


Note sulla matrice esponenziale: applicazione al metodo QAOA

Claudio Fontana,
University of Palermo
Palermo, Italy
claudio.fontana@unipa.it 

Si consideri la seguente matrice:

$$H_B = (X_0 \otimes I_1 \otimes I_2 \otimes I_3) + (I_0 \otimes X_1 \otimes I_2 \otimes I_3) + (I_0 \otimes I_1 \otimes X_2 \otimes I_3) + (I_0 \otimes I_1 \otimes I_2 \otimes X_3)$$

dove $X_i = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ applicata al qubit di indice i .

La matrice H_B è somma di termini del tipo:

$$M_i = (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes X_i \otimes I_{i+1} \otimes \dots \otimes I_n) \quad i = 0, \dots, n.$$

$$\begin{aligned} e^{i\beta(I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes X_i \otimes I_{i+1} \otimes \dots \otimes I_n)} &= \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\beta)^k (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes X_i \otimes I_{i+1} \otimes \dots \otimes I_n)^k}{k!} = \\ &= (I_s \otimes I_i \otimes I_d) + (i\beta)(I_s \otimes X_i \otimes I_d) + \frac{(i\beta)^2}{2} (I_s \otimes X_i \otimes I_d)(I_s \otimes X_i \otimes I_d) + \dots \end{aligned}$$

in cui I_s e I_d denotano i prodotti tensore delle matrici identiche che si trovano rispettivamente a sinistra e a destra della matrice X_i .

Dalla proprietà distributiva del prodotto tensore rispetto alla somma si ha:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\beta)^k (I_s \otimes X_i \otimes I_d)^k}{k!} &= \\ &= (I_s \otimes I_i \otimes I_d) + (i\beta)(I_s \otimes X_i \otimes I_d) + \frac{(i\beta)^2}{2} (I_s \otimes X_i \otimes I_d)(I_s \otimes X_i \otimes I_d) + \dots = \\ &= (I_s \otimes I_i \otimes I_d) + (i\beta)(I_s \otimes X_i \otimes I_d) + \frac{(i\beta)^2}{2} (I_s^2 \otimes X_i^2 \otimes I_d^2) + \dots = \\ &= I_s \otimes \left((I_i) + (i\beta)(X_i) + \frac{(i\beta)^2}{2} (X_i^2) + \dots \right) \otimes I_d = \\ &= I_s \otimes e^{i\beta X_i} \otimes I_d \end{aligned}$$

Pertanto:

$$e^{i\beta(I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes X_i \otimes I_{i+1} \otimes \dots \otimes I_n)} = \bigotimes_{j=0}^{i-1} (I_j) \otimes e^{i\beta X_i} \otimes \bigotimes_{j=i+1}^n (I_j) = e^{i\beta X_i}$$

in cui nell'ultima espressione si è posto implicitamente che l'azione dell'esponenziale agisce in maniera osservabile solo sul qubit i a cui viene applicato l'operatore $e^{i\beta X}$.

Il prodotto fra le matrici M_i è commutativo, infatti:

$$M_i M_j = (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes X_i \otimes I_{i+1} \otimes \dots \otimes I_n) \cdot (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{j-1} \otimes X_j \otimes I_{j+1} \otimes \dots \otimes I_n) =$$

$$= \begin{cases} (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes X_i \otimes \dots \otimes X_j \otimes \dots \otimes I_n) & i \neq j \\ (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes I_i \otimes I_{i+1} \otimes \dots \otimes I_n) & i = j \end{cases} = M_j M_i$$

Stessa cosa vale per i prodotti a tre a tre e così via:

$$M_i M_j M_k =$$

$$= \begin{cases} (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes X_i \otimes \dots \otimes X_j \otimes \dots \otimes X_k \otimes \dots \otimes I_n) & i \neq j \neq k \\ (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes I_i \otimes \dots \otimes X_k \otimes \dots \otimes I_n) & i = j \neq k \\ (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes X_i \otimes I_{i+1} \otimes \dots \otimes I_n) & i = j = k \end{cases}$$

$$= M_i M_k M_j = M_j M_i M_k = M_j M_k M_i = M_k M_i M_j = M_k M_j M_i$$

La commutatività tra le matrici M_i è una condizione sufficiente ad affermare (formula BCH, di Baker, Campbell e Hausdorf):

$$e^{-i\beta H_B} = e^{-i\beta \sum_{j=0}^n M_j} = \prod_{j=0}^n e^{-i\beta M_j}$$

Questo risultato unito al risultato precedente consente di concludere:

$$e^{-i\beta H_B} = e^{-i\beta \sum_{j=0}^n M_j} = \prod_{j=0}^n e^{-i\beta M_j} = \prod_{j=0}^n e^{-i\beta X_j}$$

in cui il prodotto a secondo membro indica l'azione cascata (in questo caso simultanea) dell'operatore $e^{-i\beta X}$ applicato ai qubit di indici $j = 0, \dots, n$.

In particolare, dalla relazione:

$$e^{i\beta A} = \cos(\beta) I + i \sin(\beta) A, \text{ posto che sia } A^2 = I, \text{ poiché } X^2 = I, \text{ segue:}$$

$$e^{-i\frac{\beta}{2} X} = \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) I - i \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) X = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -i \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ -i \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{bmatrix} \triangleq R_x(\beta) \text{ (matrice di rotazione rispetto}$$

all'asse x sulla sfera di Bloch), da cui:

$$e^{-i\beta H_B} = \prod_{j=0}^n e^{-i\beta X_j} = \prod_{j=0}^n R_{x_j}(2\beta)$$

Si osserva che se vale la formula BCH, allora $e^{A+B} = e^A e^B = e^{B+A} = e^B e^A$ ossia le matrici esponenziali commutano.

Si consideri ora la seguente matrice:

$$H_p = (Z_0 \otimes Z_1 \otimes I_2 \otimes I_3) + (I_0 \otimes Z_1 \otimes Z_2 \otimes I_3) + (Z_0 \otimes I_1 \otimes I_2 \otimes Z_3) + (I_0 \otimes I_1 \otimes Z_2 \otimes Z_3)$$

in cui $Z_k = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ applicata ai qubit di indici $k = i, j$.

La matrice H_p è somma di termini del tipo:

$$M_{ij} = (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \dots \otimes Z_j \otimes I_{j+1} \otimes \dots \otimes I_n) \quad i \neq j \in \{0, \dots, n\}.$$

$$\begin{aligned} e^{i\beta(I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \dots \otimes Z_j \otimes I_{j+1} \otimes \dots \otimes I_n)} &= \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\beta)^k (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \dots \otimes Z_j \otimes I_{j+1} \otimes \dots \otimes I_n)^k}{k!} = \\ &= \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\beta)^k (I_s \otimes Z_i \otimes I_c \otimes Z_j \otimes I_d)^k}{k!} \end{aligned}$$

in cui I_s , I_c e I_d denotano i prodotti tensore delle matrici identiche che si trovano rispettivamente a sinistra, comprese e a destra delle matrici Z_i e Z_j .

Analogamente a quanto ottenuto nel caso precedente risulta:

$$\begin{aligned} e^{i\beta(I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \dots \otimes Z_j \otimes I_{j+1} \otimes \dots \otimes I_n)} &= I_s \otimes \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\beta)^k (Z_i \otimes I_c \otimes Z_j)^k}{k!} \otimes I_d = \\ &= I_s \otimes e^{i\beta(Z_i \otimes I_c \otimes Z_j)} \otimes I_d \end{aligned}$$

La facile verifica mostra che:

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{\beta}{2}(Z_i \otimes I \otimes Z_j)} &= CNOT_{ij} \cdot e^{-i\frac{\beta}{2}(I_i \otimes Z_j)} \cdot CNOT_{ij} = \\ &= CNOT_{ij} \cdot I_i \otimes R_{z_j}(\beta) \cdot CNOT_{ij} \triangleq R_{zz_{ij}}(\beta) \end{aligned}$$

dove: $CNOT_{ij} \triangleq |0\rangle\langle 0|_i \otimes I_j + |1\rangle\langle 1|_i \otimes X_j$ e $X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$; inoltre, da $Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ e $Z^2 = I$ segue:

$$e^{-i\frac{\beta}{2}(I_i \otimes Z_j)} = I_i \otimes e^{-i\frac{\beta}{2}Z_j} = I_i \otimes R_{z_j}(\beta), \text{ in cui si denota con:}$$

$$R_z(\beta) \triangleq e^{-i\frac{\beta}{2}Z} = \cos\left(\frac{\beta}{2}\right)I - i\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)Z = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\beta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\beta}{2}} \end{bmatrix} \text{ la matrice di rotazione rispetto all'asse } z \text{ sulla}$$

sfera di Bloch.

Mettendo assieme i risultati si ottiene:

$$\begin{aligned} e^{-i\beta(I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \dots \otimes Z_j \otimes I_{j+1} \otimes \dots \otimes I_n)} &= I_s \otimes e^{-i\beta(Z_i \otimes I_c \otimes Z_j)} \otimes I_d = \\ &= I_s \otimes CNOT_{ij} \cdot e^{-i\beta(I_i \otimes Z_j)} \cdot CNOT_{ij} \otimes I_d = R_{zz_{ij}}(2\beta) \end{aligned}$$

in cui nell'ultima espressione si è posto implicitamente che l'azione dell'esponenziale agisce in maniera osservabile solo sui qubit i e j tra i quali viene applicato l'operatore $R_{zz_{ij}}(2\beta)$.

Il prodotto fra le matrici M_{ij} è commutativo, infatti:

$$\begin{aligned} M_{ij}M_{ik} &= (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \dots \otimes Z_j \otimes I_{j+1} \otimes \dots \otimes I_n) \cdot \\ &\cdot (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \dots \otimes Z_k \otimes I_{k+1} \otimes \dots \otimes I_n) = \\ &= \begin{cases} (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes I_i \otimes \dots \otimes Z_j \otimes \dots \otimes Z_k \otimes \dots \otimes I_n) & j \neq k \\ (I_0 \otimes I_1 \otimes \dots \otimes I_{i-1} \otimes I_i \otimes I_{i+1} \otimes \dots \otimes I_n) & j = k \end{cases} = M_{ik}M_{ij} \end{aligned}$$

e così via per le altre combinazioni a due a due, a tre a tre ecc.

La commutatività tra le matrici M_{ij} consente di scrivere:

$$e^{-i\beta H_P} = e^{-i\beta \sum_{i \neq j=0}^n M_{ij}} = \prod_{i \neq j=0}^n e^{-i\beta M_{ij}}$$

Questo risultato unito al risultato precedente consente di concludere:

$$e^{-i\beta H_P} = \prod_{i \neq j} e^{-i\beta M_{ij}} = \prod_{i \neq j} R_{zz_{ij}}(2\beta)$$

in cui il prodotto a secondo membro indica l'azione cascata dell'operatore di rotazione $R_{zz}(2\beta)$ applicato ai qubit di indici $i \neq j$.

Alcuni risultati fondamentali:

Sia x un numero reale e A una matrice involutiva ossia tale che $A^2 = I$. Risulta:

$$e^{iAt} = \cos(t)I + i \sin(t)A$$

Dimostrazione

$$A^2 = I \Rightarrow A^2 v = \lambda A v \Rightarrow A v = \lambda^2 v \Rightarrow \lambda = \pm 1$$

Nella base degli autovettori di A sussiste la decomposizione:

$$\begin{aligned} e^{iAt} &= e^{it} |v_1\rangle\langle v_1| + e^{-it} |v_{-1}\rangle\langle v_{-1}| = \\ &= \cos(t)(|v_1\rangle\langle v_1| + |v_{-1}\rangle\langle v_{-1}|) + i \sin(t)(|v_1\rangle\langle v_1| - |v_{-1}\rangle\langle v_{-1}|) \\ &= \cos(t)I + i \sin(t)A \end{aligned}$$

Alle stesse conclusioni si arriva considerando lo sviluppo in serie della funzione esponenziale:

$$\begin{aligned}
e^{iAt} &= \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(iAt)^k}{k!} = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(it)^{2k}}{(2k)!} A^{2k} + \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(it)^{2k+1}}{(2k+1)!} A^{2k+1} = \\
&= \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k \frac{t^{2k}}{(2k)!} I + i \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k \frac{t^{2k+1}}{(2k+1)!} A = \\
&= \cos(t) I + i \sin(t) A
\end{aligned}$$

in cui si è fatto uso dello sviluppo in serie delle funzioni seno e coseno:

$$\cos(t) = \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k \frac{t^{2k}}{(2k)!}; \quad \sin(t) = \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k \frac{t^{2k+1}}{(2k+1)!}$$

C.V.D.

Vale la seguente identità:

$$e^{iZ \otimes Zt} = CNOT \cdot e^{iI \otimes Zt} \cdot CNOT$$

$$\text{dove: } CNOT \triangleq |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X \quad \text{e} \quad X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Dimostrazione

$$Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad Z^2 = I \quad \text{da cui:}$$

$$e^{iI \otimes Zt} = I \otimes e^{iZt} = I \otimes (\cos(t) I + i \sin(t) Z)$$

Dimostriamo la tesi per verifica:

$$\begin{aligned}
CNOT \cdot e^{iI \otimes Zt} \cdot CNOT &= \\
&= (|0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X) (\cos(t) I \otimes I + i \sin(t) I \otimes Z) (|0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X) = \\
&= (\cos(t) |0\rangle\langle 0| \otimes I + i \sin(t) |0\rangle\langle 0| \otimes Z + \cos(t) |1\rangle\langle 1| \otimes X + i \sin(t) |1\rangle\langle 1| \otimes XZ) \cdot \\
&\cdot (|0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X) = \\
&= \cos(t) |0\rangle\langle 0| \otimes I + i \sin(t) |0\rangle\langle 0| \otimes Z + \cos(t) |1\rangle\langle 1| \otimes I + i \sin(t) |1\rangle\langle 1| \otimes XZX = \\
&= \cos(t) I \otimes I + i \sin(t) (|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) \otimes Z = \\
&= \cos(t) I \otimes I + i \sin(t) Z \otimes Z
\end{aligned}$$

in cui si è fatto uso delle seguenti relazioni:

$$X^2 = I;$$

$$I = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|;$$

$$XZX = -Z;$$

$$Z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|.$$

Si osserva che la matrice $e^{iI \otimes Zt} = I \otimes e^{iZt} = I \otimes (\cos(t)I + i \sin(t)Z) = I \otimes R_z(-2t)$ con

$$R_z(\theta) \triangleq e^{-i\frac{\theta}{2}Z} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)Z = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{bmatrix}$$

la matrice di rotazione rispetto all'asse z sulla sfera di Bloch.

C.V.D.

Riferimenti:

[Solving combinatorial optimization problems using QAOA \(qiskit.org\);](https://qiskit.org/)

M. A. Nielsen, I. L. Chuang, “Quantum Computation and Quantum Information,” Cambridge University Press, 10th Anniversary Edition, 2010, ISBN: 978-1-107-00217-3.