推广到混合态 ρ ，分子就是 $M_i\rho M_i$ 了。分母自然来自归一化，和纯态的也是一样的。

1.5 偏迹与纯化

我们最开始讲了混合态其实可以用来描绘复杂系统的局部。那么，我们该如何将它提取出来呢？

考虑一个 A, B 一起构成的量子系统，它的密度矩阵记作 ρ_{AB} 。那么如果 A 的密度矩阵位于 $\mathcal{H}_A$ 中， B 的密度矩阵位于 $\mathcal{H}_B$ 中，这个复合系统的矩阵自然需要在 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 内。

而偏迹 $\rho_A = \text{Tr}_B(\rho_{AB})$ 指的是将 ρ_{AB} 按 B 分块后，这个分块矩阵的主对角线之和。以二维为例， ρ_{AB} 是一个 4×4 的矩阵，不过按照 B 分块之后就只剩下 2×2 了：

$$\rho_{AB} = \begin{pmatrix} B_{00} & B_{01} \\ B_{10} & B_{11} \end{pmatrix}$$

那么 $\text{Tr}_B(\rho_{AB})$ 就是 $B_{00} + B_{01}$ ，依然是一个矩阵，而且刚好和 A 的普通密度矩阵大小相同。形式化地说，

$$\text{Tr}_B(|a_1 b_1\rangle\langle a_2 b_2|) = |a_1\rangle\langle a_2| \langle b_1|b_2\rangle$$

如果 a_n 和 b_n 都是正交归一的，就只留下 $\text{Tr}_B(|a_n b_m\rangle\langle a_n b_m|) = |a_n\rangle\langle a_n|$ ，剩下的都是零。

系统 A 的每一个混合态都可以找到某个 ρ_B ，使得它们拼起来是一个纯态。这就叫作**纯化**：

$$\forall \rho_A. \exists |\psi\rangle_{AB}. \rho_A = \text{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|_{AB})$$

而且，Uhlmann 定理告诉我们，所有这样的 $|\psi\rangle$ 都可以通过某个 unitary 矩阵相互转化。这里 unitary 是指 $U^{-1} = U^\dagger$ ，而 Hermitian 则是说 $H = H^\dagger$ 。

1.6 迹距离

两个量子态的距离 $D(\rho, \sigma)$ 定义为

$$D(\rho, \sigma) = \frac{1}{2} \text{Tr} |\rho - \sigma|$$

它确定了两个量子态通过测量被区分的最大概率，这个值是 $\frac{1-D(\rho, \sigma)}{2}$ 。

1.7 量子信道

我们描述了很多量子操作，包括直接乘以某个 unitary 矩阵 U ，进行测量，以及补上/消去系统的一部分 B 之类的。它们是否能统一描述呢？

实际上，所有这些都对应一种 CPTP 映射 (*completely positive trace-preserving*)。对于一个映射 $\mathcal{S}$ ，如果它要是 CPTP，那么就必须满足这些条件：

- **正性**。对任意的混合态 $\rho \geq 0$ ，必定有 $\mathcal{S}(\rho) \geq 0$ ；
- **完全正性**。如果它作用于某个更大系统的一部分，也需要保持正性。也就是说，对任意的系统 B ，以及总状态 $\sigma \geq 0$ ，那么 $(I \otimes \mathcal{S})(\sigma) \geq 0$ 。
- **保迹**。既然密度矩阵表示概率，那么 $\text{Tr} = 1$ 的条件不能改变。所以要求 $\text{Tr} \rho = \text{Tr} \mathcal{S}(\rho)$ 。

Kraus 表示告诉我们，这样的 $\mathcal{S}$ 总是可以写作 $\sum_k A_k \rho A_k^\dagger$ ，其中 A_k 是任意矩阵。为了能够保迹， $A_k A_k^\dagger$ 之和需要等于 I 。