# Previous Questions

2025 年 7 月 7 日

## 1 环境配置

见 1.py

## 2 向量与矩阵

### 2.1 旋转矩阵

代码实现部分见 2-1.py

相当于将向量 $v$ 顺时针旋转 $\theta$

### 2.2 矩阵指数

代码实现部分见 2-2.py

考虑泰勒展开 $e^{i\theta\hat{P}}$，易计算验证泡利矩阵的平方都为 $I$，即 $\hat{P}^2 = I$。故

$$\begin{aligned} e^{i\theta\hat{P}} &= \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{i^k\theta^k\hat{P}^k}{k!} = \sum_{k=0}^{+\infty}(-1)^k\frac{\theta^{2k}}{(2k)!}I + \sum_{k=0}^{+\infty}(-1)^k i\frac{\theta^{2k+1}}{(2k+1)!}\hat{P} \\ &= \cos\theta I + i\sin\theta\hat{P} \end{aligned} \tag{1}$$

只需 $\hat{P}^2 = I$ 即可。

## 2.3 矩阵关于向量的期望

代码实现部分见 2-3.py

事实上泡利矩阵还满足厄米性质，即 $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$，故

$$\begin{aligned}v^\dagger\hat{Q}v &= (1,0)(\cos\theta/2I + i\sin\theta/2\hat{P})^\dagger\hat{Q}(\cos\theta/2I + i\sin\theta/2\hat{P})(1,0)^T \\ &= (1,0)(\cos\theta/2\hat{Q} - i\sin\theta/2\hat{P}\hat{Q})(\cos\theta/2I + i\sin\theta/2\hat{P})(1,0)^T \\ &= (1,0)(\cos^2\theta/2\hat{Q} + \sin^2\theta/2\hat{P}\hat{Q}\hat{P} + i\sin\theta/2\cos\theta/2(\hat{Q}\hat{P} - \hat{P}\hat{Q}))(1,0)^T\end{aligned} \tag{2}$$

有两种情况：

1. $\hat{P} = \hat{Q}$，则 $\hat{P}\hat{Q}\hat{P} = \hat{Q}, \hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P}$。
2. $\hat{P}\hat{Q} = \pm i\hat{R}$，则 $\hat{P}\hat{Q}\hat{P} = \pm i\hat{R}\hat{P} = -\hat{Q}, \hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P} = \pm 2i\hat{R}$（$\hat{R}$ 也为泡利矩阵）

故

$$v^\dagger\hat{Q}v = \begin{cases}\hat{Q}_{1,1} & (\hat{P} = \hat{Q}) \\ \cos\theta\hat{Q}_{1,1} \pm \sin\theta\hat{R}_{1,1} & (\hat{P} \neq \hat{Q})\end{cases} \tag{3}$$

总结一下可得

$$v^\dagger\hat{Q}v = \begin{cases}1 & (\hat{P} = \hat{Q} = \sigma_z) \\ \cos\theta & (\hat{P} = \sigma_{x,y}, \hat{Q} = \sigma_z) \\ \sin\theta & (\hat{P} = \sigma_x, \hat{Q} = \sigma_y) \\ -\sin\theta & (\hat{P} = \sigma_y, \hat{Q} = \sigma_x) \\ 0 & (otherwise.)\end{cases} \tag{4}$$

## 2.4 张量积

代码实现部分见 2-4.py

## 2.5 狄拉克符号

### 2.5.1 旋转矩阵

$|v\rangle = |0\rangle, |v'\rangle = R(\theta)|v\rangle$

### 2.5.2 矩阵指数

### 2.5.3 矩阵关于向量的期望

$|v_0\rangle = |0\rangle, |v\rangle = e^{i\frac{\theta}{2}\hat{P}}|v_0\rangle$
$E = \langle v|\hat{Q}|v\rangle$

### 2.5.4 张量积

$E = \langle 0^n|H|0^n\rangle$

## 2.6 使用Tensorsircuit后端

代码实现部分见 2-*-tc.py

# 3 导数与梯度下降

## 3.1 数值微分

代码实现部分见 3-1.py （假设 $f(x) = \sum x_i^3, x = (11, 45, 14)$）

## 3.2 三角函数数值微分

$f(x) = A\sin(x+B)+C$，则 $f'(x) = A\cos(x+B), f(x+\delta) - f(x-\delta) = A(\sin(x+B+\delta) - \sin(x+B-\delta)) = 2A\cos(x+B)\sin\delta$。取 $\tau = 2\sin\delta$ 即有 $f'(x) = \frac{f(x+\delta)-f(x-\delta)}{\tau}$

## 3.3 单比特参数平移

$f(\theta) = \langle 0|(\cos\theta/2I - i\sin\theta/2\hat{P}_1)\hat{P}_2(\cos\theta/2I + i\sin\theta/2\hat{P}_1)|0\rangle$ ，与 2.4 表达式基本相同，故可类似化简为：

$$
f(\theta)=\begin{cases}
1 & (\hat{P}_1=\hat{P}_2=\sigma_z) & (A,B,C)=(0,0,1)\\
\cos\theta & (\hat{P}_1=\sigma_{x,y},\hat{P}_2=\sigma_z) & (A,B,C)=(1,\pi/2,0)\\
\sin\theta & (\hat{P}_1=\sigma_x,\hat{P}_2=\sigma_y) & (A,B,C)=(1,0,0)\\
-\sin\theta & (\hat{P}_1=\sigma_y,\hat{P}_2=\sigma_x) & (A,B,C)=(-1,0,0)\\
0 & (otherwise.) & (A,B,C)=(0,0,0)
\end{cases} \tag{5}
$$

有显著的周期性，且符合 3.2 中的形式（后面为对应的 $A,B,C$），故参数平移法给出的导数是正确的。

### 3.4 梯度下降

代码实现部分见 3-4.py

## 4 测量

### 4.1 线路期望计算

代码实现部分见 4-1.py

### 4.2 基于测量结果近似期望

代码实现部分见 4-2.py

### 4.3 测量不确定度

执行完 4-1 中电路后状态变为 $\frac{|00\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}}$，而 $|00\rangle,|11\rangle$ 都为 $Z_1Z_2$ 特征值为 1 对应的特征向量，故测量结果必为 1，最后算得的期望也为 1，与 4-1 计算的不会有差异。

# 5 Grover Search

代码实现见 opt-1.py

# 6 变分优化算法

代码实现见 opt-2-*.py

由凸函数性质保证单峰性，可直接梯度下降解决（三次函数求解需分类讨论）