Классические и квантовые вычисления

А. Китаев; написал М. Вялый

7 лекция (26/03/98)

1. Квантовая вероятность, ее свойства и обобщения (продолжение)

Если есть два неортогональных подпространства с пустым пересечением, то квантовая вероятность необязательно аддитивна. Приведем простой пример, когда $\mathbf{P}(|\xi\rangle, \mathcal{M}_1 \oplus \mathcal{M}_2) \neq \mathbf{P}(|\xi\rangle, \mathcal{M}_1) + \mathbf{P}(|\xi\rangle, \mathcal{M}_2)$.

Пусть $|\xi\rangle = |0\rangle$, $\mathcal{M}_1 = \mathrm{Lin}(|0\rangle)$, $\mathcal{M}_2 = \mathrm{Lin}(|\eta\rangle)$, причем $\langle\xi|\eta\rangle$ близко к 1. Тогда

$$1 = \mathbf{P}(|\xi\rangle, \mathcal{M}_1 \oplus \mathcal{M}_2) \;\neq\; \mathbf{P}(|\xi\rangle, \mathcal{M}_1) + \mathbf{P}(|\xi\rangle, \mathcal{M}_2) \approx 1 + 1.$$

Теперь построим определение вероятности, обобщающее классическую квантовую вероятность. Для этого рассмотрим распределение вероятностей на конечном множестве квантовых состояний

$$\begin{array}{llll} |\xi_1\rangle, & \ldots, & |\xi_k & \text{— состояния,} \\ p_1, & \ldots, & p_k & \text{— вероятности состояний —} \quad p_i \geq 0 \quad \sum p_i = 1. \end{array}$$

Подсчитаем вероятность наблюдения cbcntvs в подпространстве $\mathcal{M}$: $\sum_k p_k \cdot \mathbf{P}(|\xi_k\rangle, \mathcal{M}) = \sum_k p_k \cdot \langle\xi_k|\Pi_{\mathcal{M}}|\xi_k\rangle = \sum_k p_k \cdot \mathrm{Tr}(|\xi_k\rangle\langle\xi_k|\Pi_{\mathcal{M}}) = \mathrm{Tr}(\rho\Pi_{\mathcal{M}})$, где через ρ обозначена *матрица плотности* $\rho = \sum_k p_k|\xi_k\rangle\langle\xi_k|$. Последнее выражение в (1) и примем за общее определение вероятности.

Задача. *Матрицы, имеющие вид $\sum_k p_k|\xi_k\rangle\langle\xi_k|$, — это в точности эрмитовы неотрицательно определенные матрицы со следом 1.*

Т. е. для матриц плотности выполняются условия:

1) $\rho = \rho^\dagger$; *2)* $\langle\eta|\rho|\eta\rangle \geq 0$; *3)* $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$.

Экспериментальный факт состоит в том, что распределения вероятностей на состояниях, которым соответствует одна и та же матрица плотности, квантовомеханически неразличимы. Если состояние задается одним вектором, то оно называется *чистым*, если состояние задается общей матрицей плотности, то оно называется *смешанным*.

Определение. *Для квантового состояния, задаваемого матрицей плотности ρ, и подпространства $\mathcal{M}$, определена вероятность* $\mathbf{P}(\rho, \mathcal{M}) = \mathrm{Tr}(\rho\Pi_{\mathcal{M}})$.

Продолжим сравнение свойств классической вероятности и квантовой вероятности, под которой мы будем теперь понимать общее определение с использованием матриц плотности.

Классическая вероятность	Квантовая вероятность
Свойства	
2. На множестве $\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \times \mathcal{M}_2$ задано распределение вероятностей вида $w_{ij} = w_i^{(1)} w_j^{(2)}$. Тогда вероятности перемножаются: $\mathbf{P}(w, \mathcal{M}) = \mathbf{P}(w^{(1)}, \mathcal{M}_1) \cdot \mathbf{P}(w^{(2)}, \mathcal{M}_2)$	2^{q}. На пространстве $\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \otimes \mathcal{M}_2$ задано матрица плотности вида $\rho_1 \otimes \rho_2$. Тогда вероятности также перемножаются: $\mathbf{P}(\rho_1 \otimes \rho_2, \mathcal{M}_1 \otimes \mathcal{M}_2) = \mathbf{P}(\rho_1, \mathcal{M}_1) \cdot \mathbf{P}(\rho_2, \mathcal{M}_2)$
3. Имеется совместное распределение на множестве $\mathcal{N}_1 \times \mathcal{N}_2$, интересующее нас событие не зависит от исхода во втором множестве: $\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \times \mathcal{N}_2$. Тогда определена проекция распределения на первую систему: $\mathbf{P}(w, \mathcal{M}_1 \times \mathcal{N}_2) = \mathbf{P}(w', \mathcal{M}_1), \qquad w'_i = \sum_j w_{ij}$	3^{q}. В квантовом случае ограничение на одну из подсистем операцией взятия частичного следа (см. ниже). Поэтому даже если исходное состояние было чистым, проекция на подсистему может оказаться смешанным состоянием. $\mathbf{P}(\rho, \mathcal{M}_1 \otimes \mathcal{N}_2) = \mathbf{P}(\operatorname{Tr}_{\mathcal{N}_2} \rho, \mathcal{M}_1)$

Определение. *Пусть $X \in \mathbf{L}(\mathcal{N}_1 \otimes \mathcal{N}_2) = \mathbf{L}(\mathcal{N}_1) \otimes \mathbf{L}(\mathcal{N}_2)$. Тогда $X = \sum_k A_k \otimes B_k$ и определен частичный след оператора X по пространству $\mathcal{N}_2$: $\operatorname{Tr}_{\mathcal{N}_2} X = \sum_k A_k \cdot \operatorname{Tr} B_k$.*

Можно доказать, что частичный след не зависит от выбора слагаемых в (). Приведем также координатное выражение для частичного следа. Если в $\mathcal{N}_1$, $\mathcal{N}_2$ заданы базисы, то X можно записать в виде $X = \sum\limits_{ijkl} X_{ijkl} |ij\rangle\langle kl|$. А частичный след тогда будет выражаться как $\operatorname{Tr}_{\mathcal{N}_2} X = \sum_{ik} \sum_j X_{ijkj} |i\rangle\langle k|$.

Рассмотрим пример, когда взятие частичного следа от матрицы плотности, соответствующей чистому состоянию, приводит к матрице плотности, соответствующей смешанному состоянию. Пусть $\mathcal{N}_1 = \mathcal{N}_2 = \mathbb{B}$, а $\rho = |\xi\rangle\langle\xi|$, где $|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$. В этом случае $\rho = \frac{1}{2} \sum\limits_{a,b} |aa\rangle\langle bb|$, поэтому получаем $\operatorname{Tr}_{\mathcal{N}_2} \rho = \frac{1}{2} \sum_a \sum_j |a\rangle\langle a| = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$. Эта матрица соответствует смешанному состоянию (чистым состояниям соответствуют матрицы ранга 1).

Диагональные матрицы $\rho = \sum_i w_i |i\rangle\langle i|$ соответствуют классическим распределениям вероятности на множестве базисных векторов. Т. е. при вычислении вероятности по общей квантовой формуле для диагональных матриц и координатных подпространств (натянутых на базисные вектора), получается одно и то же.

Поэтому разобранный выше пример можно пересказать так: отбрасывание второго q-бита приводит к чисто классическому распределению вероятности на первом q-бите.

Утверждение. *Любое смешанное состояние $\rho \in \mathbf{L}(\mathcal{N})$ можно представить как частичный след $\operatorname{Tr}_{\mathcal{F}}(|\xi\rangle\langle\xi|)$ от чистого состояния большей системы, $|\xi\rangle \in \mathcal{N} \otimes \mathcal{F}$.*

Можно считать, что $\dim \mathcal{F} \le \dim \mathcal{N}$.

Доказательство. Полагаем $\mathcal{F} = \mathcal{N}^*$. Так как ρ неотрицательно определена, то существует $\sqrt{\rho} \in \mathbf{L}(\mathcal{N}) = \mathcal{N} \otimes \mathcal{N}^*$. Докажем, что для $|\xi\rangle = \sqrt{\rho}$ выполнено искомое, т. е. $\rho = \operatorname{Tr}_{\mathcal{N}^*}(|\sqrt{\rho}\rangle\langle\sqrt{\rho}|)$.

Поскольку ρ эрмитова, она диагонализуется в некотором ортонормированном базисе $\{|\eta_i\rangle\}$. Тогда $\rho = \sum_i p_i |\eta_i\rangle\langle\eta_i|$, а $|\xi\rangle = \sqrt{\rho} = \sum_i \sqrt{p_i} |\eta_i\rangle\langle\eta_i|$, и $|\xi\rangle\langle\xi| = \sqrt{\rho} = \sum_{ij} \sqrt{p_i p_j} (|\eta_i\rangle \otimes \langle\eta_i|)(|\eta_j\rangle \otimes \langle\eta_j|)$. Поэтому соотношение $\rho = \operatorname{Tr}_{\mathcal{N}^*}(|\xi\rangle\langle\xi|)$ выполнено. □

Задача. *Пусть есть чистое состояние $|\xi\rangle \in \mathcal{N} \otimes \mathcal{F}$. Тогда все ненулевые собственные значения и их кратности у частичных следов $\rho = \operatorname{Tr}_{\mathcal{F}}(|\xi\rangle\langle\xi|)$ и $\rho' = \operatorname{Tr}_{\mathcal{N}}(|\xi\rangle\langle\xi|)$ одинаковы.*

Из этой задачи следует, что взятие частичного следа от чистого состояния приводит к чистому состоянию тогда, и только тогда, когда исходное состояние разложимо $|\xi\rangle = |\xi_1\rangle \otimes |\xi_2\rangle$.

2. Физически реализуемые преобразования матриц плотности

Теперь опишем, какие преобразования матриц плотности допустимы с физической точки зрения.

1) Унитарный оператор переводит матрицу плотности чистого состояния $\rho = |\xi\rangle\langle\xi|$ в матрицу $\rho' = U|\xi\rangle\langle\xi|U^\dagger$. Естественно считать (по линейности), что такой же формулой задается и действие унитарного оператора на произвольные матрицы плотности:

$$\rho \overset{U}{\mapsto} U\rho U^\dagger.$$

2) Второй тип преобразования состоит во взятии частичного следа. Если есть $\rho \in \mathbf{L}(\mathcal{N} \otimes \mathcal{F})$, то отбрасывание второй системы задается преобразованием

$$\rho \mapsto \mathrm{Tr}_{\mathcal{F}}\, \rho.$$

3) Еще одна возможность состоит в добавлении 0. Пусть есть состояние $\rho \in \mathbf{L}(\mathbb{B}^{\otimes n})$. Рассмотрим изометричное вложение $V : \mathbb{B}^{\otimes n} \to \mathbb{B}^{\otimes N}$ в пространство большей размерности, задаваемое формулой $|\xi\rangle \overset{V}{\mapsto} |\xi\rangle \otimes |0^{N-n}\rangle$. Матрица плотности ρ при этом преобразуются в $\rho \otimes |0^{N-n}\rangle\langle 0^{N-n}|$. Теперь полагаем для любого изометричного вложения V по аналогии

$$\rho \overset{V}{\mapsto} V\rho V^\dagger.$$

Будем считать, что физически реализуемые преобразования матриц плотности есть в точности композиции любого числа преобразований вида 2) и 3) (случай 1) — частный случай преобразования вида 3).

Операция взятия частичного следа означает забывание (отбрасывание одной из подсистем). Понимать это можно так. Пусть есть произвольное состояние $\rho \in \mathbf{L}(\mathcal{N} \otimes \mathcal{F})$. Если мы выбрасываем вторую систему (в мусорную корзину), то она будет подвергаться неконтролируемым воздействиям. Пусть мы применили какой-то оператор U к первой системе. Получили состояние $\gamma = (U \otimes Y)\rho(U \otimes Y)^\dagger$, где Y — произвольный унитарный оператор (действия мусорной корзины на мусор). Если мы будем измерять вероятность для любого $\mathcal{M} \subseteq \mathcal{N}$, то она не зависит от Y и равна вероятности для состояния $\mathrm{Tr}_{\mathcal{F}}\, \gamma$. А так как частичный след определен инвариантно, то $\mathrm{Tr}_{\mathcal{F}}\left((U \otimes Y)\rho(U \otimes Y)^\dagger\right) = U\left(\mathrm{Tr}_{\mathcal{F}}\, \rho\right)U^\dagger$, поэтому

$$\mathbf{P}(\gamma, \mathcal{M} \otimes \mathcal{F}) = \mathbf{P}(\mathrm{Tr}_{\mathcal{F}}\, \gamma, \mathcal{M}) = \mathbf{P}\left(U(\mathrm{Tr}_{\mathcal{F}}\, \rho)U^\dagger, \mathcal{M}\right).$$

В качестве примера рассмотрим еще одно преобразование матриц плотности, которое задается “забыванием” внедиагональных элементов: $\rho = \sum_{ij} \rho_{ij}|i\rangle\langle j| \overset{D}{\mapsto} \sum_i \rho_{ii}|i\rangle\langle i|$. Это преобразование будем строить в три шага. Вначале добавим нулевые биты:

$$\rho \mapsto \rho \otimes |0\rangle\langle 0|.$$

Затем скопируем обратимым образом исходные биты в добавленные. Обратимое копирование задается оператором $\widehat{\oplus} : |a, b\rangle \mapsto |a, a \oplus b\rangle$. Получаем

$$\rho \otimes |0\rangle\langle 0| \overset{\widehat{\oplus}}{\mapsto} \sum_{ij} \rho_{ij}|ii\rangle\langle jj|.$$

А теперь возьмем частичный след по добавленным битам. Получим диагональную матрицу

$$\sum_i \rho_i |i\rangle\langle i|.$$

Этот пример показывает, что операция копирования не может быть корректно определена для всех квантовых состояний. Копирование $|a\rangle \mapsto |a\rangle \otimes |a\rangle$ не является линейной операцией и поэтому всегда в дальнейшем будет определяться относительно некоторого базиса. При этом состояния более сложные, чем базисные, копирование разрушает, превращая в обычные классические распределения на базисных векторах.

Рассмотренное выше преобразование D называют потерей когерентности (*decoherence*).

3. Измерение (схлопывание волнового пакета)

Рассмотрим систему, состоящую из двух частей — квантовой и классической. По классическим координатам матрица плотности диагональна:

$$\rho = \sum_{ijk} \rho_{ijkk} \left(|i\rangle\langle j|\right) \otimes \left(|k\rangle\langle k|\right) = \sum_k w_k \gamma^{(k)} \otimes \left(|k\rangle\langle k|\right).$$

Здесь последней формуле введено распределение вероятностей на классических состояниях и матрицы плотности для квантовых состояний, соответствующих определенных значениям классических переменных. Т. е. квантово-классическое состояние всегда разложимо.

Введем для этого случая специальное обозначение $\rho = \sum_k w_k \left(\gamma^{(k)}, k\right)$.

Определение. ***Измерение (детерминированное).*** Пусть $\Omega = \{1, \ldots, r\}$, $\mathcal{N} = \bigoplus_{j\in\Omega} \mathcal{L}_j$, где подпространства $\mathcal{L}_j$ попарно ортогональны.

(Детерминированным) измерением называется преобразование матриц плотности

$$\rho \ \mapsto \ \sum_j \mathbf{P}(\rho, \mathcal{L}_j) \left(\gamma^{(j)}, j\right),$$

где $\gamma^{(j)} = \mathbf{P}(\rho, \mathcal{L}_j)^{-1} \times \Pi_{\mathcal{L}_j} \rho \Pi_{\mathcal{L}_j}$.

Если мы измеряем чистые состояния, т. е. $\rho = |\xi\rangle\langle\xi|$, то $\gamma^{(j)} = |\eta_j\rangle\langle\eta_j|$, где $|\eta_j\rangle = \dfrac{\Pi_{\mathcal{L}_j}|\xi\rangle}{\sqrt{\mathbf{P}(|\xi\rangle, \mathcal{L}_j)}}$.