量子计算(六)——量子傅里叶变换与相位估计

一、离散傅里叶变换简介

> - 注意(1)：这一节的内容可以跳过，直接观看[二、量子傅里叶变换]！
> - 注意(2)：这一节的内容仅仅是对数值分析及信号系统内容的极其粗略的概括，会忽略大量严谨的细节，细节内容请翻阅或移步与数值分析或信号系统相关的教材或文章。

1.函数的范数与内积

不妨思考一个问题：我们知道对于向量来说存在正交分解——也就是可以将n维向量表示为n个正交基分量的线性和，甚至只要几个分量线性无关即可——那么对于函数来说是否也有类似的操作，可以分解为几个正交函数呢？

这个问题首先要解决的是：如何将函数视作一个向量(这样才能定义函数的正交)？或者说，向量应当具有什么性质？我们常说，向量是具有方向的数量，因此为了将函数向量化，就应当有某种手段衡量其方向与数量。不妨首先介绍衡量数量的手段，这意味着我们必须将一个函数整体映射为一个实数。对于我们所熟知的向量，其数量(一般会称之为长度)是：

$$|x| = (x_1^2 + x_2^2 + ... + x_n^2)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{k=1}^{n} x_k^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

在线性空间中更规范的称呼是$2-$范数，记为$\|x\|_2$，特点是将其在各分量上的大小平方累加后再开方。对于函数$f(x)$就能以类似的方法定义其$2-$范数，只要将函数在各点上与x轴围成的面积视作分量大小即可——当然这也意味着我们必须事先指定函数的定义域，其$2-$范数才是有意义的：

$$\|f(x)\|_2 = \lim_{\Delta x \to 0}\left(\sum_{k=1}^{\frac{b-a}{\Delta x}} f^2(a + k\Delta x)\cdot \Delta x\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\int_a^b f^2(x)dx\right)^{\frac{1}{2}}$$

现在可以思考如何衡量函数的方向了——当然在这里我们只关心如何确定函数正交。在熟知的线性空间中，向量的$2-$范数也可视作自内积后开方，而两个向量正交则是由内积后是否为0来判断的！由此仿照向量内积、结合函数$2-$范数的形式，即可定义两个函数$f(x), g(x)$的内积(f, g)：

$$(f, g) = \int_a^b f(x)\cdot g(x)dx$$

当内积为0时，就可以称$f(x), g(x)$是正交的了。

2.正交函数系与三角拟合

与向量类似，我们或许会热衷于将函数分解为正交函数的线性叠加。定义在$[-\pi, \pi]$上(定义在$[0, 2\pi]$上也是可以的)的三角函数系$[1, cos\ kx, sin\ kx], k = 1, 2, ...$正是这样一种性质优异的正交函数系，因为：

$$\int_{-\pi}^{\pi} cos\ kx = \int_{-\pi}^{\pi} sin\ kx\ dx = 0$$
$$\int_{-\pi}^{\pi} cos\ kx \cdot sin\ nx\ dx = 0, \quad k \neq n$$
$$\int_{-\pi}^{\pi} cos\ kx \cdot cos\ nx\ dx = 0, \quad k \neq n$$
$$\int_{-\pi}^{\pi} sin\ kx \cdot sin\ nx\ dx = 0, \quad k \neq n$$

因此某些函数$f(x)$应当能被表示为这些三角函数的线性叠加——或者至少能利用最小二乘法被**最佳逼近**！这便是三角拟合，也即我们常说的傅里叶级数(的三角形式)了：

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{+\infty} a_k cos\ k\omega_0 x + b_k sin\ k\omega_0 x$$

这意味着函数$f(x)$有无穷多的、$k\omega_0$频率的谐波，无论k多大。当然为了计算上的方便、形式上的美观，利用欧拉公式，我们更喜爱傅里叶级数的复指数形式：

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c_k e^{ik\omega_0 x}$$

必须指出，上面的级数只能拟合周期为$\frac{2\pi}{\omega_0}$的**连续**函数，但不局限于实函数。而对于周期为$N = \frac{2\pi}{\omega_0}$离散函数$f[x]$，如果研究离散的复指数函数$e^{ik\omega_0 x}$，你会发现每当$k$增加一个周期$N$，却依然变回自身即$e^{ik\omega_0 x}$——这意味着周期离散函数的谐波频率具有上界，故离散函数的傅里叶级数是：

$$f[x] = \sum_{k=\langle N \rangle} c_k e^{ik\omega_0 x} = \sum_{k=\langle N \rangle} c_k e^{ik\frac{2\pi}{N}x}$$

> 这里在求和号下的$k = \langle N \rangle$表示：只要是在一个周期N上对k进行的求和即是合法的。

同时也能求出：

$$c_n = \frac{1}{N}\sum_{k=\langle N\rangle} f[k]e^{-ik\frac{2\pi}{N}n}$$

2.对复向量的离散傅里叶变换

对傅里叶级数系数的计算：

$$c_n = \frac{1}{N}\sum_{k=\langle N\rangle} f[k]e^{-ik\frac{2\pi}{N}n}$$

实际上彰显了各谐波在函数$f[x]$中的强度(也就是我们常说的从时域到频域)——这不就是对函数的正交分解么！但是现在我们又回归到了向量身上，因为对于周期为N的离散函数而言，只要采样确定N个取值就已经获得了函数的所有信息。不妨重新记这连续的N个函数值$f[k]$为复向量：

$$x = [x_0, x_1, ..., x_{N-1}]$$

> 当然您会说：为什么不需要记录各函数值对应的时间点？首先，我们总能定义开始观察的时间点为零点；其次，时间平移操作作用到傅里叶级数系数上时只会使其附加一个$e^{-ik\omega_0 t_0}$的相位系数，其中t_0是时间平移的量，而这个系数的模为1，并不会影响到我们评估谐波分量的强度。

并记输出为复向量y，于是有：

$$y_k = \frac{1}{N}\sum_{j=\langle N\rangle} x_j e^{-ij\frac{2\pi}{N}k}$$

当发生时间反演时也不改变谐波分量的强度，因此不妨假定我们总反转一下时间即取$j \to -j$，这样可以去掉复指数函数上烦人的负号：

$$y_k = \frac{1}{N}\sum_{j=\langle N\rangle} x_j e^{ij\frac{2\pi}{N}k}$$

另一方面，式前的系数$\frac{1}{N}$取什么也并不重要，或者说只在特定的场景下重要(其实际作用是为了归一化)——而在量子傅里叶变换中，只有取$\frac{1}{\sqrt{N}}$才是重要的。这样我们终于得到在量子傅里叶变换中我们所期望的离散傅里叶变换形式：

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{j=0}^{N-1} x_j \cdot e^{i\frac{2\pi}{N}jk}$$

二、量子傅里叶变换

1.离散傅里叶变换的量子化

已知离散傅里叶变换的形式是：

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j \cdot e^{i\frac{2\pi}{N}jk}$$

其中，x_j是复向量$x = [x_0, x_1, ..., x_{N-1}]$中的元素，$y_k$是复向量$y = [y_0, y_1, ..., y_{N-1}]$中的元素，两个复向量应当且必然具有相同数量的元素。现在不妨将上式量子化。既然已知y_k的计算式，那么复向量y也就轻易写出：

$$\begin{aligned}
y &= y_0[1,0,...,0] + y_1[0,1,...,0] + ... + y_{N-1}[0,0,...,1] \\
&* \text{使用狄拉克符号} * \\
&= \sum_{k=0}^{N-1} y_k|k\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \left\{ \sum_{j=0}^{N-1} x_j \cdot e^{i\frac{2\pi}{N}jk} \right\} |k\rangle \\
&= \mathcal{F}\{x\}
\end{aligned}$$

那么，当复向量x恰为计算基态$|j\rangle$时，此时x中只有第j位为1而其余为0，这意味着大括号中只剩下$e^{i\frac{2\pi}{N}jk}$，代入得到：

$$\mathcal{F}\{|j\rangle\} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi}{N}jk}|k\rangle$$

从而量子化了离散傅里叶变换，所得到的形式是**针对计算基态**的傅里叶变换。当然不妨进一步改写：对于量子傅里叶变换来说显然有一些N值是不能取到的，例如5——因为当有N个量子位时，将产生2^N个计算基态。故将上式中的N全部替换为2^N得：

$$\mathcal{F}\{|j\rangle\} = \frac{1}{2^{N/2}} \sum_{k=0}^{2^N-1} e^{i\frac{2\pi}{2^N}jk}|k\rangle$$

2.量子傅里叶变换的量子电路图

由于量子态可以叠加，只要实现了对计算基态的量子傅里叶变换，就实现了对任意量子态的量子傅里叶变换。为了得到计算基态之傅里叶变换的量子电路图，我们必须进一步改写上式。

注意到上式左边是以直积态形式写出的计算基态，而右边却以附带相位的计算基态之线性和写出。为了更加契合两边的形式，同时为了确认每一个量子最后所处的量子态，需要将右边改写为直积态形式。为此，首先将j展开写为二进制形式$\overline{j_1 j_2 \ldots j_N}$，$k$也展开写为二进制形式$\overline{k_1 k_2 \ldots k_N}$，于是上式右边可以重新计算——首先是对$k$从0到$2^N-1$的遍历，按二进制展开可得：

$$\sum_{k=0}^{2^N-1} e^{i\frac{2\pi}{2^N}jk}|k\rangle = \sum_{k_1=0}^{1} \cdots \sum_{k_N=0}^{1} e^{i2\pi j\cdot\sum_{l=1}^{N} k_l 2^{-l}}|k_1 k_2 \ldots k_N\rangle$$

其中，将指数部分的分母重新组合，使得指数中的k重写为二进制小数的形式：

$$\begin{aligned}\frac{k}{2^N} &= \frac{k_1 k_2 \ldots k_n}{2^N} \\ &= 0.k_1 k_2 \ldots k_N \\ &= k_1 \cdot \frac{1}{2^1} + k_2 \cdot \frac{1}{2^2} + \ldots + k_N \cdot \frac{1}{2^N} \\ &= \sum_{l=1}^{N} k_l 2^{-l}\end{aligned}$$

显然这样改写之后，大求和号之后的部分可以重写为直积态形式：

$$e^{i2\pi j\cdot\sum_{l=1}^{N} k_l 2^{-l}}|k_1 k_2 \ldots k_N\rangle = \bigotimes_{l=1}^{N} e^{i2\pi j\cdot k_l 2^{-l}}|k_l\rangle$$

于是：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{F}\{|j\rangle\} &= \frac{1}{2^{N/2}}\sum_{k=0}^{2^N-1} e^{i\frac{2\pi}{2^N}jk}|k\rangle \\
&= \frac{1}{2^{N/2}}\sum_{k_1=0}^{1}\cdots\sum_{k_N=0}^{1}\bigotimes_{l=1}^{N} e^{i2\pi j\cdot k_l 2^{-l}}|k_l\rangle \\
&= \frac{1}{2^{N/2}}\bigotimes_{l=1}^{N}\sum_{k_l=0}^{1} e^{i2\pi j\cdot k_l 2^{-l}}|k_l\rangle \\
&= \frac{1}{2^{N/2}}\bigotimes_{l=1}^{N}(|0\rangle + e^{i2\pi j\cdot 2^{-l}}|1\rangle)
\end{aligned}
$$

再展开一次，可以更加直观：

$$
\mathcal{F}\{|j\rangle\} = \frac{1}{2^{N/2}}\left(|0\rangle + e^{i2\pi\cdot 0.j_N}|1\rangle\right)\left(|0\rangle + e^{i2\pi\cdot 0.j_{N-1}j_N}|1\rangle\right)\ldots\left(|0\rangle + e^{i2\pi\cdot 0.j_1j_2\ldots j_N}|1\rangle\right)
$$

也就是说，在对计算基态$|j\rangle$傅里叶变换之后，第k号量子所处的量子态是：

$$
\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi\cdot 0.j_{N-k}\ldots j_{N-1}j_N}|1\rangle)
$$

3.量子傅里叶变换的几何意义

> 由于技术所限，这里只能以语言的形式表达其几何意义，敬请见谅。

由上节我们知道了在对计算基态$|j\rangle$傅里叶变换之后，第k号量子所处的量子态是：

$$
\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi\cdot 0.j_{N-k}\ldots j_{N-1}j_N}|1\rangle)
$$

在《量子计算(3)》介绍布洛赫球时还知道，单个量子的纯态可以表示为：

$$
|\psi\rangle = cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}sin\frac{\theta}{2}|1\rangle
$$

对比可知，显然单个量子在傅里叶变换后对应$\theta = 90^\circ = \pi$的情况，也就是在球面的赤道上；而在变换之前要么是$|0\rangle$要么是$|1\rangle$，即北极点和南极点，因此量子傅里叶变换显然是将计算基态由南北极点的交错表示变换为了赤道上的频率表示。

何谓南北极点的交错表示？举个三量子的简单例子，对于计算基态$|010\rangle$来说，各量子在布洛赫球面上的排列是$[北极, 南极, 北极]$，对于其它计算基态也是类似地按二进制数指向南北极点，这便是南北极点的交错表示。

而赤道上的频率表示又是如何?

三、相位反冲

1.量子门的相位

2.相位反冲

四、相位估计