

量子计算 —算法篇

Quantum Computing

网址: www.qubits.top

作者: Calvin Tang

邮箱: 179209347@qq.com

介绍

教程简介：

- 面向对象：量子计算初学者
- 依赖课程：线性代数，量子力学（非必需）

知乎专栏：

https://www.zhihu.com/column/c_1501138176371011584

Github & Gitee 地址：

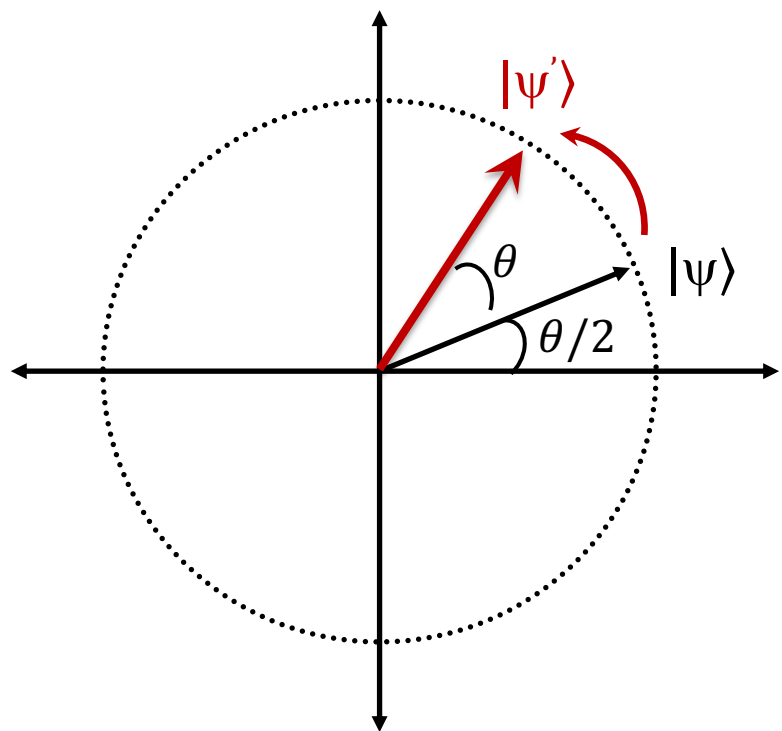
<https://github.com/mymagicpower/qubits>

<https://gitee.com/mymagicpower/qubits>

* 版权声明：

- 仅限用于个人学习
- 禁止用于任何商业用途

二维常用几何变换 - 逆时针旋转 θ



$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + \sin(\theta/2) |1\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}$$

* 量子态为实系数特例

$$Q = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

* 每次作用于向量，相当于逆时针旋转 θ

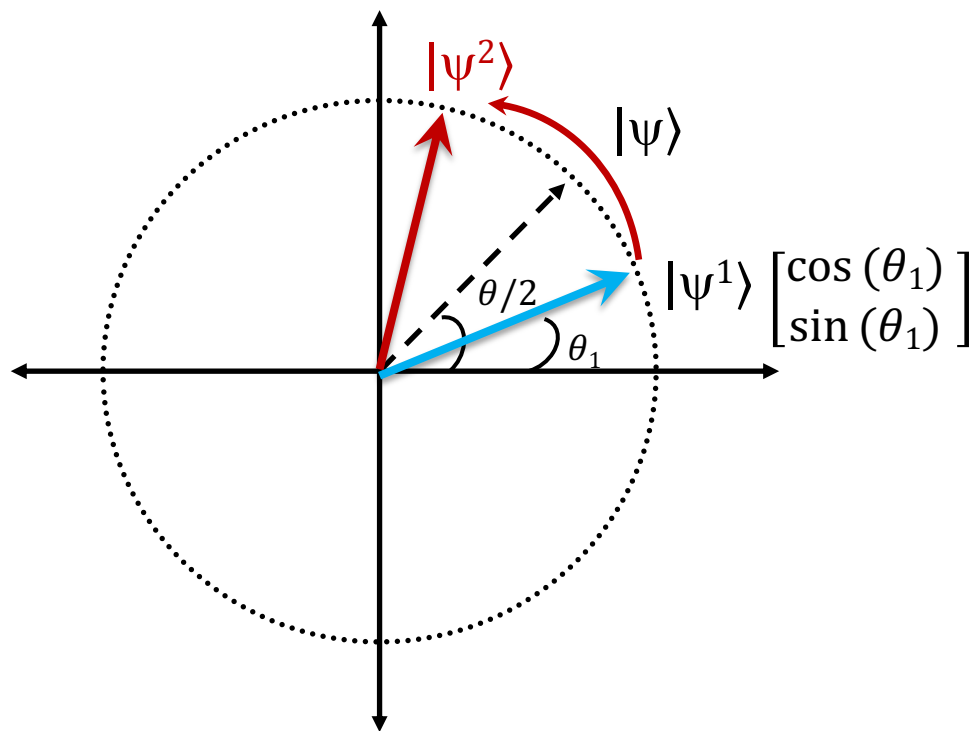
证明：

两角和与差的三角函数公式：

$$\begin{aligned} \sin(\alpha \pm \beta) &= \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta \\ \cos(\alpha \pm \beta) &= \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= Q |\psi\rangle \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) \cos(\theta/2) - \sin(\theta) \sin(\theta/2) \\ \sin(\theta) \cos(\theta/2) + \cos(\theta) \sin(\theta/2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta/2 + \theta) \\ \sin(\theta/2 + \theta) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

二维常用几何变换 – 镜像



$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + \sin(\theta/2) |1\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}$$

* 量子态为实系数特例

$$Q = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{bmatrix}$$

* 关于通过原点、方向和水平轴夹角为 $\theta/2$ 直线镜像;

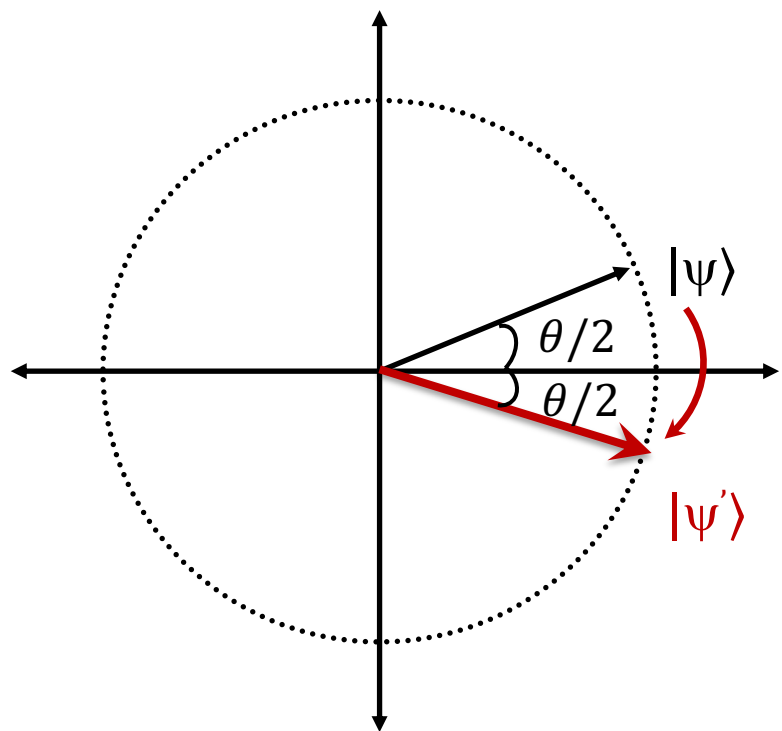
证明：

$$\begin{aligned} |\psi^2\rangle &= Q |\psi^1\rangle \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_1) \\ \sin(\theta_1) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) \cos(\theta_1) + \sin(\theta) \sin(\theta_1) \\ \sin(\theta) \cos(\theta_1) - \cos(\theta) \sin(\theta_1) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta - \theta_1) \\ \sin(\theta - \theta_1) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

关于通过原点、方向和水平轴夹角为 $\theta/2$ 直线镜像，
 可以理解为逆时针旋转 $2\left(\frac{\theta}{2} - \theta_1\right)$ ，则：

$$|\psi^2\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta_1 + 2(\frac{\theta}{2} - \theta_1)) \\ \sin(\theta_1 + 2(\frac{\theta}{2} - \theta_1)) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta - \theta_1) \\ \sin(\theta - \theta_1) \end{bmatrix}$$

二维常用几何变换 - 关于横轴镜像对称



$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + \sin(\theta/2) |1\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}$$

* 量子态为实系数特例

$$Q = \begin{bmatrix} \cos(0) & \sin(0) \\ \sin(0) & -\cos(0) \end{bmatrix}$$

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

* 作用于向量，相当于关于横轴镜像

证明：

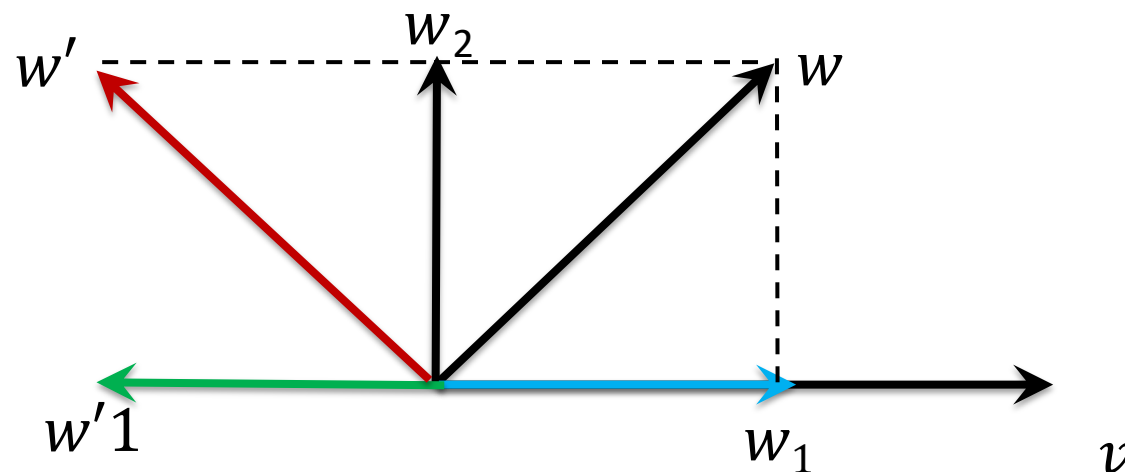
$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= Q |\psi\rangle \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ -\sin(\theta/2) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

任意维度反射变换 – 实向量空间

线性代数，在任意维度空间中，有如下反射变换，对应的矩阵为：

$$R_n = I_n - 2vv^T$$

在公式中， I_n 为 $n \times n$ 的单位矩阵， v 为长度为 1 的 n 维列向量， vv^T 为 $n \times n$ 的矩阵。
 R_n 可以实现**反射变换**：把任意向量 w 与 v 平行的分量 w_1 反向为 w'_1 ，而与 v 垂直的分量 w_2 保持不变。

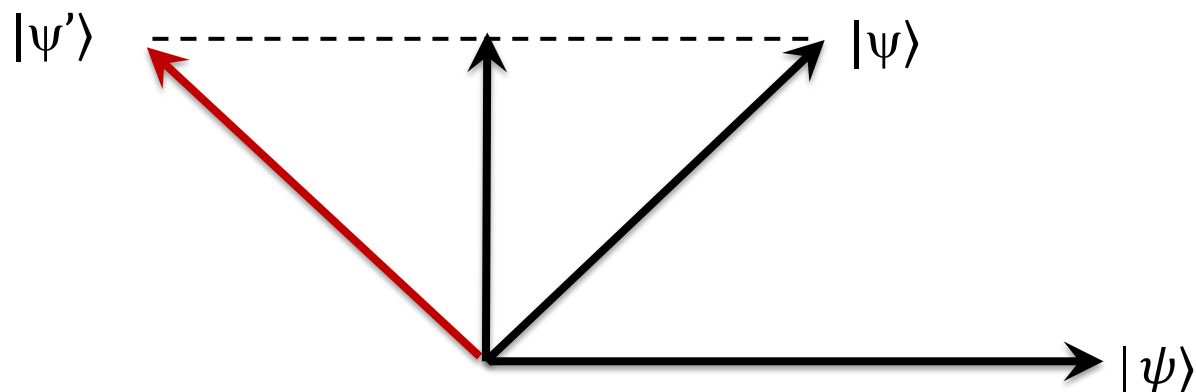


R_n 作用于任何向量，相当于关于 v 的垂直分量 w_2 （法线）做镜像映射。

任意维度反射变换 – 复向量空间

根据我们之前总结的实向量与复向量的变换关系，我们可以得到下面等价的公式：

$$R_n = I_n - 2|\psi\rangle\langle\psi|$$



R_n 作用于任何量子态向量 $|\psi\rangle$ ，相当于关于 $|\psi\rangle$ 垂直方向（法线）做镜像映射。

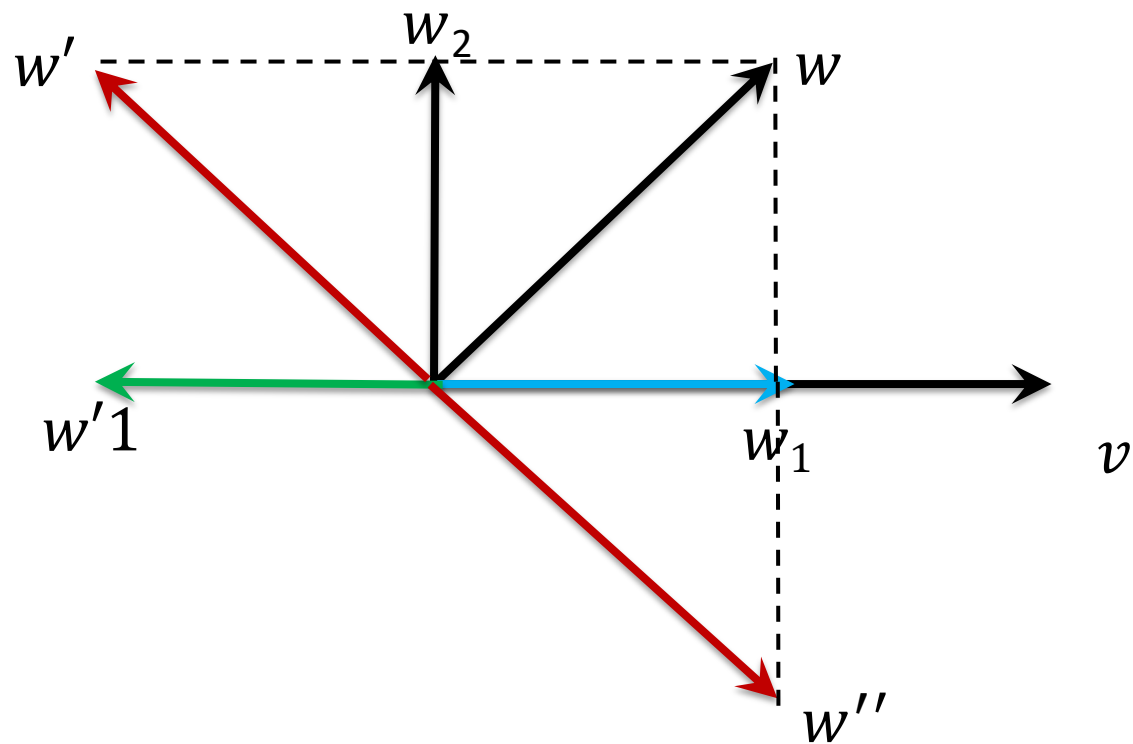
$$R_n = I_n - 2|\psi\rangle\langle\psi|$$

任意维度镜像变换 – 实向量空间

如果我们将公式改为下面的写法，也就是增加一个负号，我们看看它的几何性质：

$$R_n = 2vv^T - I_n$$

增加一个负号，相当于在任意维空间中，将 w' 翻转反向，至 w'' 的位置，显然，其与原向量关于 v 形成镜像映射关系。

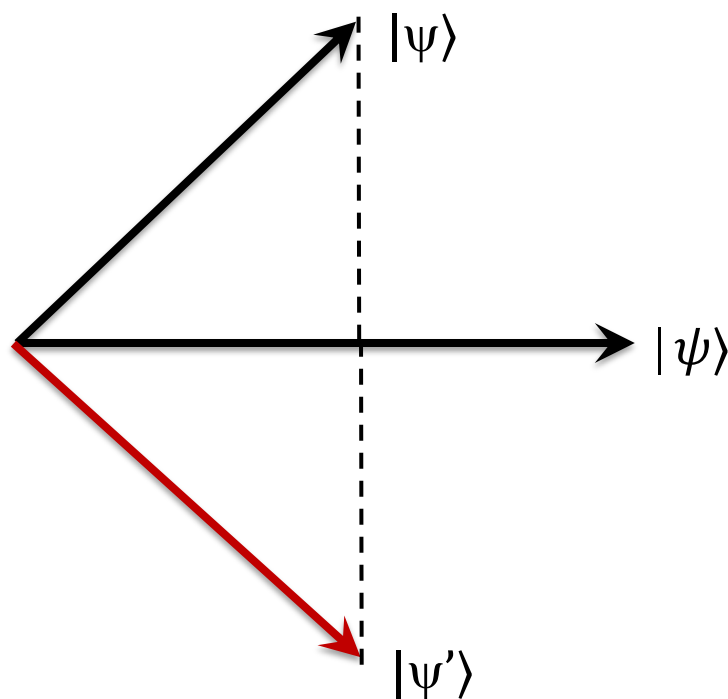


R_n 作用于任何向量，相当于关于 v 做镜像映射。

任意维度镜像变换 – 复向量空间

根据我们之前总结的实向量与复向量的变换关系，我们可以得到下面等价的公式：

$$R_n = 2|\psi\rangle\langle\psi| - I_n$$

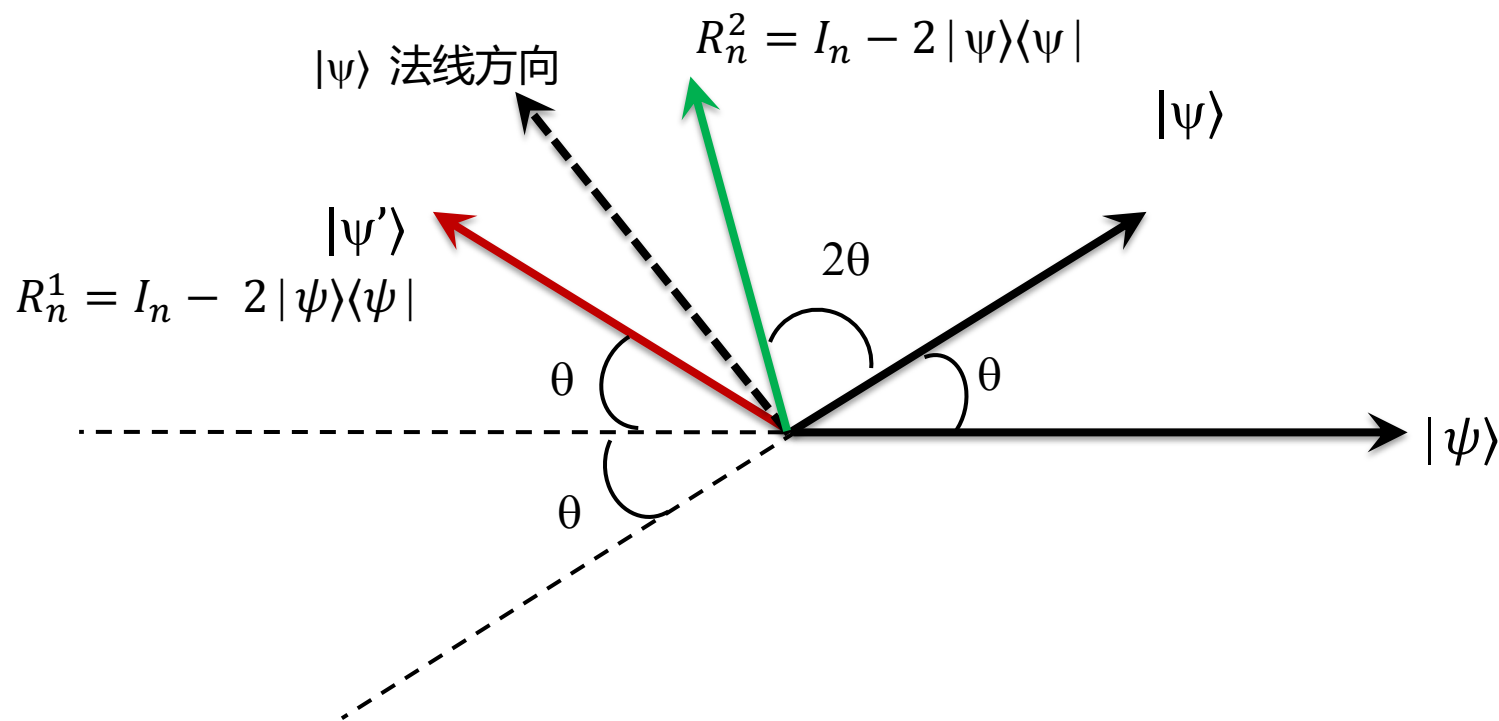


R_n 作用于任何量子态向量 $|\psi\rangle$ ，相当于关于 $|\psi\rangle$ 做镜像映射。

$$R_n = 2|\psi\rangle\langle\psi| - I_n$$

两次反射变换定义旋转

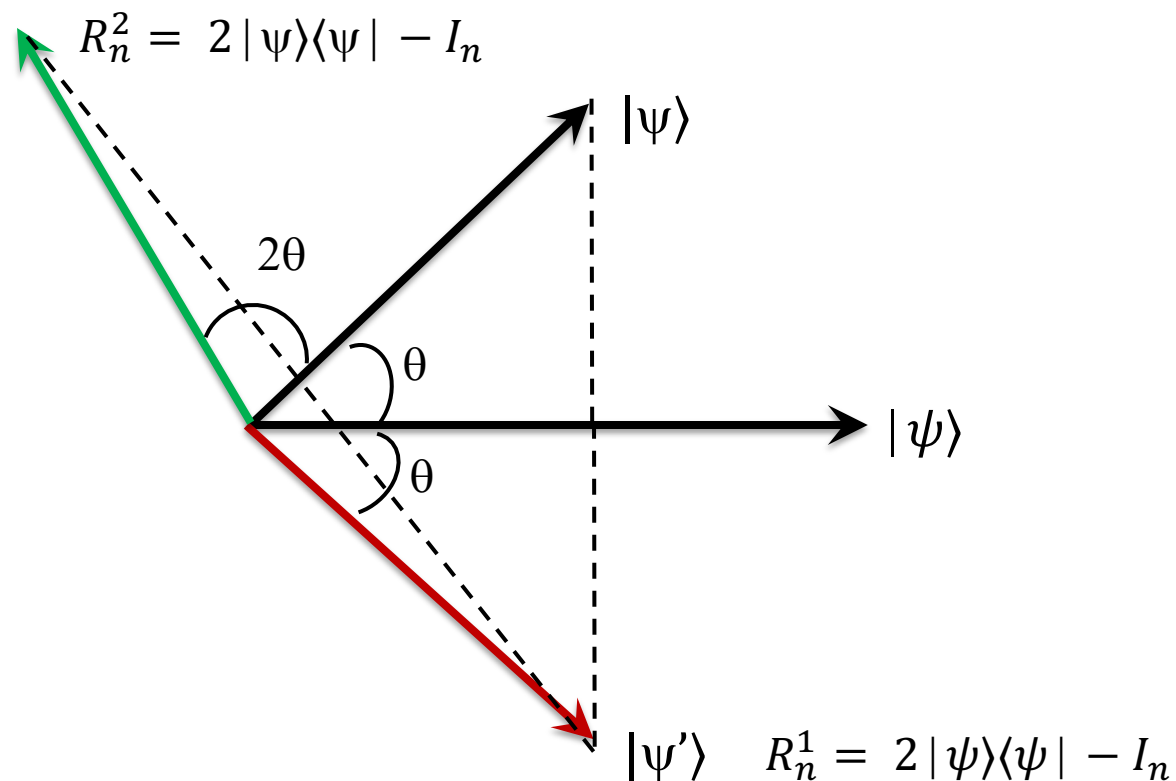
连续两次反射变换：



相当于逆时针旋转 2θ 角。

两次镜像变换定义旋转

连续两次镜像映射：



相当于逆时针旋转 2θ 角。

振幅放大

振幅放大 (Amplitude Amplification) 线路的主要作用为对于给定纯态的振幅进行放大，从而调整其测量结果概率分布。

对于某个已知大小的可二元分类且标准 f 确定的有限集合 Ω ，基于 f 可以将集合中的任一元素 $|\psi\rangle$ 表示为两个标准正交基态 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ 的线性组合，将其归一化可表示为：

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\alpha\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\beta\rangle$$

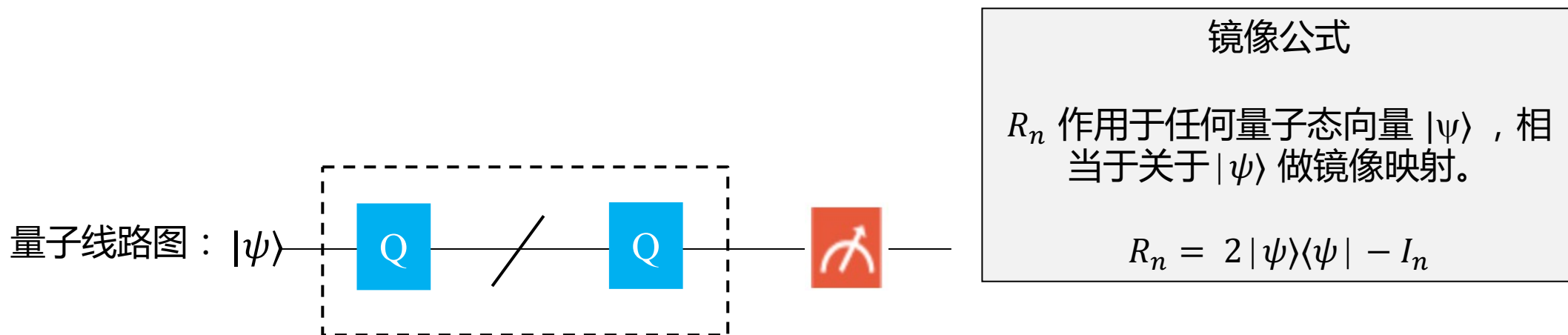
振幅放大量子线路可以将叠加态 $|\psi\rangle$ 的表达式中 $|\beta\rangle$ 的振幅放大，从而得到一个结果量子态，能够以大概率测量得到目标量子态 $|\beta\rangle$ 。

假设我们可以构造出某种量子门操作的组合，记该组合为振幅放大算子 Q ，将 Q 作用 k 次于量子态 $|\psi\rangle$ 上得到形如下式的量子态：

$$Q^k |\psi\rangle = \cos \left(\frac{2k+1}{2} \theta \right) |\alpha\rangle + \sin \left(\frac{2k+1}{2} \theta \right) |\beta\rangle$$

那么就完成了所需的振幅放大量子线路构建。

振幅放大



假设基于集合 Ω 和分类标准 f 的量子态 $|\psi\rangle$ 已经完成制备，关键在于构造振幅放大算子 Q 。

定义振幅放大算子：

$$P_1 = 2|\alpha\rangle\langle\alpha| - I, P = 2|\psi\rangle\langle\psi| - I, Q = PP_1.$$

* 我们可以看到， P_1 和 P 都符合镜像公式。

或者： $P_1 = I - 2|\beta\rangle\langle\beta|, P = I - 2|\psi\rangle\langle\psi|, Q = -PP_1.$

* 我们可以看到， P_1 和 P 都符合反射公式。

振幅放大 - 实现指定态的相位翻转 (镜像)

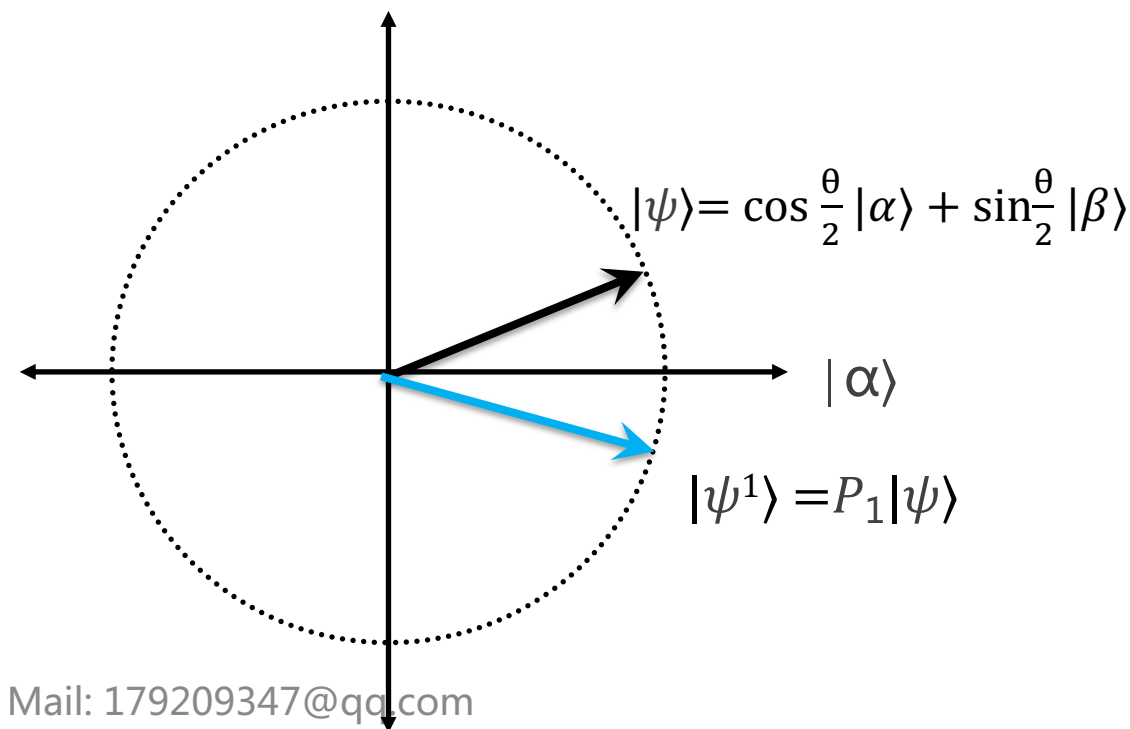
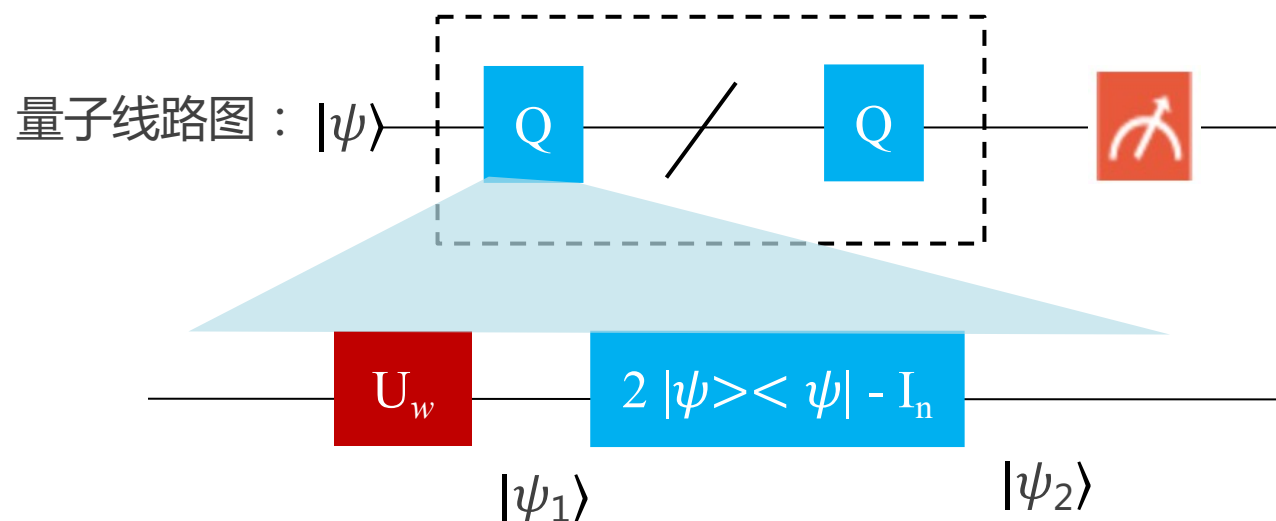
指定态的相位翻转算子：

$$P_1 = 2|\alpha\rangle\langle\alpha| - I$$

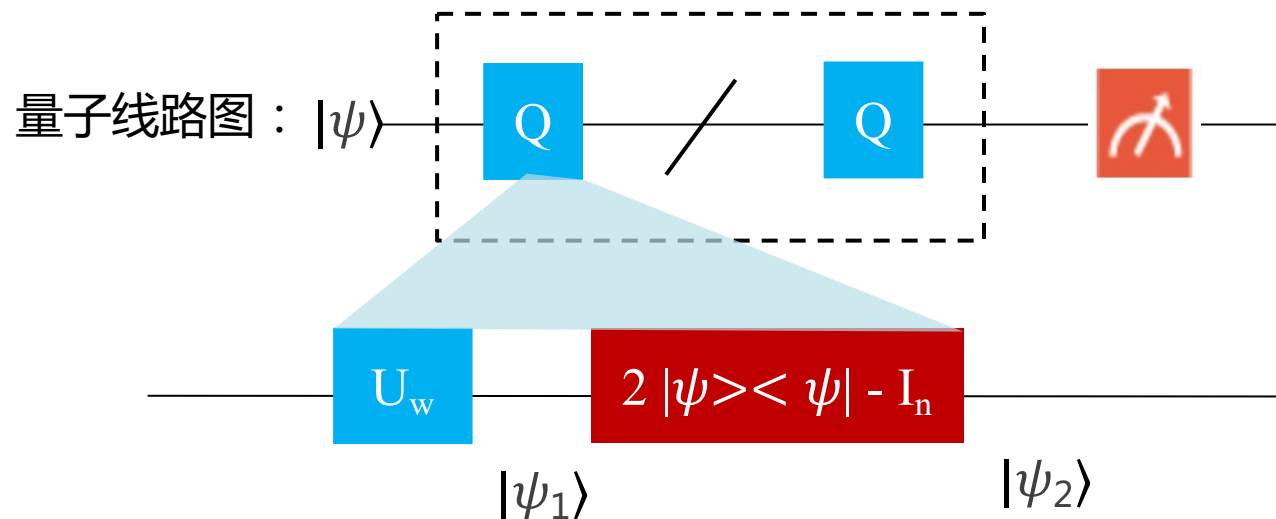
$$P_1 = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{bmatrix}$$

P_1 为关于横轴 $|\alpha\rangle$ 做镜像，那么 $\theta/2 = 0$ 所以有：

$$P_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$



振幅放大 - 镜像翻转



➤ 振幅放大算子：

$$P = 2|\psi\rangle\langle\psi| - I$$

P 为关于 $|\psi\rangle$ 做镜像，所以有：

$$P = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{bmatrix}$$

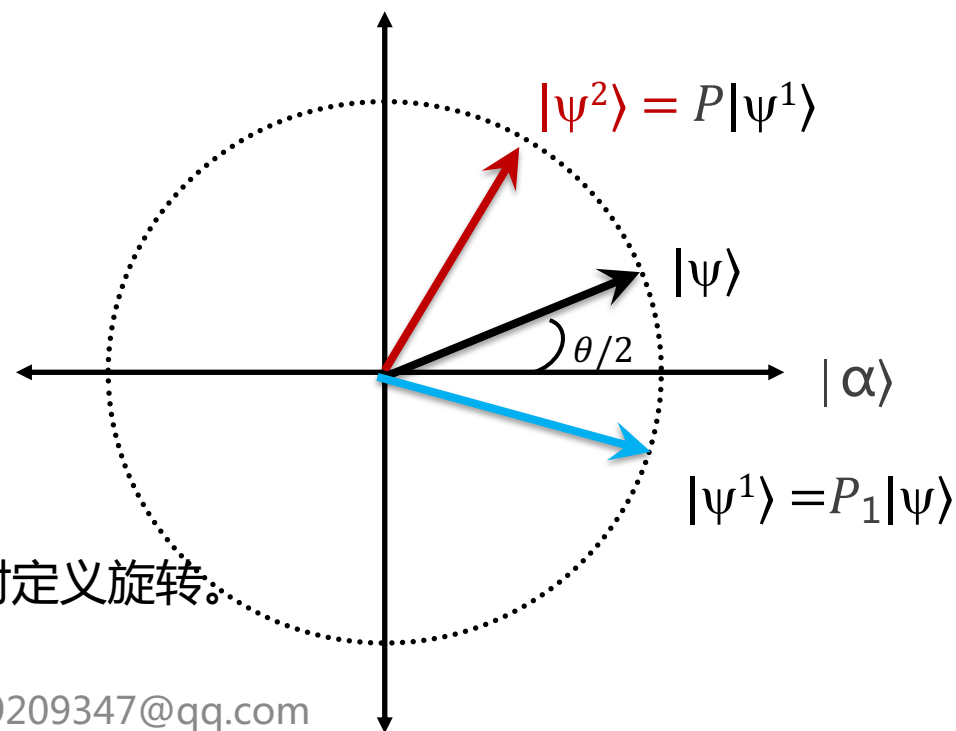
➤ 振幅放大算子：

$$Q = PP_1$$

$$Q = PP_1 = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

➤ 连续两次镜像映射可以定义一次旋转，我们也可以通过两次反射定义旋转。



振幅放大

由此可知在 $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$ 张成的空间中算子 Q 可以表示为：

$$Q = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \text{ (让向量逆时针旋转 } \theta \text{)}$$

实质上可以视为一个角度为 θ 的旋转量子门 ($RY(\theta)$ 门) 操作。因此有：

$$G^k|\psi\rangle = \cos\left(\frac{2k+1}{2}\theta\right)|\alpha\rangle + \sin\left(\frac{2k+1}{2}\theta\right)|\beta\rangle$$

选取合适的旋转次数 k 使得 $\sin^2(\frac{2k+1}{2}\theta)$ 最接近 1 即可完成振幅放大量子线路。
相比经典的遍历分类方法，振幅放大量子线路可以充分体现量子计算的优势。

算子 Q - $R_Y(\theta)$ 门 - 性质

两角和与差的三角函数公式：

$$\begin{aligned}\sin(\alpha \pm \beta) &= \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta \\ \cos(\alpha \pm \beta) &= \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta\end{aligned}$$

$$Q = R_Y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}Q^2 &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos^2(\theta) - \sin^2(\theta) & -2\cos(\theta)\sin(\theta) \\ 2\cos(\theta)\sin(\theta) & \cos^2(\theta) - \sin^2(\theta) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(2\theta) & -\sin(2\theta) \\ \sin(2\theta) & \cos(2\theta) \end{bmatrix}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}Q^3 &= \begin{bmatrix} \cos(2\theta) & -\sin(2\theta) \\ \sin(2\theta) & \cos(2\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(2\theta)\cos(\theta) - \sin(2\theta)\sin(\theta) & -\cos(2\theta)\sin(\theta) - \sin(2\theta)\cos(\theta) \\ \sin(2\theta)\cos(\theta) + \cos(2\theta)\sin(\theta) & -\sin(2\theta)\sin(\theta) + \cos(2\theta)\cos(\theta) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(3\theta) & -\sin(3\theta) \\ \sin(3\theta) & \cos(3\theta) \end{bmatrix}\end{aligned}$$

....

$$Q^n = \begin{bmatrix} \cos(n\theta) & -\sin(n\theta) \\ \sin(n\theta) & \cos(n\theta) \end{bmatrix}$$

矩阵几何意义：

每次作用于向量，相当于将向量逆时针旋转 θ

算子 Q - $R_Y(\theta)$ 门 - 性质

$$Q = R_y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

$$Q \text{ 作用在量子态 } |\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}$$

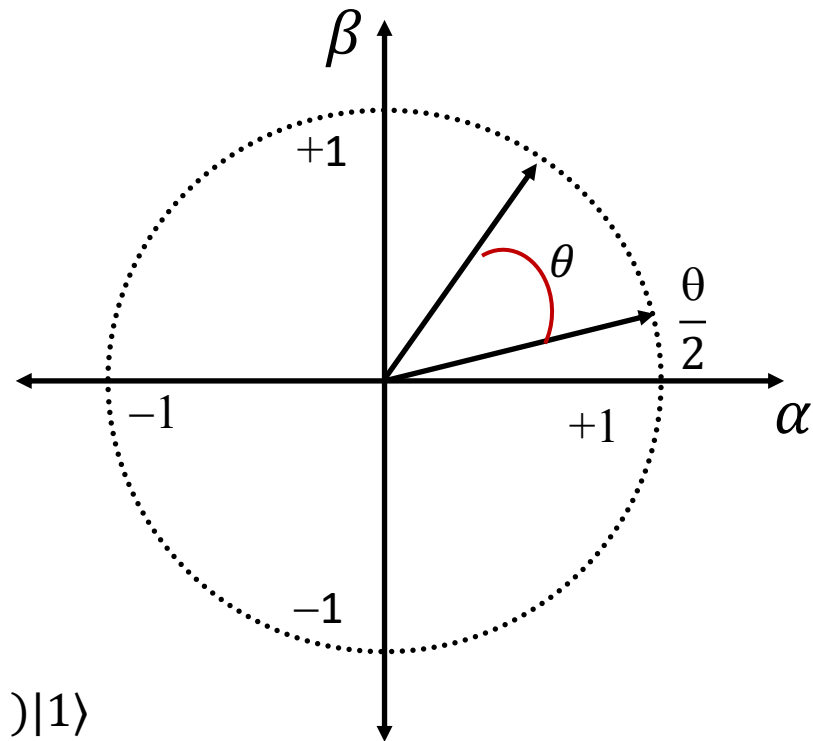
$$Q^1 |\psi\rangle = Q^1 \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta + \theta/2) \\ \sin(\theta + \theta/2) \end{bmatrix}$$

$$Q^2 |\psi\rangle = \begin{bmatrix} \cos(2\theta + \theta/2) \\ \sin(2\theta + \theta/2) \end{bmatrix}$$

....

$$Q^n |\psi\rangle = \begin{bmatrix} \cos((2n+1)\theta/2) \\ \sin((2n+1)\theta/2) \end{bmatrix} = \cos((2n+1)\theta/2) |0\rangle + \sin((2n+1)\theta/2) |1\rangle$$

选取合适的旋转次数 n 使得 $\sin^2((2n+1)\theta/2)$ 最接近 1 , 即可完成**振幅放大**量子线路。





Thank

You