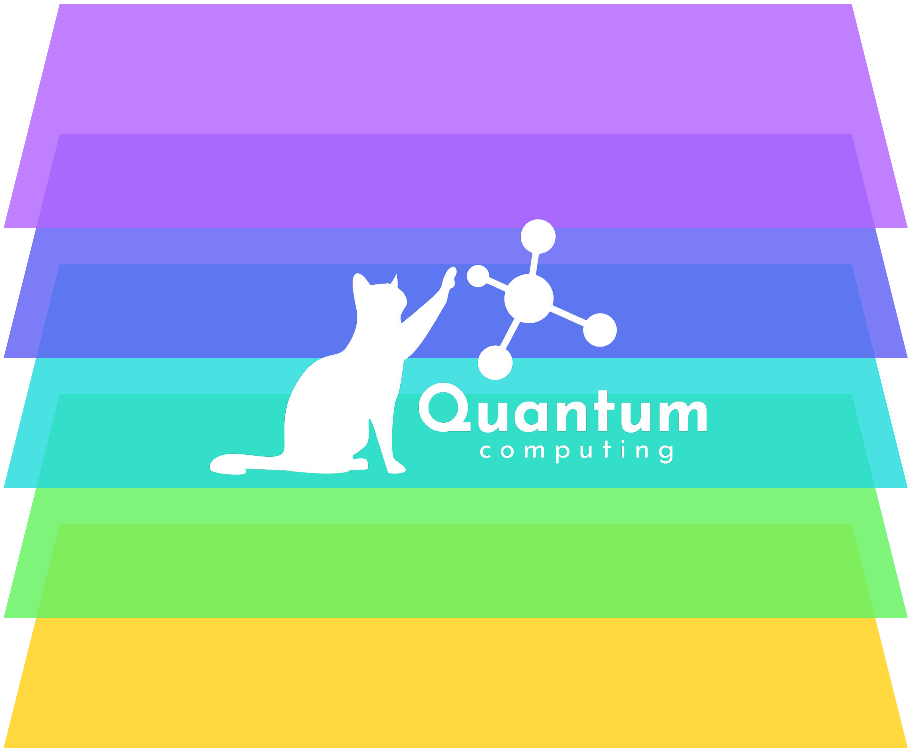
Course II: Quantum Computing: From qubits to qudits

Lesson #4 Matrices Unitarias y Matrices Hermíticas

Prof. Alcides Montoya Cañola, Ph.D
Departamento de Física
Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín

Matrices unitarias



$$U \in \mathbb{C}^{n \times n}$$

A matrix U is unitary if U times U conjugate transpose is equal to identity (matrix I).

$$U . U^{\dagger} = U^{\dagger} . U = \mathbb{1}$$

U conjugate transpose is acting like inverse matrix.

$$U^{\dagger} = \left(U^{*}\right)^{\mathrm{T}} = U^{*\mathrm{T}}$$

$$U^{\dagger} = U^{-}$$

https://youtu.be/JUV20_LodAQ?si=0SdZYJKmotXk7iKf

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

https://youtu.be/JUV20_LodAQ?si=0SdZYJKmotXk7iKf

https://youtu.be/Hg7hcttgCNo?si=X_Pa7cj7JCK2wmfC

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},\ H^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$H.\,H^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{1}{2} & \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} & \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{"}\textit{An Identity Matrix } (\mathbb{1})\text{"}$$

$$U = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} i & -2i \\ -2i & -i \end{pmatrix}, \; U^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} -i & 2i \\ 2i & i \end{pmatrix}$$

$$U.\,U^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} i & -2i \\ -2i & -i \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} -i & 2i \\ 2i & i \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{5} + \frac{4}{5} & -\frac{2}{5} + \frac{2}{5} \\ -\frac{2}{5} + \frac{2}{5} & \frac{4}{5} + \frac{1}{5} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{"}\mathit{An\ Identity\ Matrix}\ (\mathbb{1})\text{"}$$

Matrices hermíticas

Una **matriz hermítica** es una matriz cuadrada compleja que es igual a su propia conjugada transpuesta. En otras palabras, una matriz A es hermítica si cumple la siguiente condición:

$$A = A^\dagger$$

donde $A^\dagger$ es la conjugada transpuesta de A. Esto significa que para cualquier matriz A con elementos A_{ij}, los elementos deben cumplir:

$$A_{ij} = \overline{A_{ji}}$$

donde $\overline{A_{ji}}$ denota el complejo conjugado del elemento en la posición (j, i).

Propiedades de una Matriz Hermítica:

1. **Elementos Diagonales Reales:**

   Los elementos en la diagonal principal de una matriz hermítica son siempre números reales. Esto se debe a que, para los elementos diagonales, $A_{ii} = \overline{A_{ii}}$, lo que solo es posible si A_{ii} es real.

2. **Valores Propios Reales:**

   Las matrices hermíticas tienen la propiedad importante de que todos sus valores propios (autovalores) son números reales. Esta propiedad es fundamental en mecánica cuántica, donde los operadores hermíticos representan observables físicas y los valores propios corresponden a los posibles resultados de mediciones, que deben ser reales.

3. **Vectores Propios Ortogonales:**

   Los vectores propios correspondientes a diferentes valores propios de una matriz hermítica son ortogonales entre sí. Esto significa que si v_1 y v_2 son vectores propios correspondientes a los valores propios λ_1 y λ_2, entonces:

$$\langle v_1 | v_2 \rangle = 0 \quad \text{si} \quad \lambda_1 \neq \lambda_2$$

Ejemplo de una Matriz Hermítica:

Considera la siguiente matriz A:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1+i & 0 \\ 1-i & 3 & 4i \\ 0 & -4i & 1 \end{pmatrix}$$

Podemos verificar que es hermítica calculando su conjugada transpuesta $A^\dagger$:

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} 2 & 1-i & 0 \\ 1+i & 3 & -4i \\ 0 & 4i & 1 \end{pmatrix}$$

Observamos que $A = A^\dagger$, lo que confirma que A es una matriz hermítica.

1. Realidad de los Valores Propios

En la mecánica cuántica, una observable es una cantidad física que puede medirse, como la energía, el momento, la posición, etc. Cuando realizas una medición de una observable en un sistema cuántico, el resultado debe ser un número real, ya que las cantidades físicas medibles son reales.

Los valores propios de una matriz hermítica son siempre reales, lo que asegura que las mediciones de una observable descrita por una matriz hermítica darán resultados reales. Esto es crucial, ya que cualquier matriz que describa una observable debe tener esta propiedad.

2. Ortogonalidad de los Vectores Propios

Los vectores propios de una matriz hermítica correspondiente a distintos valores propios son ortogonales. En mecánica cuántica, los vectores propios de un operador que describe una observable representan los estados cuánticos en los que la observable tiene un valor definido (es decir, un valor propio). La ortogonalidad garantiza que estos estados son distinguibles y que el espacio de estados cuánticos puede descomponerse en una base de vectores propios ortogonales, lo cual es fundamental para la consistencia del formalismo cuántico.

3. Evolución Unitaria y Conservación de Probabilidades

La evolución de un sistema cuántico, regida por la ecuación de Schrödinger, es unitaria y preserva la norma del estado cuántico. Los operadores que generan esta evolución, como el Hamiltoniano que describe la energía total del sistema, deben ser hermíticos para asegurar que la evolución sea físicamente consistente y que las probabilidades se conserven.

Ejemplos de Observables Hermíticos

1. Energía (Hamiltoniano):

El Hamiltoniano $\hat{H}$ es el operador que describe la energía total de un sistema cuántico. En mecánica cuántica, el Hamiltoniano es un operador hermítico. Su función es crucial para determinar la evolución temporal del sistema mediante la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

Ejemplo:

Considera un oscilador armónico cuántico con un Hamiltoniano dado por:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

Donde:

- $\hat{p}$ es el operador de momento (que también es hermítico).
- $\hat{x}$ es el operador de posición (hermítico).

Los valores propios de $\hat{H}$ son los niveles de energía del oscilador, y estos valores son reales, reflejando las posibles energías que se pueden medir.

2. Momento:

El operador de momento $\hat{p}$ en la representación de coordenadas tiene la forma:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

Este operador es hermítico, lo que asegura que las mediciones de momento den valores reales.

Ejemplo:

En un espacio unidimensional, el operador de momento actúa sobre una función de onda $\psi(x)$ como:

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi(x)$$

Los valores propios del operador $\hat{p}$ son los posibles valores de momento que pueden obtenerse al medir el sistema, y estos son reales.

Formalismo General:

Para cualquier observable $\hat{A}$ que sea hermítico, podemos expresar sus propiedades a través de la relación:

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$$

Donde a_n es un valor propio (real) correspondiente al vector propio $|a_n\rangle$. Los valores propios a_n son los posibles resultados de la medición de la observable $\hat{A}$, y $|a_n\rangle$ son los estados en los que se colapsa el sistema tras la medición.

Conclusión:

Las matrices hermíticas son la elección natural para describir observables en mecánica cuántica porque garantizan que los resultados de las mediciones (valores propios) sean reales y que los estados cuánticos asociados a diferentes valores propios sean ortogonales y, por lo tanto, distinguibles. Esto es crucial para la coherencia del formalismo cuántico y la interpretación física de los resultados de las mediciones.

En computación cuántica, ambas matrices, tanto las **hermíticas** como las **unitarias**, juegan roles cruciales, pero se **usan más las matrices unitarias**. A continuación, te explico el papel que desempeñan cada una en este contexto:

1. Matrices Unitarias:

Las matrices unitarias son fundamentales en la computación cuántica porque describen la **evolución de los estados cuánticos**. Los estados cuánticos evolucionan de manera unitaria en el tiempo, lo que significa que cualquier operación cuántica o puerta cuántica que se aplique a un qubit (o a un conjunto de qubits) debe ser representada por una matriz unitaria.

Importancia de las Matrices Unitarias:

- **Evolución Temporal:** La ecuación de Schrödinger, que describe la evolución temporal de un sistema cuántico, es gobernada por un operador unitario derivado del Hamiltoniano del sistema.

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$$

  donde $U(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ es un operador unitario.

- **Puertas Cuánticas:** Todas las puertas cuánticas, que son los bloques básicos de los algoritmos cuánticos, se representan mediante matrices unitarias. Por ejemplo:
  - **Puerta Hadamard (H):**

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

  - **Puerta NOT cuántica (X):**

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

  - **Puerta de fase (S):**

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

Todas estas matrices son unitarias, y cualquier operación cuántica debe preservar la norma del estado cuántico, lo que se garantiza con la unitaridad.

- **Algoritmos Cuánticos:** En algoritmos cuánticos, como el algoritmo de Shor o el algoritmo de Grover, las operaciones que se realizan sobre los qubits están representadas por matrices unitarias.

2. Matrices Hermíticas:

Aunque las matrices unitarias son más predominantes en términos de la evolución y operaciones cuánticas, las matrices hermíticas también tienen un papel importante, principalmente en la descripción de **observables** y **mediciones**.

Importancia de las Matrices Hermíticas:

- **Observables Cuánticos:** En la mecánica cuántica, las observables (como la energía, el momento, etc.) se representan mediante operadores hermíticos. En computación cuántica, cuando se mide un estado cuántico, el operador de la medición es hermítico.
  - Por ejemplo, la matriz de Pauli Z:

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

es hermítica y representa una medición de la polarización de un qubit en la base computacional.

- **Hamiltoniano:** En el contexto de simulación cuántica, el Hamiltoniano de un sistema (que es hermítico) juega un papel crucial. La evolución unitaria del sistema se deriva del Hamiltoniano, que describe la energía del sistema.

Resumen:

- **Matrices Unitarias**: Son predominantes en la computación cuántica, ya que describen la evolución de los estados cuánticos y representan las puertas cuánticas utilizadas en algoritmos cuánticos.
- **Matrices Hermíticas**: Son cruciales para la descripción de observables y la medición de estados cuánticos, así como para la formulación de Hamiltonianos en simulaciones cuánticas.

Ejercicios: Matrices hermíticas y Unitarias

Ejercicio: Verificación de una Matriz Hermítica

Dada la siguiente matriz A:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2+i & 0 \\ 2-i & 3 & -i \\ 0 & i & 1 \end{pmatrix}$$

1. **Verifica si la matriz A es hermítica.**
2. **Encuentra los valores propios de la matriz A.**
3. **Determina si los valores propios son reales, confirmando la naturaleza hermítica de la matriz.**

Solución:

1. Verificación de la Hermiticidad

Para que A sea hermítica, debe cumplir $A = A^\dagger$, donde $A^\dagger$ es la conjugada transpuesta de A.
Calculemos $A^\dagger$:

- La transpuesta de A se obtiene intercambiando las filas por las columnas.
- La conjugada de un número complejo cambia el signo de la parte imaginaria.

Entonces, calculemos:

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} 4 & 2-i & 0 \\ 2+i & 3 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix}$$

Comparando A con $A^\dagger$:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2+i & 0 \\ 2-i & 3 & -i \\ 0 & i & 1 \end{pmatrix}, \quad A^\dagger = \begin{pmatrix} 4 & 2-i & 0 \\ 2+i & 3 & i \\ 0 & -i & 1 \end{pmatrix}$$

Podemos ver que $A = A^\dagger$, por lo tanto, A es una matriz hermítica.

2. Cálculo de los Valores Propios

Para encontrar los valores propios de la matriz A, resolvemos el determinante de $A - \lambda I$, donde λ son los valores propios y I es la matriz identidad.

Primero, calculemos $A - \lambda I$:

$$A - \lambda I = \begin{pmatrix} 4-\lambda & 2+i & 0 \\ 2-i & 3-\lambda & -i \\ 0 & i & 1-\lambda \end{pmatrix}$$

Ahora, el determinante de esta matriz se debe igualar a cero:

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 4-\lambda & 2+i & 0 \\ 2-i & 3-\lambda & -i \\ 0 & i & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

Este determinante puede calcularse usando expansión por cofactores, pero dado que esto es laborioso, normalmente se usa software o cálculos computacionales para encontrar los valores propios. Calculemos el determinante y resolvamos la ecuación cúbica para λ.

```python
import numpy as np


# Definimos la matriz A
A = np.array([[4, 2 + 1j, 0],
              [2 - 1j, 3, -1j],
              [0, 1j, 1]])


# Calculamos los valores propios de A
valores_propios = np.linalg.eigvals(A)
valores_propios
```

Los valores propios de la matriz A son aproximadamente:

$$\lambda_1 \approx 5.87, \quad \lambda_2 \approx 1.85, \quad \lambda_3 \approx 0.28$$

3. Verificación de los Valores Propios

Observamos que los valores propios obtenidos son todos números reales, lo cual es consistente con el hecho de que la matriz A es hermítica.

Ejercicio: Verificación y Construcción de una Matriz Unitaria

Dada la matriz U:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

1. **Verifica si la matriz U es unitaria.**
2. **Si es unitaria, encuentra los valores propios de U.**
3. **Encuentra los vectores propios correspondientes.**

1. Verificación de la Unitaridad

Para verificar si U es unitaria, necesitamos comprobar que:

$$U^\dagger U = I$$

donde $U^\dagger$ es la conjugada transpuesta de U, y I es la matriz identidad.

Primero, calculemos $U^\dagger$:

$$U^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Notemos que, en este caso, $U^\dagger = U$ ya que la matriz es real y su transpuesta es igual a la original.

Ahora, calculemos el producto $U^\dagger U$:

$$U^\dagger U = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \right)$$

Vamos a realizar este cálculo.

El producto $U^\dagger U$ da como resultado:

$$U^\dagger U = \begin{pmatrix} 1 & -2.24 \times 10^{-17} \\ -2.24 \times 10^{-17} & 1 \end{pmatrix}$$

Este resultado es muy cercano a la matriz identidad I, con pequeñas desviaciones numéricas debido a errores de redondeo en los cálculos computacionales. Por lo tanto, podemos concluir que U es efectivamente una matriz unitaria.

2. Cálculo de los Valores Propios

Ahora, calculamos los valores propios de la matriz unitaria U.

```python
# Definimos la matriz U
U = (1/np.sqrt(2)) * np.array([[1, 1], [1, -1]])

# Calculamos U^\dagger * U
U_dagger_U = np.dot(U.T.conj(), U)
U_dagger_U
```

```python
# Calculamos los valores propios de U
valores_propios_U = np.linalg.eigvals(U)
valores_propios_U
```

Los valores propios de la matriz U son:

$$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = -1$$

Los vectores propios correspondientes a los valores propios de U son:

$$v_1 = \begin{pmatrix} 0.9239 \\ 0.3827 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} -0.3827 \\ 0.9239 \end{pmatrix}$$

Resumen:

1. Verificamos que la matriz U es unitaria, ya que $U^\dagger U = I$.
2. Los valores propios de U son 1 y -1, lo cual es esperado para una matriz unitaria.
3. Los vectores propios asociados a estos valores propios fueron calculados y son ortogonales entre sí, lo cual es una propiedad importante de las matrices unitarias.

```python
import numpy as np

# Definimos la matriz U
U = (1/np.sqrt(2)) * np.array([[1, 1], [1, -1]])

# 1. Verificar si U es unitaria
U_dagger_U = np.dot(U.T.conj(), U)
es_unitaria = np.allclose(U_dagger_U, np.eye(2))

# 2. Si es unitaria, calcular los valores propios
if es_unitaria:
    valores_propios, vectores_propios = np.linalg.eig(U)
else:
    valores_propios, vectores_propios = None, None

# Resultados
print("¿La matriz U es unitaria?:", es_unitaria)
print("Valores propios de U:", valores_propios)
print("Vectores propios de U:\n", vectores_propios)
```