

物理学中的数值方法

蔡子

上海交通大学

2025年春季（第11周）



上海交通大学
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY



计算物理与数值方法: 矩阵运算

1. 矩阵相乘: $C = AB$, $C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}$ 。
2. 矩阵直积: $D = A \otimes B$, 假如 A 为 $n \times n$ 矩阵, B 为 $m \times m$ 的矩阵, 则他们的直积矩阵 D 为 $mn \times mn$ 的矩阵, 以 2×2 矩阵为例:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix},$$
$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & A_{12}B_{11} & A_{12}B_{12} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & A_{12}B_{21} & A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & A_{22}B_{11} & A_{22}B_{12} \\ A_{21}B_{21} & A_{21}B_{22} & A_{22}B_{21} & A_{22}B_{22} \end{pmatrix},$$

3. 矩阵求逆: A^{-1} 为矩阵 A 的逆矩阵, 如果 A^{-1} 满足: $A^{-1}A = I$, 其中 I 为单位矩阵:
 $I_{ij} = \delta_{ij}$ 。
4. 矩阵求行列式: $|A| = \sum_i (-1)^{i+j} A_{ij} |\mathbf{R}_{ij}|$, 其中 \mathbf{R}_{ij} 为矩阵 A 去掉第 i 行和第 j 列之后的 $n-1$ 维残余矩阵。
5. 矩阵求迹: $\text{Tr}A = \sum_i A_{ii}$,
6. 矩阵转置和厄密共轭: 定义 A^T 为 A 的转置矩阵, 如果 $A_{ij}^T = A_{ji}$ 。 A^\dagger 为 A 的厄密共轭矩阵, 如果 $A_{ij}^\dagger = A_{ji}^*$ 。 其中 A_{ji}^* 为 A_{ij} 的复共轭。



计算物理与数值方法: 矩阵运算

6. 矩阵转置和厄密共轭: 定义 A^T 为 A 的转置矩阵, 如果 $A_{ij}^T = A_{ji}$ 。 A^\dagger 为 A 的厄密共轭矩阵, 如果 $A_{ij}^\dagger = A_{ji}^*$ 。 其中 A_{ji}^* 为 A_{ji} 的复共轭。
7. 如果 A 满足 $A^T = A^{-1}$, 则矩阵 A 为正交矩阵, 它描述 n 维实空间的刚体转动。 如果 A 满足 $A^\dagger = A^{-1}$, 则矩阵 A 为么正矩阵, 它描述 n 维复空间的矢量转动, 保持复矢量的模不变。 如果 $A^\dagger = A$, 则矩阵 A 为厄密矩阵, 厄密矩阵的本征值为实数。
8. 矩阵的本征值和本征矢: 对 $n \times n$ 矩阵 A , 如果能找到 n 维矢量 $|x\rangle$, 使得 $A|x\rangle = \lambda|x\rangle$ (λ 为数字), 则称 λ 为该矩阵的本征值, $|x\rangle$ 为对应的本征矢。
9. 厄密矩阵对角化: 对于 $n \times n$ 的厄密矩阵 A , 找到一个么正矩阵 S , 使得 $S^{-1}AS = B$, 其中 B 为对角矩阵 ($B_{ij} = \delta_{ij}b_i$)。 通过对角化, 可以求得矩阵的本征值 b_i 和相应的本征矢 $|i\rangle$ 为么正矩阵 S 的第 i 列。
如果 A 是 $n \times n$ 矩阵, 则 e^A 也是一个 $n \times n$ 的矩阵。 利用矩阵对角化的公式, 可以得到一个常用的公式:

$$e^A = S e^B S^{-1} \quad (10.1)$$

其中 e^B 是一个 n 维对角矩阵, 矩阵元为 $(e^B)_{ij} = \delta_{ij}e^{b_i}$ 。

值得指出的是, 上述操作中, 矩阵乘积、求逆、求行列式、对角化的计算量随矩阵维数 n 均以 $\mathcal{O}(n^3)$ 增长。



计算物理与数值方法: 矩阵运算的应用

1维格点（开放边界条件）上单粒子薛定谔方程

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} -C_i^\dagger C_{i+1} - C_{i+1}^\dagger C_i$$

初态: $\Psi(t=0) = |00 \cdots 0 \underset{\substack{\uparrow \\ L/2}}{1} 0 \cdots 00\rangle$

t时刻: $\Psi(t) = e^{-iHt} |\Psi(0)\rangle$

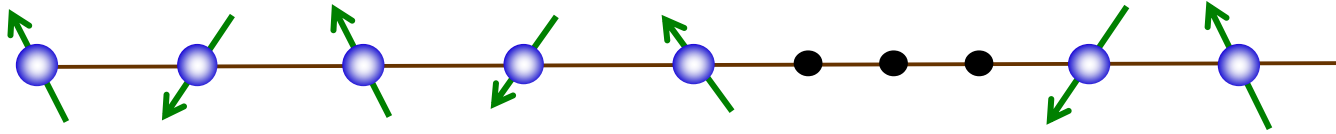
$$H = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

分别画出t=0, t=1, t=10, t=30时刻的粒子数密度空间分布

$$n_i(t) = \langle \Psi(t) | C_i^\dagger C_i | \Psi(t) \rangle$$



计算物理与数值方法: 矩阵运算的应用



$$H(t) = \sum_{ij} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z + \sum_i h_i(t) \hat{\sigma}_i^x$$

$$\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z = \underset{1}{1} \otimes \underset{2}{1} \cdots \underset{i}{\sigma^z} \otimes \cdots \underset{j}{\sigma^z} \otimes \cdots 1 \quad \hat{\sigma}_i^x = \underset{1}{1} \otimes \underset{2}{1} \cdots \underset{i}{\sigma^x} \otimes \cdots \otimes 1$$

H 是 $2^L \times 2^L$ 厄密矩阵

$$H \left| \psi_n \right\rangle = E_n \left| \psi_n \right\rangle$$

n=0 对应基态, 物理可观测量

$$O = \langle \psi_0 | \hat{O} | \psi_0 \rangle$$

时间演化:
$$i \frac{\partial}{\partial t} \left| \psi(t) \right\rangle = \hat{H} \left| \psi(t) \right\rangle \quad \left| \psi(t) \right\rangle = e^{-i\hat{H}t} \left| \psi(t=0) \right\rangle$$

$$H = -J\hat{\sigma}_1^z\hat{\sigma}_2^z + h(\hat{\sigma}_1^x + \hat{\sigma}_2^x)$$

$$H = \begin{bmatrix} -J & h & h & 0 \\ h & J & 0 & h \\ h & 0 & J & h \\ 0 & h & h & -J \end{bmatrix}$$

$$\hat{\sigma}^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{\sigma}^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$



病态问题和数值稳定性

病态问题v.s. 良态问题：由于误差的存在，在数值求解一个问题的过程中，一个重要的问题是系统参数的微小扰动对于问题的解会产生怎么的影响？对不同的问题，他们的解对参数扰动的敏感程度可能会有很大的差别。如果一个问题的解对参数的微小扰动极其敏感，这样的我们提称为病态(ill-defined) 问题，否则称为良态(well-defined) 问题。

$$\begin{bmatrix} 1.0001 & 0.9999 \\ 0.9999 & 1.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad (x_1, x_2)^T = (1, 1)^T$$

但是，如果把上述方程右边的矢量做微小扰动，线性方程变为：

$$\begin{bmatrix} 1.0001 & 0.9999 \\ 0.9999 & 1.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.0001 \\ 1.9999 \end{bmatrix}, \quad (\tilde{x}_1, \tilde{x}_2)^T = (1.5, 0.5)^T$$

可以看到该线性方程的解对方程中参数的变化极其敏感。

一个问题的病态还是良态是这个问题本身的固有属性，和具体的计算算法无关。一般来说，病态问题会对该问题的近似求解带来很大困难。



病态问题和数值稳定性

数值稳定性：在计算过程中，由于舍入误差的存在，可能会对计算结果造成影响。对同一问题，用不同的算法的计算过程中，舍入误差的积累程度可能不同，导致它们的计算结果可能会有很大不同。即使对一个良态问题，如果使用的计算方法不当，舍入误差的发散也可能导致完全错误的结果。

$$\begin{aligned}10^{-17}x_1 + x_2 &= 1 \\(1 + 10^{-17})x_1 + x_2 &= 2\end{aligned}$$

这个问题是一个良态问题。下面我们用高斯消元法来求解这一问题。

假设我们采用双精度实数（十进制下，小数点 16 位以后的位数位为舍入位）。利用高斯消元法。将第一个方程.(2.11) 两边乘以 10^{17} ，再减去方程.(2.12)，来消去 x_1 ，由于舍入误差的存在，我们可以求得 $x_2 = 1, x_1 = 0$ 。这一结果与方程的精确结果 $x_2 = 1 - 10^{-17}, x_1 = 1$ 相比，存在很大的差距。但是如果采用先将方程.(2.11) 和方程.(2.12) 相减消去 x_2 进而求得 x_1 ，可以得到 $(x_1 = 1, x_2 = 1)$ ，相比精确结果，其精度达到舍入误差的精度。

这个例子说明，对同一个问题，使用不同的算法，其结果可能差别很大。如果在计算过程中，舍入误差的积累不大，我们称这类算法的数值稳定性较好，否则称该算法数值不稳定。**算法的稳定性是算法的固有性质，一般和要计算的具体问题无关。**



计算物理与数值方法: 随机矩阵

The distributions of the energy levels of many physical systems have some universal features determined by the fundamental symmetry of the Hamiltonian.

$$\langle H_{ij} \rangle = 0,$$

$$\langle H_{ij}^2 \rangle = (1 + \delta_{ij}) \sigma^2$$



Eugene Paul Wigner



F. Dyson

1. It is hopeless to try to predict the exact energy levels and corresponding eigenstates of complex quantum-mechanical systems such as large nuclei. Instead, one should focus on their statistical properties.
2. If one looks into a small energy window where the density of states is constant, then the Hamiltonian, in a non fine-tuned basis, will look essentially like a random matrix.
3. Therefore, by studying statistical properties of random matrices (subject to the symmetries of the Hamiltonian of interest, such as time-reversal symmetry), one can gain insights on the statistical properties of energy levels and eigenstates of complex systems.



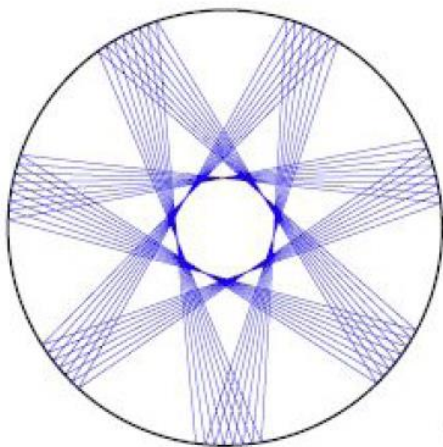
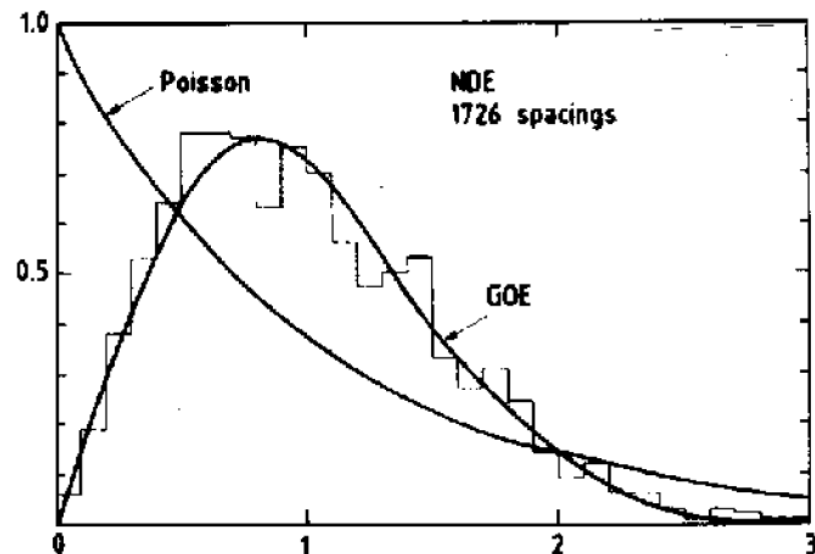
计算物理与数值方法: 随机矩阵

Time reversal symmetry:

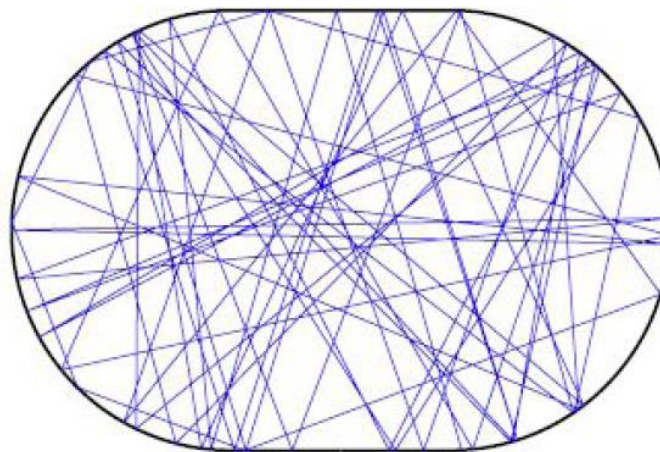
$$P(\omega) = \frac{\omega}{2\sigma^2} \exp \left[-\frac{\omega^2}{4\sigma^2} \right].$$

Non-time reversal symmetry:

$$P(\omega) = \frac{\omega^2}{2\sqrt{\pi} (\sigma^2)^{3/2}} \exp \left[-\frac{\omega^2}{4\sigma^2} \right]$$



(a)



(b)



随机矩阵：能级排斥

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \frac{V}{\sqrt{2}} \\ \frac{V^*}{\sqrt{2}} & \varepsilon_2 \end{bmatrix}, \quad E_{1,2} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 2|V|^2}.$$

$$P(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}\sigma^3} \int d\varepsilon_1 \int d\varepsilon_2 \int dV \delta\left(\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 2V^2} - \omega\right) \exp\left(-\frac{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + V^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + \sqrt{2}\xi.$$

$$P(\omega) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int \int d\xi dV \delta\left(\sqrt{2\xi^2 + 2V^2} - \omega\right) \exp\left(-\frac{\xi^2 + V^2}{2\sigma^2}\right).$$

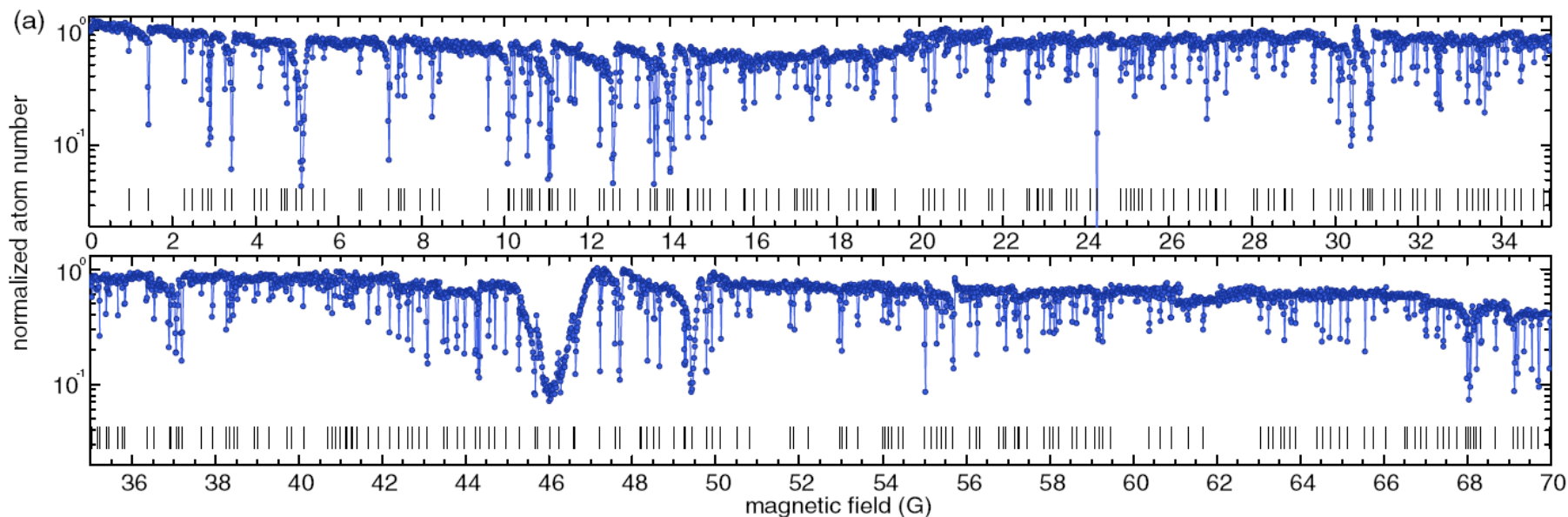
$$P(\omega) = \frac{\omega}{2\sigma^2} \exp\left[-\frac{\omega^2}{4\sigma^2}\right].$$

计算物理与数值方法: 数值线性代数

PHYSICAL REVIEW X **5**, 041029 (2015)

Emergence of Chaotic Scattering in Ultracold Er and Dy

T. Maier,^{1,*} H. Kadau,¹ M. Schmitt,¹ M. Wenzel,¹ I. Ferrier-Barbut,¹ T. Pfau,¹ A. Frisch,^{2,3} S. Baier,² K. Aikawa,^{2,†}
L. Chomaz,^{2,3} M. J. Mark,^{2,3} F. Ferlaino,^{2,3} C. Makrides,⁴ E. Tiesinga,⁵ A. Petrov,^{4,‡} and S. Kotochigova⁴



非厄密矩阵

双正交基： 对于一个 n 维矩阵 \mathbf{M} , 如果能找到矩阵 \mathbf{S} , 使得 $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{S} = \mathbf{D}$, 其中 \mathbf{D} 为对角矩阵 ($D_{ij} = \delta_{ij}\lambda_i$), 则称矩阵 \mathbf{M} 可以被对角化。假如 \mathbf{S} 的第 i 列为 n 维矢量 $|\mathbf{v}\rangle_i$, 则:

$$\mathbf{M}|\mathbf{v}\rangle_i = \lambda_i|\mathbf{v}\rangle_i \quad (10.71)$$

其中 $|\mathbf{v}\rangle_i$ 称为 \mathbf{M} 矩阵的右矢, 为一个 $n \times 1$ 的矩阵 (矢量)。

令 \mathbf{M}^\dagger 为 \mathbf{M} 的厄密共轭矩阵。如果, $\mathbf{M}^\dagger|\mathbf{u}\rangle_i = \lambda_i|\mathbf{u}\rangle_i$,

定义 ${}_i\langle\mathbf{u}| = [|\mathbf{u}\rangle_i]^\dagger$

则 ${}_i\langle\mathbf{u}|$ 称为 \mathbf{M} 的左矢, 为一个 $1 \times n$ 的矩阵 (矢量)。

1. 如果 \mathbf{M} 是厄密矩阵 $\mathbf{M} = \mathbf{M}^\dagger$, 则 $|\mathbf{u}\rangle_i = |\mathbf{v}\rangle_i$, 系统左矢为相应右矢的厄密转置 ${}_i\langle\mathbf{u}| = [|\mathbf{v}\rangle_i]^\dagger$ 。且系统的不同右矢之间满足如下关系:

$$\langle\mathbf{v}|\mathbf{v}\rangle_j = \delta_{ij}, \quad \sum_i |\mathbf{v}\rangle_i {}_i\langle\mathbf{v}| = \mathbb{I}, \quad \sum_i \lambda_i |\mathbf{v}\rangle_i {}_i\langle\mathbf{v}| = \mathbf{M} \quad (10.74)$$

2. 如果 \mathbf{M} 是一个非厄密矩阵, 则该矩阵的左矢也不再简单的是右矢的厄密转置 ${}_i\langle\mathbf{u}| \neq [|\mathbf{v}\rangle_i]^\dagger$, 该矩阵的不同右矢之间不再正交, 不再满足关系(10.74)。该矩阵的左矢和右矢一起组成了一组双正交基, 满足关系:

$${}_i\langle\mathbf{u}|\mathbf{v}\rangle_j = \delta_{ij}, \quad \sum_i |\mathbf{u}\rangle_i {}_i\langle\mathbf{v}| = \mathbb{I}, \quad \sum_i \lambda_i |\mathbf{v}\rangle_i {}_i\langle\mathbf{u}| = \mathbf{M} \quad (10.75)$$

例外点 (Exceptional point)

对 $n \times n$ 厄密矩阵 \mathbf{M} , 总是可以找到一个矩阵 \mathbf{S} , 使得 $\mathbf{S}\mathbf{M}\mathbf{S}^{-1}$ 为一个对角矩阵, 其中 \mathbf{S} 为幺正矩阵。该矩阵的本征值 λ_i 为实数, 一共存在 n 个正交的本征态 $|\mathbf{v}\rangle_i$, 他们满足正交关系.(10.74)。需要指出的是, 即使系统存在简并 $\lambda_i = \lambda_j$, 这一论述仍然成立。

但是对于某些特殊的非厄密矩阵 \mathbf{M} , 有可能不能找到一个矩阵 \mathbf{S} , 使得 $\mathbf{S}\mathbf{M}\mathbf{S}^{-1}$ 为一个对角矩阵, 这样的矩阵 \mathbf{M} 不可对角化。对于这类矩阵, 本征值一般存在简并 $\lambda_i = \lambda_j$, 但是与厄密矩阵不同, 简并的本征值对并不对应两个正交的本征态, 而是对应同一个本征态。因此本征态的数目小于矩阵维数。

例如, 下面这个非厄密矩阵即是一个不可对角矩阵:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} -i & 1 \\ 1 & i \end{pmatrix},$$

这一 2×2 矩阵的本征值为 $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$, 相应的本征态只有一个:

$$|\mathbf{v}\rangle_1 = |\mathbf{v}\rangle_2 = \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix},$$

如果矩阵 \mathbf{M} 的矩阵元是一个可调参数 ξ 的函数, 一般上述不可对角化的情况出现在参数空间的特定点上 (例如, $\xi = \xi_c$), 这样的点称为例外点 (Exceptional point)。在例外点附近, 矩阵的本征态可能随控制参数急剧变化。

赝厄密矩阵和 PT 对称性

赝厄密矩阵 (**pseduo-Hermitian matrices**) 对于一个非厄密矩阵 \mathbf{M} , 如果能够找到一个可逆的厄密矩阵 η , 使得:

$$\mathbf{M}^\dagger = \eta \mathbf{M} \eta^{-1}, \quad (10.83)$$

则称 \mathbf{M} 为赝厄密矩阵, 其本征值要么全部是实数, 要么出现复共轭对。如果 $\eta = \mathbb{I}$, 则 \mathbf{M} 为

PT 对称和对称破缺: $\hat{H} = \hat{p}^2 - (i\hat{x})^a$

$$P\hat{x}P^{-1} = -\hat{x}, \quad P\hat{p}P^{-1} = -\hat{p}, \quad T\hat{x}T^{-1} = \hat{x}, \quad T\hat{p}T^{-1} = -\hat{p}, \quad T\hat{i}T^{-1} = -i$$

当 $a \geq 2$ 是, 尽管 \hat{H} 是非厄密的, 其所有的本征值均为正实数, 且对应的本征态都满足 **PT** 对称性。

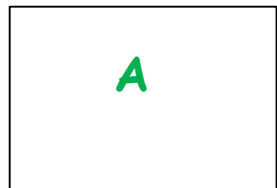
但是当 $a < 2$ 时, H 的本征值出现无数对互为厄密共轭的复数对, 同时他们对应的本征态不再满足 **PT** 对称性, 这种哈密顿量具有 **PT** 对称性, 但是本征态不具有 **PT** 对称性的现象, 称为 **PT** 对称破缺, 这是赝厄密系统的一种重要特征。



计算物理与数值方法: 奇异值(SVD)分解

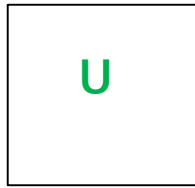
SVD (singular value decomposition):

$$A = U * D * V$$



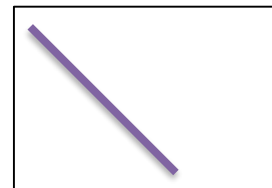
$m * n$ ($m < n$)

=



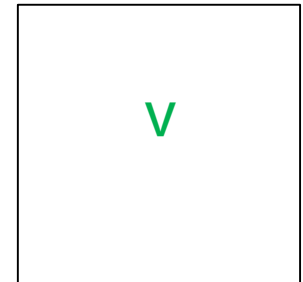
$m * m$ Unitary

*

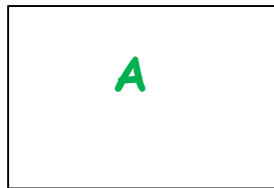


$m * n$ positive
diagonal matrix

*

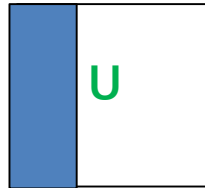


$n * n$ Unitary



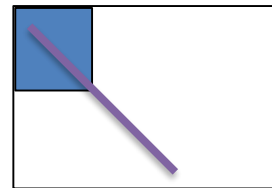
$m * n$ ($m < n$)

≈



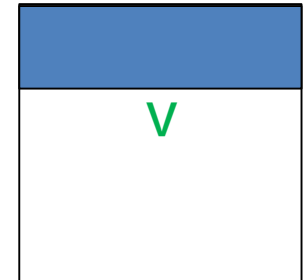
$m * D$

*



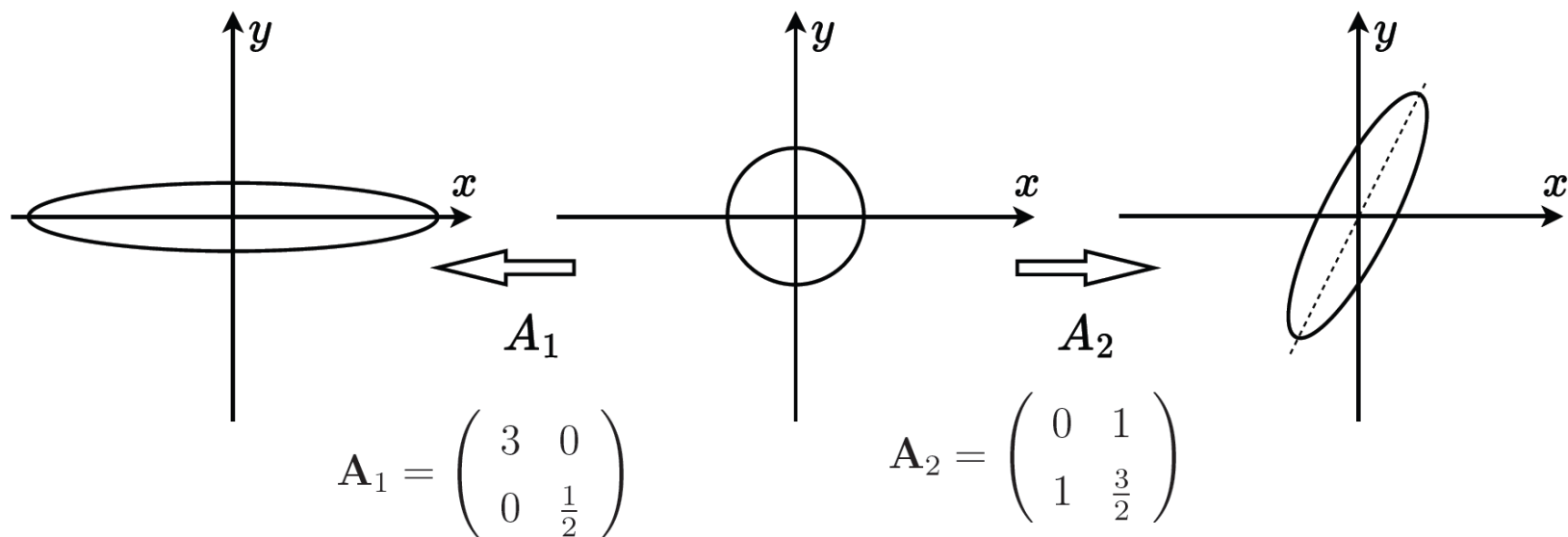
$D * D$
 $D \ll m$

*



$D * n$ Unitary

奇异值的几何意义：



\mathbf{A}_1 的奇异值为 3 和 $1/2$, 这一矩阵作用在一个单位圆上, 得到一个长轴为 3, 短轴为 $1/2$ 的椭圆

$$\mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{pmatrix} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}$$

如图.10.8所示, \mathbf{A}_2 作用到单位圆上, 得到一个长轴为 2, 短轴为 $\frac{1}{2}$ 的椭圆。其中幺正矩阵 \mathbf{U} 代表二维空间的转动, 假设 $|\mathbf{e}_x\rangle = (1, 0)^T$ ($|\mathbf{e}_y\rangle = (0, 1)^T$) 代表二维空间的 $x(y)$ 轴的单位矢量。 $\mathbf{U}|\mathbf{e}_x\rangle$ 为椭圆的长轴上的单位矢量, $\mathbf{U}|\mathbf{e}_y\rangle$ 为沿椭圆的短轴的单位矢量。

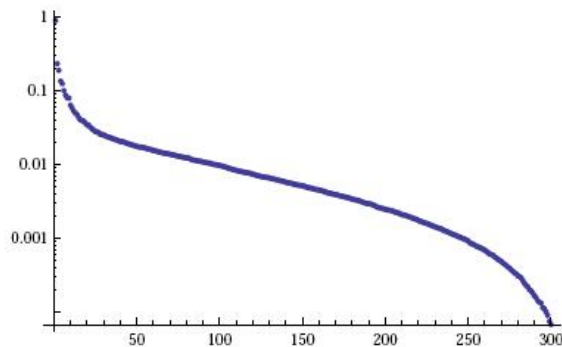


奇异值(SVD)分解的应用

应用1： 图像压缩



(a) Original Image



(b) Log plot of singular values



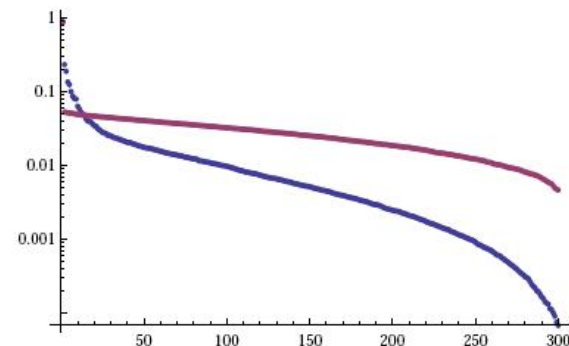
(c) 10 Singular values



(d) 50 Singular values



(e) 100 Singular values

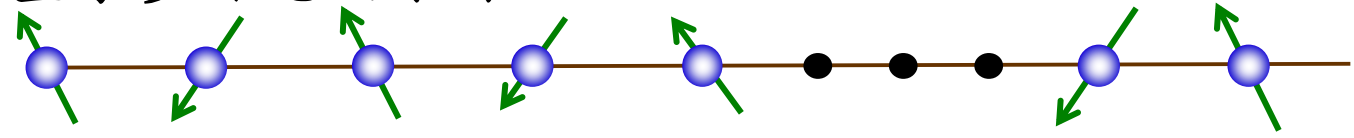


(f) Log plot of singular values: General pixel array (pink), Physical pixel array (blue)



计算物理与数值方法: 奇异值(SVD)分解

应用2: 量子多体态的表示



# of S=1/2	# of basis	Hilbert Space Dims	Eigenstates
1	$\{ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle\}$	2	
2	$\{ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle\} \otimes \{ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle\}$	2^2	
3	$\{ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle\} \otimes \{ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle\} \otimes \{ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle\}$	2^3	
...		...	
31		16GB	
32	$[\otimes \{ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle\}]^{32}$	32GB	
...		...	
60		10亿TB	
...		...	
$L \sim 10^{23}$		$exp(L \ln 2)$	指数墙的问题



计算物理与数值方法: 奇异值(SVD)分解

$$|\psi\rangle = a_{11}|00\rangle + a_{12}|01\rangle + a_{21}|10\rangle + a_{22}|11\rangle$$

如果这一波函数能够写成自旋1和自旋2两个波函数的直积的形式: $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$

这时两个自旋之间没有量子纠缠。例如当 $a_{11} = 1, a_{12} = a_{21} = a_{22} = 0, |\psi\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$

或者 $a_{11} = a_{12} = a_{21} = a_{22} = \frac{1}{2}$ 时, $|\psi\rangle = (\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle) \otimes (\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle)$.

为了定量刻画量子纠缠 $|\psi\rangle = (|\uparrow_1\rangle, |\downarrow_1\rangle) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\uparrow_2\rangle \\ |\downarrow_2\rangle \end{pmatrix}$

将对应矩阵做奇异值分解: $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} & v_{21} \\ v_{12} & v_{22} \end{pmatrix}$

奇异值满足 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq 0$ 。因此, $|\psi\rangle$ 可以写为两个直积态之和:

$$|\psi\rangle = \lambda_1(u_{11}|\uparrow_1\rangle + u_{21}|\downarrow_1\rangle) \otimes (v_{11}|\uparrow_2\rangle + v_{21}|\downarrow_2\rangle) + \lambda_2(u_{12}|\uparrow_1\rangle + u_{22}|\downarrow_1\rangle) \otimes (v_{12}|\uparrow_2\rangle + v_{22}|\downarrow_2\rangle)$$

可以证明 $\lambda_1^2 + \lambda_2^2 = 1$ 。如果 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0$, 则 $|\psi\rangle$ 为直积态, ρ_1 为纯态密度矩阵。否则为纠缠态。 λ_1 与 λ_2 越接近, $|\psi\rangle$ 离直积态越远, 纠缠度越高。为了定量刻画量子纠缠, 我们定义冯诺依曼纠缠熵:

$$S = - \sum_i \lambda_i^2 \ln \lambda_i^2 \quad (10.114)$$

当 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0$ 时, $S = 0$; 当 $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 时, S 达到最大值 $\ln 2$, 这一最大纠缠态为: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ 。

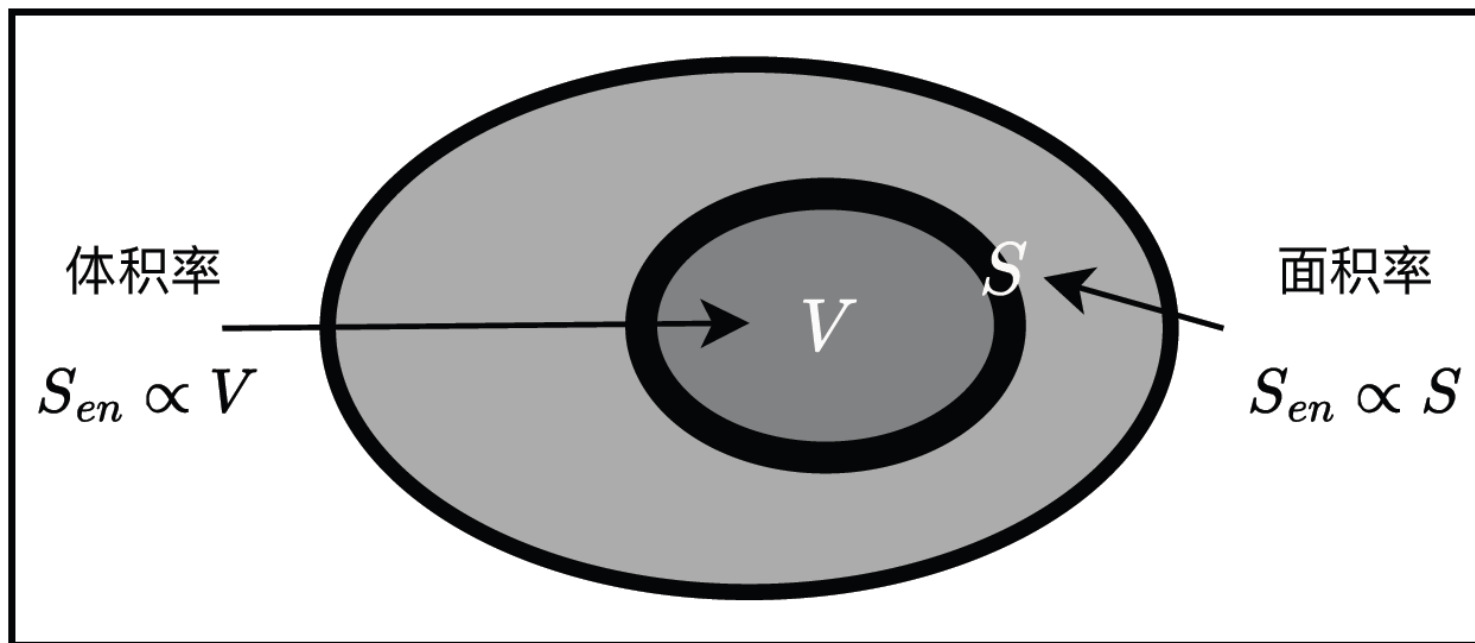


图 10.13: 满足面积率和体积率的波函数示意图。