



Математическое моделирование и геометрия

Том 8, № 3, стр. 1 – 14 (2020)

doi: [10.26456/mmg/2020-831](https://doi.org/10.26456/mmg/2020-831)

Базисный формализм Паули в квантовых вычислениях

В.В. Никонов^а и А.Н. Цирулев^б

Математический факультет Тверского государственного университета, Садовый пер. 35, Тверь, Россия

электронная почта: anikonov.vv@tversu.ru atsirulev.an@tversu.ru

Поступила 1 декабря 2020 г., в окончательном виде 28 декабря. Опубликовано 30 декабря 2020 г.

Абстрактный. В данной статье рассматриваются квантовые вычисления в базисе Паули, элементы которого обычно отождествляются со струнами Паули. Этот подход позволяет нам представлять квантовые состояния, наблюдаемые и унитарные операторы в унифицированной форме линейной комбинации струн Паули, так что все операции можно свести к композициям струн. Тем не менее формальное обоснование базиса Паули для квантовых вычислений должно основываться на сильных результатах комплексной линейной алгебры и теории гильбертовых пространств. Кратко рассмотрены основные свойства струн Паули для квантовых состояний и унитарных операторов, а также ключевые операции с ними, включая алгоритм композиции струн и алгоритм преобразования из стандартного базиса в базис Паули.

Ключевые слова: квантовые вычисления, базис Паули

Номера МСК: 81П16, 81П68

1. Введение

Теория квантовых вычислений остается в поле большого внимания на протяжении последних двух десятилетий. Различные типы и подтипы квантовых вычислений адаптированы для разных технологий и аппаратных архитектур, но их математические структуры построены с использованием одних и тех же основных понятий гильбертова пространства, квантовой наблюдаемой, унитарного оператора и квантового состояния. В данной статье мы рассматриваем взаимодействующую составную квантовую систему, состоящую из n идентичных двухуровневых подсистем (кубитов), так что размерность соответствующего гильбертова пространства равна 2^n . Квантовые вычисления в чистом состоянии с числом вентилей, полиномиально зависящим от числа кубитов, могут быть эффективно смоделированы классически. Поскольку универсальный квантовый компьютер, демонстрирующий квантовое превосходство, должен иметь большое количество кубитов, скажем $n \geq 1000$, количество базисных состояний $2^n > 10^{300}$. Квантовые компьютеры с небольшим количеством кубитов ($n \sim 100$), которые будут доступны в ближайшем будущем, должны использоваться вместе с классическим компьютером. В обоих случаях многокубитные квантовые вычисления очень чувствительны к выбору вычислительного базиса. [1,2,3].

Есть две общие возможности выбора базиса, и какая из них более эффективна, зависит как от данного алгоритма, так и от конкретного типа квантового компьютера. Во-первых, мы можем использовать стандартный ортонормированный базис в базисном гильбертовом пространстве, а затем построить подходящий базис в алгебре линейных операторов. Однако такой подход оказывается неудобным и неестественным при рассмотрении задач, связанных со смешанными состояниями, графовыми состояниями [4], исправления ошибок [3,5,6], тензорные сети [7,8,9] и вообще ко всем проблемам, где измерения не являются проективными [10,11,12]. Вторая возможность связана непосредственно с базисом в операторной алгебре, и в этом случае базисные элементы обычно не могут быть разделены на тензорное произведение некоторых кет- и бра-векторов; базис Паули считается лучшим выбором, потому что он эрмитов, ортонормирован (по отношению к скалярному произведению Гильберта-Шмидта) и составляет ортонормированный базис в алгебре Ли соответствующей унитарной группы. Группа Клиффорда, имеющая множество приложений в квантовых вычислениях, проще всего описывается в терминах базиса Паули [1]. [10,14].

Основная цель этой статьи — дать систематический алгебраический обзор многокубитных систем в базисе Паули. Статья организована следующим образом. Раздел 2 содержит некоторые необходимые математические предварительные сведения. В разделе 3 мы даем краткое описание квантовых состояний для n -кубитовая квантовая система в базисе Паули. Раздел 4 посвящен изучению некоторых вычислительных свойств струн Паули. В разделе 5 мы рассматриваем вычислительные алгоритмы, предназначенные для перехода от стандартного базиса к базису Паули.

На протяжении всей этой статьи мы используем натуральные единицы $\hbar = c = 1$. Для удобства чтения некоторые обозначения сделаны контекстно-зависимыми: строчные буквы латинского алфавита в двоичных строках (например, в символах bra и ket) принимают значения 0 и 1, а в строках и индексах Паули — от 0 до 3.

2. Основные черты базиса Паули

Мы будем рассматривать квантовую систему n различимых кубитов, где кубит связан с двумерным пространством $\text{Hi}(\text{Iber})t$ \mathcal{H}_1 его двойственное (эрмитово сопряженное) космос \mathcal{H}_1^* . Позволять $\mathcal{H}_n = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1$ $\mathcal{H}_n = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_1$ — гильбертово пространство системы и его двойственный соответственно, и пусть $\mathcal{L}(\mathcal{H}_n) = \mathcal{H}_n \otimes \mathcal{H}_n^*$ — пространство линейных операторов действующий на \mathcal{H}_n \mathcal{H}_n левым и правым сокращениями соответственно. Затем

$$\dim \mathcal{H}_n = 2^n, \dim \mathcal{L}(\mathcal{H}_n) = 2^{2n}.$$

Будем также считать, что пространство $\mathcal{L}(\mathcal{H}_n)$ снабжен внутренним произведением Гильберта-Шмидта,

$$\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle = \text{tr}(\hat{A}^\dagger \hat{B}), \quad \hat{A}, \hat{B} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_n), \quad (1)$$

который является естественным продолжением внутреннего продукта в \mathcal{H}_n . Вещественное линейное пространство эрмитовых операторов далее обозначается как $\mathcal{H}(\mathcal{H}_n)$.

Позволять $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ быть ортонормированным базисом в некотором однокубитном пространстве \mathcal{H}_1 . матрица и матрицы Паули, Единица

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

определить четыре оператора Паули

$$\hat{\sigma}_1 = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|, \quad \hat{\sigma}_2 = |0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|, \\ \hat{\sigma}_3 = -i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0|, \quad \hat{\sigma}_4 = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|,$$

которые эрмитовы и унитарны одновременно, и которые составляют основу в $\mathcal{H}(\mathcal{H}_1)$.

Обратное преобразование дается выражением

$$|0\rangle\langle 0| = \frac{\hat{\sigma}_4 + \hat{\sigma}_3}{2}, \quad |0\rangle\langle 1| = \frac{\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2}{2}, \quad |1\rangle\langle 0| = \frac{\hat{\sigma}_1 - i\hat{\sigma}_2}{2}, \quad |1\rangle\langle 1| = \frac{\hat{\sigma}_4 - \hat{\sigma}_3}{2}.$$

Напомним, что для $k, l, m \in \{1, 2, 3\}$ у нас есть $\text{tr} \hat{\sigma}_k = 0$, $\hat{\sigma}_k^2 = I$, и

$$\hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l = -\hat{\sigma}_l \hat{\sigma}_k, \quad \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l = i \text{знак}(\pi) \hat{\sigma}_m, \quad (k, l, m) = (1, 2, 3), \quad (2)$$

где $\pi(1, 2, 3)$ является перестановкой $\{1, 2, 3\}$.

Есть стандартный бинарный базис в \mathcal{H}_n порожденные ортонормированными базисами $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ в соответствующих однокубитных пространствах. Математически положение в тензорном произведении отличает кубиты друг от друга. Поэтому для фиксированного n , элемент этого базиса и соответствующий ему элемент двойственного базиса удобно записать в виде

$$|k\rangle = |k_1 \dots k_n\rangle = |k_1\rangle \otimes \dots \otimes |k_n\rangle, \quad \langle k| = \langle k_1 \dots k_n| = \langle k_1| \otimes \dots \otimes \langle k_n|,$$

¹Мы не используем обычный термин «вычислительный», потому что это может привести к путанице. Базис Паули и стандартный базис являются вычислительными в одном и том же смысле.

относительно строк $k_1 \dots k_N (k_1, \dots, k_N \in \{0, 1\})$ как двоичное число и обозначая его десятичным представлением k . Например, $|101\rangle = |5\rangle$ и $|00110\rangle = |6\rangle$

В стандартной основе,

$$|y\rangle = \sum_{k=0}^{2^N-1} \delta_{yk} |k\rangle, \quad \hat{A} = \sum_{k, l=0}^{2^N-1} a_{kl} |k\rangle \langle l|,$$

где $|y\rangle \in H$ и $\hat{A} \in \mathcal{L}(H)$.

The базис Паули $\mathcal{L}(H)$ в $\mathcal{L}(H)$ определяется

$$\{\hat{\sigma}_{k_1 \dots k_N}^{x, y, z} \mid k_1, \dots, k_N \in \{0, 1, 2, 3\}\}, \quad \hat{\sigma}_{k_1 \dots k_N} = \hat{\sigma}_{k_1}^{x, y, z} \otimes \dots \otimes \hat{\sigma}_{k_N}^{x, y, z}, \quad (3)$$

где $\hat{\sigma}_0$ является тождественным оператором. Очевидно, что $\mathcal{L}(H)$ состоит из 4^N элементов. Мы будем использовать компактные обозначения, такие как

$$\hat{\sigma}_k = \hat{\sigma}_{k_1 \dots k_N},$$

обозначая $k_1 \dots k_N$ как k , где $k_1, \dots, k_N \in \{0, 1, 2, 3\}$, соответствующей заглавной буквой K . При этом мы часто будем рассматривать k как число, то есть как десятичное представление строки; понятно что $0 \leq k \leq 4^N - 1$. Обратите внимание, что струна Паули K и элемент $\hat{\sigma}_K$ базиса Паули полностью определяются друг другом и, следовательно, могут быть отождествлены. Например, элементы стандартного базиса выражены в терминах базиса Паули в Приложении А1 на стр. 12.

Полезно сравнить $\mathcal{L}(H)$ со стандартным основанием. У нас есть

$$\hat{\sigma}_{k_1 \dots k_N}^{x, y, z} \hat{\sigma}_{l_1 \dots l_N}^{x, y, z} = \delta_{k_1 l_1} \dots \delta_{k_N l_N} \hat{\sigma}_{0 \dots 0}^{x, y, z} = \delta_{k, l} \hat{\sigma}_{0 \dots 0}^{x, y, z} = \delta_{k, l} \hat{\sigma}_0. \quad (4)$$

Базис Паули эрмитов, унитарный и ортогональный относительно скалярного произведения (1). Обратите внимание, что оператор $|k\rangle \langle l|$ стандартного базиса не унитарна и не эрмитова, если $k \neq l$. Стандартный базис не содержит тождественного оператора, имеющего вид

$$\sum_{k=0}^{2^N-1} |k\rangle \langle k|$$

в той основе. В базисе Паули любой оператор \hat{U} из унитарной группы $\mathcal{U}(H)$ (то есть, $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{\sigma}_0$) имеет разложение вида

$$\hat{U} = \sum_{j_1, \dots, j_N \in \{0, 1, 2, 3\}} U_{j_1 \dots j_N} \hat{\sigma}_{j_1 \dots j_N}, \quad \hat{U}^\dagger = \sum_{j_1, \dots, j_N \in \{0, 1, 2, 3\}} \overline{U_{j_1 \dots j_N}} \hat{\sigma}_{j_1 \dots j_N},$$

где

$$\sum_{j_1, \dots, j_N \in \{0, 1, 2, 3\}} \overline{U_{j_1 \dots j_N}} U_{j_1 \dots j_N} = 1, \quad \sum_{\substack{j_1, \dots, j_N, \text{ Дж1, ..., ДжN} \in \{0, 1, 2, 3\} \\ (j_1, \dots, j_N) \neq (\text{Дж1}, \dots, \text{ДжN})}} \overline{U_{j_1 \dots j_N}} U_{\text{Дж1} \dots \text{ДжN}} = 0. \quad (5)$$

Обратите внимание, что буквенное условие может быть очевидно разложено на $2^{2N-1} - 1$ независимые условия.

3. Квантовые состояния в базисе Паули

Квантовое состояние (оператор плотности) является эрмитовым, положительно полуопределенным (или положительным¹, короче) оператор вида

$$\rho^n = \frac{1}{2^n} \sum_{k_1, \dots, k_n \in \{0, 1, 2, 3\}} a_{k_1 \dots k_n} \hat{\sigma}_{k_1 \dots k_n} \equiv \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^{4^n-1} a_k \hat{\sigma}_k, \quad (5)$$

где $a_{k_1 \dots k_n}$ —

$$a_{0 \dots 0} = 1, \quad |a_{k_1 \dots k_n}| \leq 1, \quad \sum_{k_1, \dots, k_n \in \{0, 1, 2, 3\}} (a_{k_1 \dots k_n})^2 = 2^{2n}. \quad (6)$$

Условия (6) гарантируют, что $\rho^n = \rho^n^\dagger$, $\text{tr} \rho^n = 1$ и $\text{tr} \rho^n \hat{\sigma}_k = 0$. Для квантовых вычислений важно, чтобы все коэффициенты в состоянии (5) действительны и каждое из них, кроме $a_{0 \dots 0}$, является в точности ± 1 (результатом) локального измерения с одним из базисных операторов (3), $a_k \equiv a_{k_1 \dots k_n} = \text{tr} \rho^n \hat{\sigma}_{k_1 \dots k_n}$. Все квантовые (чистые и смешанные) состояния составляют выпуклое множество (замкнутое многообразие, поскольку оно является прообразом 1 при отображении $\text{tr} : \mathcal{H}(\mathcal{H}_n) \rightarrow \mathbb{R}$) реального измерения $4^n - 1$ в вещественном линейном многообразии \mathcal{H}_n . Охватывая $\{\mathcal{H}(\mathcal{H}_n)\}^n = \mathcal{H}(\mathcal{H}_n)$, а чистые состояния располагаются на границе \mathcal{H}_n и составляют вещественное подмногообразие размерности $2^{n+1} - 2$.

Каждый элемент $\mathcal{H}(\mathcal{H}_n)$ является идемпотентным ($\hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_k = \hat{\sigma}_k$), так что операторы

$$P_k = \frac{\hat{\sigma}_k + \hat{I}}{2}$$

это проекторы. Таким образом, наблюдаемая $\hat{\sigma}_k = P_k - P_k^\perp$ естественным образом сводится к проективным измерениям. Использование операторов P_k теперь мы можем доказать следующее практически важное положение, которое, по-видимому, не рассматривалось, по крайней мере, в современной литературе.

Предложение 1. Состояние $|a_{k_1 \dots k_n}| \leq 1$ в (6) следует из положительной определенности оператора плотности (5) и первое условие в (6).

Обратите внимание, что эрмитовы проекторы $P_k = P_k^\dagger$ и $P_k^\perp = P_k - P_k$ — положительные операторы из-за очевидных неравенств

$$\langle u | P_k | u \rangle = \langle u | P_k^\perp | u \rangle \geq 0.$$

В общем случае эрмитов оператор $\hat{A} \in \mathcal{H}(\mathcal{H}_n)$ положителен тогда и только тогда, когда существует некоторый оператор $\hat{B} \in \mathcal{H}(\mathcal{H}_n)$ такой, что $\hat{A} = \hat{B} \hat{B}^\dagger$; более того, \hat{B} можно выбрать эрмитовым [15]. Это, в свою очередь, означает, что $(\hat{A} | \rho^n)$ — положительные

$$\text{tr} \hat{A} \rho^n = \text{tr} \hat{B} \hat{B}^\dagger \rho^n = \text{tr} \hat{B}^\dagger \rho^n \hat{B} \geq 0,$$

¹Для нашей цели в этой статье нам не нужно различать положительно полуопределенные и положительно определенные операторы.

сВ;рВявно положительный. Таким образом,

$$\text{tr} \left(\frac{1 \pm a}{2} \right) > 0, \quad (7)$$

так что $-16 \leq 1$. Доказательство завершено. -

В качестве примера запишем одно из практически полезных состояний в стандартном базисе и в базисе Паули, а именно трехкубитное состояние Гринбергера-Хорна-Цайлингера состояние. Использование оператора CNOT и оператор Адамара \hat{U}_2 , которые определены по отношениям (13) и (14) в приложении А2 можно записать унитарное преобразование начального состояния $|000\rangle$ до ГГцсостояние в форме

$$\hat{U}_{\text{ГГц}} = (\hat{\sigma}_0 \otimes \text{CNOT} \circ \text{CNOT} \otimes \hat{\sigma}_0) (\hat{U}_2 \otimes \hat{\sigma}_0),$$

из которого легко найти

$$\hat{\rho}_{\text{ГГц}} = \frac{1}{2} (|000\rangle \langle 000| + |000\rangle \langle 111| + |111\rangle \langle 000| + |111\rangle \langle 111|) = \frac{1}{8} (\hat{\sigma}_{000} + \hat{\sigma}_{111} - \hat{\sigma}_{122} - \hat{\sigma}_{212} - \hat{\sigma}_{221} + \hat{\sigma}_{033} + \hat{\sigma}_{303} + \hat{\sigma}_{330}).$$

4. Операции со струнами Паули

Нам понадобится несколько фактов и определений, связанных с базисом Паули и множеством n струны Паули длины,

$$\text{ул.}_n = \{K = k_1 \dots k_n \mid k_1, \dots, k_n \in \{0, 1, 2, 3\}\}.$$

Сначала рассмотрим множество $\Phi_4 = \{0, 1, 2, 3\}$ как четырехгруппа Клейна с правилами умножения

$$0 * k = k, \quad k * k = 0, \quad k * l = m,$$

где $k, l, m \in \{1, 2, 3\}$ и klm есть любая перестановка числа 123. Во-вторых, пусть функция $s: \Phi_4 \times \Phi_4 \rightarrow \{1, -1, i, -i\}$ определяться его значениями

$$c(0, 0) = c(0, k) = c(k, 0) = c(k, k) = 1, \quad k = 1, 2, 3,$$

$$c(1, 2) = c(2, 3) = c(3, 1) = c(2, 1) = c(3, 2) = c(1, 3) = -1.$$

Далее, пусть функция $S: \text{ул.}_n \times \text{ул.}_n \rightarrow \{1, -1, i, -i\}$, $(K, L) \mapsto S_{KL}$, определяется как произведение

$$S_{KL} = c(k_1, l_1) c(k_2, l_2) \dots c(k_n, l_n), \quad K = k_1 k_2 \dots k_n, \quad L = l_1 l_2 \dots l_n.$$

Функция S симметричен или антисимметричен в зависимости от количества пар (k_r, l_r) (r это позиция в строках K и L) такой, что $k_r, l_r \in \{1, 2, 3\}$ и $k_r l_r = i$, а также в зависимости от относительного порядка в них. Позволять $KLJ = -KJL$ и $KLJ = KJL$ быть

количество пар форм (1,2),(2,3),(3,1) и форм (2,1),(3,2),(1,3) соответственно, и пусть $\hat{J}_{KL} = \hat{J}_{KL}^\dagger + \hat{J}_{-KL}$. Затем

$$C_{KL} = (-1)^{j_{KL}} \frac{C_{KL}}{2} (1 + (-1)^{j_{KL}}), \quad C_{[KL]} = \frac{C_{KL}}{2} (1 - (-1)^{j_{KL}}), \quad (8)$$

где круглые и квадратные скобки обозначают симметризацию и антисимметризацию соответственно. значения C_{KL} , $C_{(KL)}$, и $C_{[KL]}$ приведены в таблице 2.

$j_{KL} \bmod 4$	0	2	0	2	1	3	1	3
$j_{KL} \bmod 2$	0	1	1	0	0	1	1	0
C_{KL}	1	1	-1	-1	γ	γ	$-\gamma$	$-\gamma$
$C_{(KL)}$	1	1	-1	-1	0	0	0	0
$C_{[KL]}$	0	0	0	0	γ	γ	$-\gamma$	$-\gamma$

Таблица 1: Факторы до \hat{M} в (9) для $\hat{\sigma}_K \hat{\sigma}_L, \{\hat{\sigma}_K, \hat{\sigma}_L\}$, и $[i\hat{\sigma}_K, i\hat{\sigma}_L]$.

Теперь композицию двух базисных элементов Паули и их антикоммутатора и коммутатора можно записать в виде компактных выражений, удобных для классического компьютерного программирования:

$$\hat{\sigma}_K \hat{\sigma}_L = C_{KL} \hat{M}, \quad \{\hat{\sigma}_K, \hat{\sigma}_L\} = C_{(KL)} \hat{M}, \quad [i\hat{\sigma}_K, i\hat{\sigma}_L] = -C_{[KL]} \hat{M}, \quad (9)$$

где

$$\hat{M} = \hat{\sigma}_{M_1 \dots M_N}, \quad M_1 = K_1 * L_1, \dots, M_N = K_N * L_N. \quad (10)$$

Обратите внимание, что две строки Паули длины n могут коммутировать, даже если они имеют разные ненулевые записи в одних и тех же местах. Например, три оператора $\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_{22}$, и $\hat{\sigma}_{33}$ взаимно коммутировать. Также легко видеть, что унитарная матрица перехода, преобразующая стандартный базис $|j_1 \dots j_n\rangle$ в базис Паули, состоит только из элементов $0, \pm 1$ и $\pm \gamma$. В частности,

$$|00 \dots 0\rangle \langle 00 \dots 0| \rightarrow \frac{1}{2^n} \sum_{j_1, \dots, j_n \in \{0,3\}} \hat{\sigma}_{j_1 \dots j_n}.$$

В более общем виде стандартные ортогональные проекторы могут быть выражены как

$$|j_1 \dots j_n\rangle \langle j_1 \dots j_n|_{j_1, \dots, j_n \in \{0,1\}} = \frac{1}{2^n} \sum_{K_1, \dots, K_n \in \{0,3\}} \chi_{K_1}^{j_1} \dots \chi_{K_n}^{j_n} \hat{\sigma}_{K_1 \dots K_n},$$

где

$$\chi_0 = \chi_3 = \chi_0^1 = 1, \quad \chi_2 = -1.$$

Некоторые важные операторы базиса Паули описаны в Приложении A2 на стр. 14.

Выражения (9) показать, во-первых, что множество $\{\hat{\sigma}_i\}_{i=1}^4$ составляет ортонормированный основа $\text{всу}(n)$. И, во-вторых, набор

$$P(\text{ЧАС}_n) = \{ \epsilon \hat{\sigma}_k / \text{Кеул.}_n, \epsilon \in \{\pm 1, \pm i\}, \}$$

который состоит из 4^{n+1} элементов, это группа; это называется $(n+1)$ -кубит группа Паули. нормализатор группы Паули,

$$C(\text{ЧАС}_n) = \{ \hat{U} \in U(\text{ЧАС}_n) \mid \hat{U} \hat{\sigma}_k \hat{U}^\dagger \in P(\text{ЧАС}_n), \hat{\sigma}_k \in P(\text{ЧАС}_n), \}$$

называется группой Клиффорда. У нас есть от 2, 4, и 10 следующее предложение:

Предложение 2. Взаимные унитарные преобразования базисных операторов Паули подчиняются соотношениям $\hat{\sigma}_{j_1} \dots \hat{\sigma}_{j_n} \hat{\sigma}_{k_1} \dots \hat{\sigma}_{k_n} \hat{\sigma}_{j_1} \dots \hat{\sigma}_{j_n} = \pm \hat{\sigma}_{j_1} \dots \hat{\sigma}_{j_n}$, где знак плюс стоит тогда и только тогда, когда количество троек $(j_m k_m j_m)_{m \in \{1, \dots, n\}}$, удовлетворяющие условиям $j_m k_m j_m = 0$, $j_m k_m = 0$, $j_m k_m = 0$, даже.

5. Алгоритмы перехода к базису Паули

В стандартном базисе и в базисе Паули можно выразить оператор $\hat{A} \in U(\text{ЧАС}_n)$ (например, унитарное преобразование, наблюдаемая или оператор плотности) как

$$\hat{A} = \sum_{j_0, \dots, j_{n-1}, j_0, \dots, j_{n-1} \in \{0, 1\}} a_{j_{n-1} \dots j_0} |j_{n-1} \dots j_0\rangle \langle j_{n-1} \dots j_0|$$

$$= \frac{1}{2^n} \sum_{j_0, \dots, j_{n-1} \in \{0, 1, 2, 3\}} C_{j_{n-1} \dots j_0} \hat{\sigma}_{j_{n-1} \dots j_0},$$

или, короче,

$$\hat{A} = \sum_{j=0}^{2^n-1} a_{ij} |j\rangle \langle j| = \frac{1}{2^n} \sum_{j=0}^{2^n-1} C_{j_0 \dots j_{n-1}} \hat{\sigma}_{j_0 \dots j_{n-1}}. \quad (11)$$

Таким образом, мы имеем дело с задачей вычисления коэффициентов $C_{j_0 \dots j_{n-1}}$ когда коэффициенты a_{ij} даны; такой алгоритм недавно был предложен [13]. Наш подход основан на следующем наблюдении: все коэффициенты a_{ij} с двоичными строками $j = j_{n-1} \dots j_0$ и $j' = j'_{n-1} \dots j'_0$, которые имеют одинаковую сумму

$$K = (j_{n-1} \dots j_0)_2 = (j'_{n-1} \dots j'_0)_2 \oplus (j_{n-1} \dots j_0)_2,$$

дают ненулевые вклады только в члены вида $C_{(j \oplus j')} \hat{\sigma}_j$, где j — двоичная строка $j_{n-1} \dots j_0$, $0 \leq j \leq 2^n - 1$, а операторы $\hat{\sigma}_j$ необходимо пересчитать к форме (11). Несложно (но громоздко) доказать, что строки $j = j_{n-1} \dots j_0$, $l = l_{n-1} \dots l_0$, $k = k_{n-1} \dots k_0$ определяются

$$j = l \oplus k + 2l \oplus k + 3l \oplus k, \quad (12)$$

где черта над буквой обозначает инверсию $0 \leftrightarrow 1$ для каждой цифры соответствующей двоичной строки и обозначает логическую операцию ИЛИ. С правой стороны в (12), мы рассматриваем полученные двоичные строки как числа с основанием 4. Для заданных двоичных строк $\mathbf{Дж}$, псевдокод этой процедуры написан на алгоритме 1.

Например, слагаемые

$$a_{010,001}/010 \rangle \langle 001 / " = " \frac{a_{21}}{2^3} (\hat{\sigma}_{011} + i \hat{\sigma}_{012} - i \hat{\sigma}_{021} + \hat{\sigma}_{022} + \hat{\sigma}_{311} + i \hat{\sigma}_{312} - i \hat{\sigma}_{321} + \hat{\sigma}_{322}, \quad)$$

$$a_{001,010}/001 \rangle \langle 010 / " = " \frac{a_{12}}{2^3} (\hat{\sigma}_{011} - i \hat{\sigma}_{012} + i \hat{\sigma}_{021} + \hat{\sigma}_{022} + \hat{\sigma}_{311} - i \hat{\sigma}_{312} + i \hat{\sigma}_{321} + \hat{\sigma}_{322}, \quad)$$

$$a_{101,110}/101 \rangle \langle 110 / " = " \frac{a_{56}}{2^3} (\hat{\sigma}_{011} - i \hat{\sigma}_{012} + i \hat{\sigma}_{021} + \hat{\sigma}_{022} - \hat{\sigma}_{311} + i \hat{\sigma}_{312} - i \hat{\sigma}_{321} - \hat{\sigma}_{322}, \quad)$$

$$a_{111,100}/111 \rangle \langle 100 / " = " \frac{a_{74}}{2^3} (\hat{\sigma}_{011} - i \hat{\sigma}_{012} - i \hat{\sigma}_{021} - \hat{\sigma}_{022} - \hat{\sigma}_{311} + i \hat{\sigma}_{312} + i \hat{\sigma}_{321} + \hat{\sigma}_{322} \quad)$$

будет способствовать линейной комбинации $\hat{\sigma}_{011}$, $\hat{\sigma}_{012}$, $\hat{\sigma}_{021}$, $\hat{\sigma}_{022}$, $\hat{\sigma}_{311}$, $\hat{\sigma}_{312}$, $\hat{\sigma}_{321}$, и $\hat{\sigma}_{322}$

$$\kappa = "010 \oplus 001 = 001 \oplus 010 = 101 \oplus 110 = 111 \oplus 100 = 011.$$

Элементы базиса Паули, возникающие в (12) из этих слагаемых показаны в табл. 2. Например, если $\mathbf{л} = "5 = (101)_2$, то в соответствии с (12),

$$\mathbf{я}_{(3)}[5] = \begin{bmatrix} 010 \end{bmatrix}_2 \mathbf{л} (011)_2 + 2 \begin{bmatrix} 101 \end{bmatrix}_2 \mathbf{л} (011) = \begin{bmatrix} 2 \\ 010 \end{bmatrix}_4 + 2 \begin{bmatrix} 1 \\ 001 \end{bmatrix}_4 = \begin{bmatrix} 2 \\ 010 \end{bmatrix}_4 + \begin{bmatrix} 2 \\ 001 \end{bmatrix}_4 = 312.$$

Далее, например, слагаемое $a_{101,110}/101 \rangle \langle 110 / " = " a_{56}/5 \rangle \langle 6 /$ способствует $\mathbf{я}_{56}/2^3$ в $\mathbf{C}_{(3)}[5]$, так как существуют тройки $(\mathbf{л}_0 \mathbf{я}_0 \mathbf{Дж}_0) = (110)_2$, $(\mathbf{л}_1 \mathbf{я}_1 \mathbf{Дж}_1) = (001)_2$, и $(\mathbf{л}_2 \mathbf{я}_2 \mathbf{Дж}_2) = (111)_2$ в алгоритме 1 (строки 17 – 26); поэтому, $\mathbf{знак} = "1, \mathbf{с} = "1$.

$\mathbf{л}$	0	1	2	3	4	5	6	7
$\mathbf{л}_2 \mathbf{л}_1 \mathbf{л}_0$	000	001	010	011	100	101	110	111
$\mathbf{к}_2 \mathbf{к}_1 \mathbf{к}_0$	011	011	011	011	011	011	011	011
$\mathbf{л} \mathbf{л} \mathbf{к}$	011	010	001	000	011	010	001	000
$\mathbf{л} \mathbf{л} \mathbf{к}$	000	001	010	011	000	001	010	011
$\mathbf{л} \mathbf{л} \mathbf{к}$	000	000	000	000	100	100	100	100
$\hat{\sigma}_{\mathbf{я}}$	$\hat{\sigma}_{011}$	$\hat{\sigma}_{012}$	$\hat{\sigma}_{021}$	$\hat{\sigma}_{022}$	$\hat{\sigma}_{311}$	$\hat{\sigma}_{312}$	$\hat{\sigma}_{321}$	$\hat{\sigma}_{322}$

Таблица 2: Элементы базиса Паули, возникающие для $\kappa = "011$.

 Алгоритм 1 Преобразование к базису Паули.

```

1: Вход количество кубитов  $n$ 
2: Вход строны  $я = "я_{n-1} \dots я_0 и Дж" = "Дж_{n-1} \dots Дж_0, я_c, Дж_c \in \{0, 1\}$ 
3: Вход комплексное число  $a_{ij}$  — фактор в  $a_{ij} | я \rangle \langle j |$ 
4: // Составьте номер строки  $k = "я \oplus Дж$ 
5: Инициализировать  $к$  = "нулевой"
6: для  $я_c = "я_0, \dots, я_{n-1}$  делать
7:   для  $Дж_c = "Дж_0, \dots, Дж_{n-1}$  делать
8:      $к_c = "я_c \oplus Дж_c$ 
9:   конец для
10:  конец для
11: // Для номера  $к$ , фил в два ряда
12: Инициализировать  $C_{(к)}$  на ноль  $2_n$ -длинный вектор комплексного типа данных
13: Инициализировать  $я_{(к)}$  нулем  $2_n$ -длинный вектор типа строковых данных
14: Инициализировать  $инт центр$   $знак \in \{1, -1, я, -я\}$  по произвольным значениям
15: для  $л = "0 к 2_n - 1$  делать
16:   Конвертировать  $(л)_{10}$  в  $(л_{n-1} \dots л_0)_2$ 
17:    $центр = "0$   $изнак = "1$  для
18:    $л_c = "л_0, \dots, л_{n-1}$  делать
19:     если  $л_c = 1$  затем
20:       если  $(я_c, Дж_c) == (1, 1)$  затем  $знак = "-знак$  если  $(я_c,$ 
21:        $Дж_c) == (0, 1)$  затем  $центр = "центр + 1$  если  $(я_c, Дж_c)$ 
22:        $== (1, 0)$  затем  $знак = "-знак$ , конец, если  $центр = "центр + 1$ 
23:
24:   конец для
25:    $я_{(к)}[л] = "л_{л_к} + 2 л_{л_{к-1}} + 3 л_{л_{к-2}} + \dots + 2^{л_0} л_0$ 
26:    $инт с = "центр \pmod{4}, C_{(к)}[л] += я_c \cdot знак \cdot a_{ij}$ 
27:  конец для
28: Возвращать  $я_{(к)}$  и  $C_{(к)}$ .

```

6. Заключение

В этой статье мы описали базовую технику работы с базисом Паули. Показано, что этот прием может сделать более удобными и алгоритмичными некоторые манипуляции с математическими выражениями, относящимися к квантовым схемам с большим числом кубитов. Представлен новый эффективный алгоритм полиномиальной сложности перехода от стандартного базиса к базису Паули.

р.ССЫЛКИ

- [1] Б. Дирксе, М. Помпили, Р. Хэнсон, М. Уолтер, С. Венер *Свидетельство запутанности в экспериментах с произвольным шумом* Квантовая наука и технологии 5,035007, 2020 ([arxiv:1909.09119](https://arxiv.org/abs/1909.09119))
- [2] И. Хамамура и Т. Имамичи. *Эффективная оценка квантовых наблюдаемых с использованием запутанных измерений* прj Квантовая информация 6,56, 2020 ([arxiv:1909.09119](https://arxiv.org/abs/1909.09119))
- [3] О. Кроуфорд, Б. ван Страатен, Д. Ван, Т. Паркс, Э. Кэмпбелл, С. Брайерли *Эффективное квантовое измерение операторов Паули при наличии конечной ошибки дискретизации* квант 5,385–404, 2021 г. ([архив: 1908.06942](https://arxiv.org/abs/1908.06942))
- [4] В. Клобус и др. *Запутанность более высокого измерения без корреляций*. Евро. физ. Дж. Д. 73,29, 2019 ([архив: 1808.10201](https://arxiv.org/abs/1808.10201))
- [5] Т. Дж. О'Коннор, Ю. Ю., Б. Хелоу, Р. Лафламм. *Надежность дистилляции магического состояния от ошибок в воротах Клиффорда* Квантовая информация и вычисления 13,361–378, 2013 г. ([архив: 1205.6715](https://arxiv.org/abs/1205.6715))
- [6] К. А. Риоффио, Д. Гросс, С. Т. Фламмиа, Т. Монц, Д. Нигг, Р. Блатт, Дж. Эйсерт. *Экспериментальное квантово-сжатое зондирование для семикубитной системы* Связь с природой 8,15305, 2017 ([архив: 1608.02263](https://arxiv.org/abs/1608.02263))
- [7] С.С. Джахроми, Р. Орус. *Универсальный тензорный сетевой алгоритм для любой бесконечной решетки* физ. Преподобный Д 99,195105, 2019 ([архив: 1808.00680](https://arxiv.org/abs/1808.00680))
- [8] А.Н. Цирулев. *Геометрический взгляд на квантовые тензорные сети* европ. физ. J. Сеть конференций 226, № 4, 2020 г. (<https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602022>)
- [9] И.М. Поташов, А.Н. Цирулев. *Вычислительный алгоритм для разложения ковариантных рядов в общей теории относительности* европ. физ. J. Сеть конференций 173, 03021, 2018 (<https://doi.org/10.1051/epjconf/201817303021>)
- [10] С. Бравый, А. Китаев. *Универсальное квантовое вычисление с идеальными вентилями Клиффорда и шумными помощниками* физ. Преп. А 71,022316, 2005 ([arXiv: квант-ph/0403025](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0403025))
- [11] В. Данос и Э. Кашефи. *Детерминизм в односторонней модели* физ. Преподобный А. 74,052310, 2006 ([arXiv: квант-ph/0506062](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0506062))
- [12] В. Данос и Э. Кашефи. *Измерения Паули универсальны* Электронные заметки по теоретической информатике 170,95–100, 2007 г. (<https://doi.org/10.1016/j.entcs.2006.12.013>)

- [13] Д. Ганлике, М. С. Паленик и С. А. Фишер. *Эффективный алгоритм генерации координат Паули для произвольного линейного оператора* 2020 ([архив: 2011.08942](#))
- [14] С. Бравый, Д. Маслов. *Схемы без Адамара раскрывают структуру группы Клиффорда*. 2020 ([архив: 2003.09412](#))
- [15] И. Бенгтссон, К. Жычковский. *Геометрия квантовых состояний: введение в квантовую запутанность*. Издательство Кембриджского университета, Кембридж, 2 006
- [16] Шенде В.В., Марков И.Л., Буллок С.С. *Минимальные универсальные двухкубитные схемы на основе управляемого НЕ* физ. Преподобный А, 69, 062321, 2004 ([arXiv: квант-ph/0308033](#))

Приложение

А1. Базис Паули для $n=2$

Для справки приведем здесь выражения элементов стандартного базиса в \mathcal{H}_2 в терминах элементов базиса Паули. Напомним, что такие выражения в \mathcal{H}_2 имеют форма

$$|0\rangle \langle 0| = \frac{\hat{\sigma}_0 + \hat{\sigma}_3}{2}, \quad |0\rangle \langle 1| = \frac{\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2}{2}, \quad |0\rangle \langle 0| = \frac{\hat{\sigma}_0 - \hat{\sigma}_3}{2}, \quad |1\rangle \langle 1| = \frac{\hat{\sigma}_0 - \hat{\sigma}_3}{2}.$$

$$\begin{aligned} |00\rangle \langle 00| &= \frac{\hat{\sigma}_0 + \hat{\sigma}_3 + \hat{\sigma}_0 + \hat{\sigma}_3}{4}, & |01\rangle \langle 00| &= \frac{\hat{\sigma}_1 - i\hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_3 - \hat{\sigma}_3}{4}, \\ |10\rangle \langle 00| &= \frac{\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2 - \hat{\sigma}_0 - \hat{\sigma}_3}{4}, & |11\rangle \langle 00| &= \frac{\hat{\sigma}_1 - i\hat{\sigma}_2 - \hat{\sigma}_0 - \hat{\sigma}_3}{4}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |00\rangle \langle 01| &= \frac{\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_3 + \hat{\sigma}_3}{4}, & |01\rangle \langle 01| &= \frac{\hat{\sigma}_0 - \hat{\sigma}_3 + \hat{\sigma}_0 - \hat{\sigma}_3}{4}, \\ |10\rangle \langle 01| &= \frac{\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2 - \hat{\sigma}_0 + \hat{\sigma}_3}{4}, & |11\rangle \langle 01| &= \frac{\hat{\sigma}_1 - i\hat{\sigma}_2 - \hat{\sigma}_0 + \hat{\sigma}_3}{4}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |00\rangle \langle 10| &= \frac{\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_3 + i\hat{\sigma}_2 + i\hat{\sigma}_2}{4}, & |01\rangle \langle 10| &= \frac{\hat{\sigma}_1 - i\hat{\sigma}_2 + i\hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_2}{4}, \\ |10\rangle \langle 10| &= \frac{\hat{\sigma}_0 + \hat{\sigma}_3 - \hat{\sigma}_0 - \hat{\sigma}_3}{4}, & |11\rangle \langle 10| &= \frac{\hat{\sigma}_1 - i\hat{\sigma}_2 - \hat{\sigma}_3 + i\hat{\sigma}_3}{4}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|00\rangle \langle 11| &= \frac{\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2 + i\hat{\sigma}_3 - \hat{\sigma}_4}{4}, & |01\rangle \langle 11| &= \frac{\hat{\sigma}_1 - \hat{\sigma}_3 + i\hat{\sigma}_2 - i\hat{\sigma}_4}{4}, \\
|10\rangle \langle 11| &= \frac{\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2 - \hat{\sigma}_3 - i\hat{\sigma}_4}{4}, & |11\rangle \langle 11| &= \frac{\hat{\sigma}_0 - \hat{\sigma}_3 - \hat{\sigma}_4 + \hat{\sigma}_5}{4}.
\end{aligned}$$

A2. Некоторые унитарные операторы в базисе Паули

Оператор контролируемого НЕ:

$$CNOT = \frac{\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_3 - \hat{\sigma}_4}{2} |00\rangle \langle 00| + |01\rangle \langle 01| + |10\rangle \langle 10| + |11\rangle \langle 11|, \quad (13)$$

Оператор управляемой фазы:

$$C_{\text{фазы}} = \frac{\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_3 - \hat{\sigma}_4}{2} |00\rangle \langle 00| + |01\rangle \langle 01| + |10\rangle \langle 10| + |11\rangle \langle 11|.$$

Хорошо известно, что $CNOT$ и $C_{\text{фазы}}$ принадлежат к группе Клиффорда \mathcal{C}_2 . Известны также некоторые наборы образующих и канонические формы для операторов группы \mathcal{C}_n (см., например, [14]), но количество элементов в этих группах растет экспоненциально (на самом деле чуть быстрее) с ростом n : например, \mathcal{C}_1 имеет порядок 24, и \mathcal{C}_2 имеет порядок 11520. Поэтому возникает проблема нахождения практически подходящего [16] набор унитарных операторов для построения групп Клиффорда и соответствующий формализм стабилизатора. Здесь мы вводим однокубитный

Оператор Адамара \hat{U}_2 и псевдоадмаровы операторы $\hat{U}_{-2}, \hat{U}_{\pm 1}$ и $\hat{U}_{\pm 3}$, повинующиеся отношения $\hat{U}_{\pm 1}^2 = \hat{U}_{\pm 2}^2 = \hat{U}_{\pm 3}^2 = \hat{\sigma}_0$. Они унитарны и эрмитовы, и определяются

$$\begin{aligned}
\hat{U}_1 &= \frac{\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_3}{2} = \frac{1}{2} (|0\rangle \langle 0| + |0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1|), \\
\hat{U}_2 &= \frac{\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_3}{2} = \frac{1}{2} (|0\rangle \langle 0| + |0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|), \\
\hat{U}_3 &= \frac{\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_3}{2} = \frac{1}{2} (|0\rangle \langle 0| + |0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|).
\end{aligned} \quad (14)$$

Их можно использовать для построения унитарных преобразований $\hat{\sigma}_j \leftrightarrow \pm \hat{\sigma}_{\text{Дж}}$ ($\text{Дж} = \text{Дж}$) и $\hat{\sigma}_j \leftrightarrow -\hat{\sigma}_j$ ($j = 1, 2, 3$):

$$\hat{U}_k \hat{\sigma}_j \hat{U}_k^\dagger = \pm \hat{\sigma}_{\text{Дж}}, \quad \hat{U}_k \hat{\sigma}_k \hat{U}_k^\dagger = -\hat{\sigma}_k, \quad \text{Дж} = \text{Дж}, \text{Дж}, \text{Дж}, k \in \{1, 2, 3\},$$

или, более подробно,

$$\begin{aligned}\hat{U}_\pm \hat{\sigma}_1 \hat{U}_\pm^\pm &= \pm \hat{\sigma}_3, & \hat{U}_\pm^\pm \hat{\sigma}_3 \hat{U}_\pm^\pm &= \pm \hat{\sigma}_2, & \hat{U}_\pm \hat{\sigma}_1 \hat{U}_\pm^\pm &= -\hat{\sigma}_1, \\ \hat{U}_\pm \hat{\sigma}_1 \hat{U}_\pm^\pm &= \pm \hat{\sigma}_3, & \hat{U}_2 \hat{\sigma}_3 \hat{U}_2^\pm &= \pm \hat{\sigma}_1, & \hat{U}_2^\pm \hat{\sigma}_2 \hat{U}_2^\pm &= -\hat{\sigma}_2, \\ \hat{U}_\pm \hat{\sigma}_1 \hat{U}_\pm^\pm &= \pm \hat{\sigma}_2, & \hat{U}_\pm \hat{\sigma}_2 \hat{U}_\pm^\pm &= \pm \hat{\sigma}_1, & \hat{U}_\pm \hat{\sigma}_3 \hat{U}_\pm^\pm &= -\hat{\sigma}_3.\end{aligned}$$

Далее для единообразия обозначим \hat{U}_0 . Так, например, мы можем выбрать полный набор генераторов для $\mathcal{C}(\mathcal{H}_1)$ в виде $(\hat{U}_\pm, \hat{U}_2, \hat{U}_3)$ в виде $(\hat{U}_\pm, \hat{U}_2, \hat{U}_3)$

$$\{\hat{U}_0, \hat{U}_1, \hat{U}_2, \hat{U}_3\}.$$

В общем случае $\mathcal{C}(\mathcal{H}_N)$, полный набор генераторов для группы $\mathcal{C}(\mathcal{H}_N)$ составляют операторы вида

$$\{\hat{U}_{j_1 \dots j_N} = \hat{U}_{j_1} \otimes \dots \otimes \hat{U}_{j_N}, j_1, \dots, j_N \in \{0, 1, 2, 3\}\}.$$