Note sulla matrice esponenziale: applicazione al metodo QAOA

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

Si consideri la seguente matrice:

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

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:

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

$$e^{i\beta\left(I_0 \otimes I_1 \otimes \cdots I_{i-1} \otimes X_i \otimes I_{i+1} \otimes \cdots \otimes I_n\right)} = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\beta)^k \left(I_0 \otimes I_1 \otimes \cdots I_{i-1} \otimes X_i \otimes I_{i+1} \otimes \cdots \otimes I_n\right)^k}{k!} =$$

$$= \left(I_s \otimes I_i \otimes I_d\right) + (i\beta)\left(I_s \otimes X_i \otimes I_d\right) + \frac{(i\beta)^2}{2}\left(I_s \otimes X_i \otimes I_d\right)\left(I_s \otimes X_i \otimes I_d\right) + \cdots$$

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:

$$\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\beta)^k \left(I_s \otimes X_i \otimes I_d\right)^k}{k!} =$$

$$= \left(I_s \otimes I_i \otimes I_d\right) + (i\beta)\left(I_s \otimes X_i \otimes I_d\right) + \frac{(i\beta)^2}{2}\left(I_s \otimes X_i \otimes I_d\right)\left(I_s \otimes X_i \otimes I_d\right) + \cdots =$$

$$= \left(I_s \otimes I_i \otimes I_d\right) + (i\beta)\left(I_s \otimes X_i \otimes I_d\right) + \frac{(i\beta)^2}{2}\left(I_s^2 \otimes X_i^2 \otimes I_d^2\right) + \cdots =$$

$$= I_s \otimes \left(\left(I_i\right) + (i\beta)\left(X_i\right) + \frac{(i\beta)^2}{2}\left(X_i^2\right) + \cdots \right) \otimes I_d =$$

$$= I_s \otimes e^{i\beta X_i} \otimes I_d$$

Pertanto:

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

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:

$$M_iM_j = \left(I_0 \otimes I_1 \otimes \cdots I_{i-1} \otimes X_i \otimes I_{i+1} \otimes \cdots \otimes I_n\right)\cdot\left(I_0 \otimes I_1 \otimes \cdots I_{j-1} \otimes X_j \otimes I_{j+1} \otimes \cdots \otimes I_n\right) =$$

$$= \begin{cases} \left(I_0 \otimes I_1 \otimes \cdots I_{i-1} \otimes X_i \otimes \cdots X_j \otimes \cdots \otimes I_n\right) & i \neq j \\ \left(I_0 \otimes I_1 \otimes \cdots I_{i-1} \otimes I_i \otimes I_{i+1} \otimes \cdots \otimes I_n\right) & i = j \end{cases} = M_jM_i$$

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

$$M_iM_jM_k =$$

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

$$= M_iM_kM_j = M_jM_iM_k = M_jM_kM_i = M_kM_iM_j = M_kM_jM_i$$

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 $j = 0,\ldots,n$.
In particolare, dalla relazione:

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

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

$$H_P = \left(Z_0 \otimes Z_1 \otimes I_2 \otimes I_3\right) + \left(I_0 \otimes Z_1 \otimes Z_2 \otimes I_3\right) + \left(Z_0 \otimes I_1 \otimes I_2 \otimes Z_3\right) +$$
$$+\left(I_0 \otimes I_1 \otimes Z_2 \otimes Z_3\right)$$

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:

$$M_{ij} = \left(I_0 \otimes I_1 \otimes \cdots I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \cdots Z_j \otimes I_{j+1} \otimes \cdots \otimes I_n\right) \qquad i \neq j \in \{0, \ldots, n\}.$$

$$e^{i\beta\left(I_0 \otimes I_1 \otimes \cdots I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \cdots Z_j \otimes I_{j+1} \otimes \cdots \otimes I_n\right)} = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\beta)^k \left(I_0 \otimes I_1 \otimes \cdots I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \cdots Z_j \otimes I_{j+1} \otimes \cdots \otimes I_n\right)^k}{k!} =$$
$$= \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\beta)^k \left(I_s \otimes Z_i \otimes I_c \otimes Z_j \otimes I_d\right)^k}{k!}$$

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:

$$e^{i\beta\left(I_0 \otimes I_1 \otimes \cdots I_{i-1} \otimes Z_i \otimes \cdots Z_j \otimes I_{j+1} \otimes \cdots \otimes I_n\right)} = I_s \otimes \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(i\beta)^k \left(Z_i \otimes I_c \otimes Z_j\right)^k}{k!} \otimes I_d =$$
$$= I_s \otimes e^{i\beta\left(Z_i \otimes I_c \otimes Z_j\right)} \otimes I_d$$

La facile verifica mostra che:

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

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:

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

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

Mettendo assieme i risultati si ottiene:

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

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 $R_{zz_{ij}}\left(2\beta\right)$.

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

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

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:

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

Questo risultato unito al risultato precedente consente di concludere:

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

in cui il prodotto a secondo membro indica l'azione cascata dell'operatore di rotazione $R_{zz}\left(2\beta\right)$ 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:

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

Dimostrazione

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

Nella base degli autovettori di A sussiste la decomposizione:

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

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

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

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

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

C.V.D.

Vale la seguente identità:

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

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

Dimostrazione

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

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

Dimostriamo la tesi per verifica:

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

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 $e^{iI\otimes Zt} = I\otimes e^{iZt} = I\otimes\left(\cos(t)I + i\sin(t)Z\right) = I\otimes R_z(-2t)$ 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);

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