量子计算
—算法篇

Quantum Computer

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，解析几何，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/quantum
https://gitee.com/mymagicpower/quantum

*** 版权声明：**

- 仅限用于个人学习，或者大学授课使用
  （大学授课如需ppt 原件，请用学校邮箱联系我获取）
- 禁止用于任何商业用途

化繁为简

1949

费曼图和费曼规则

费曼图、费曼规则和重正化的计算方法，这是研究量子电动力学和粒子物理学不可缺少的工具。

理查德·费曼
（1918—1988年）

The world is strange. The whole universe is very strange, but you see when you look at the details that ***the rules of the game are very simple*** *– the mechanical rules by which you can figure out exactly what is going to happen when the situation is simple.*

But ***it is not complicated. It is just a lot of it.***

看似复杂的世界是由众多的简单规则构建而成。

Calvin，QQ: 179209347 Mail: 179209347@qq.com

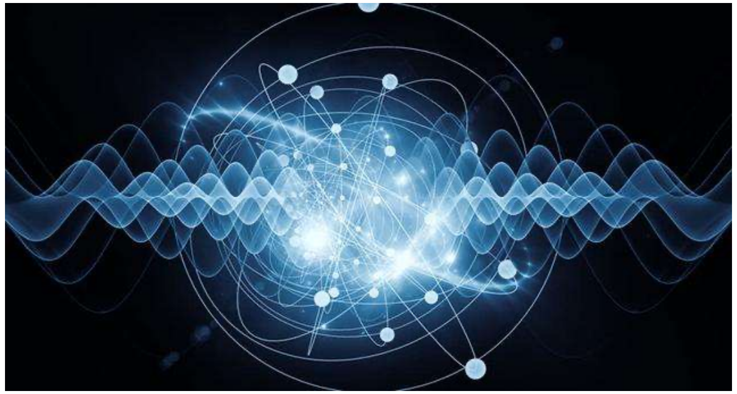
化繁为简 – 物质波

1923

德布罗意波 (物质波)

实物粒子也有波粒二象性，认为与运动粒子相应的还有一正弦波，两者总保持相同的位相。

德布罗意
（1892—1987年）



1923年9月至10月间，路易·维克多·德布罗意连续在《法国科学院通报》上发表了三篇有关波和量子的论文。 第一篇题目是“辐射——波与量子”，提出实物粒子也有波粒二象性，认为与运动粒子相应的还有一正弦波，两者总保持相同的位相。后来他把这种假想的非物质波称为相波。
德布罗意在这里并没有明确提出物质波这一概念，他只是用位相波或相波的概念，认为可以假想有一种非物质波。
物质波是在薛定谔方程建立以后，诠释波函数的物理意义时才由薛定谔提出的。

以简御繁 - 泰勒展开式

1712

泰勒展开式

在局部用一个多项式函数近似地替代一个复杂函数。

泰勒 (Taylor)
（1685—1731年）

它是数学中**逼近**这个重要思想的一个典型应用。
逼近思想：给定一个函数 f，我们要研究 f 的性质，但 f 本身很复杂，直接无处入手。于是我们就想办法去找一个较简单的函数 g，使其逼近 f ，取代 f。

典型例子：

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!}$$

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$$

以简御繁 – 本轮 & 均轮

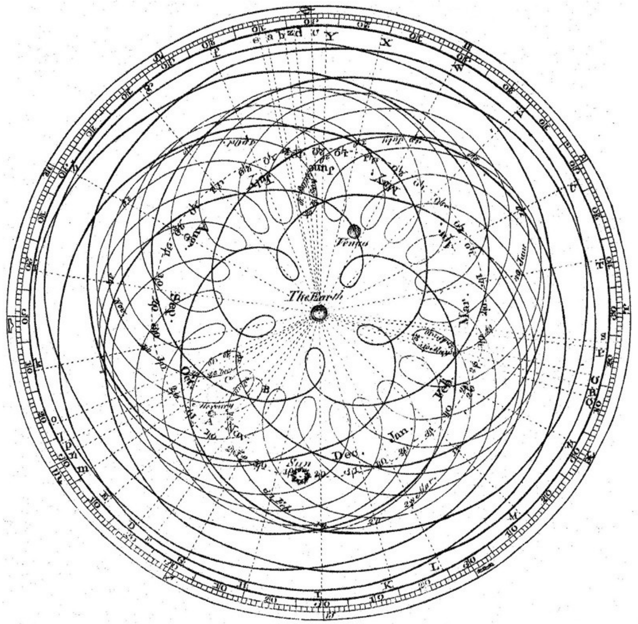
2世纪

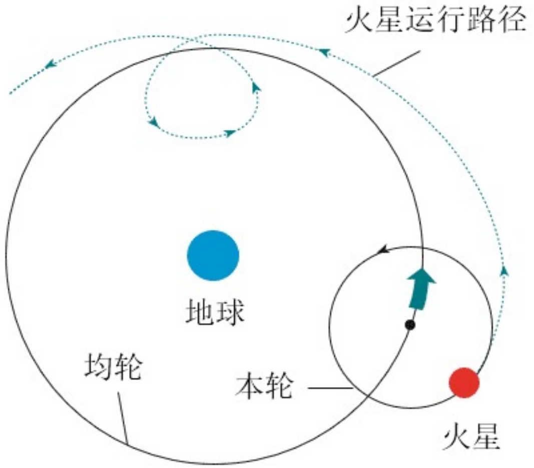
地心说

托勒密全面继承了亚里士多德的地心说，并利用前人积累和他自己长期观测得到的数据，写成了8卷本的《伟大论》。

托勒密
（约90年—168年）

托勒密使用古希腊本轮–均轮系统具有类似级数展开的功能，即为了增加推算的精确度，可以在本轮上再加一个小轮，让此小轮之心在本轮上绕行，而让天体在小轮上绕行。只要适当调诸轮的半径、绕行方向和速度，即可达到要求。从理论上说，小轮可以不断增加，以求得更高的精度。





之后哥白尼在《天体运行论》中放弃了这种表示，改用了更为简洁的日心说，之后开普勒改用椭圆代替圆。（地心说可以理解为以地球为参照点观察其它星体轨迹）

以简御繁 – 傅里叶级数 & 傅里叶变换

1811

傅里叶级数（即三角级数）

傅里叶级数能够将任意周期函数表示成一组三角函数基函数依照各自的系数的累加。

傅里叶(Fourier)
（1768—1830年）

傅里叶级数能够将任意周期函数表示成一组基函数依照各自的系数的累加，而**傅里叶变换**针对的是非周期函数。

- 在不同的研究领域，傅里叶变换具有多种不同的变体形式，如连续傅里叶变换和离散傅里叶变换。
- 傅里叶变换是线性算子，若赋予适当的范数，它还是酉算子。
- 傅里叶变换的逆变换容易求出，而且形式与正变换非常类似。
- 正弦基函数是微分运算的本征函数，从而使得线性微分方程的求解可以转化为常系数的代数方程的傅里叶求解。在线性时不变的物理系统内，频率是个不变的性质，从而系统对于复杂激励的响应可以通过组合其对不同频率正弦信号的响应来获取。
- 著名的卷积定理指出：傅里叶变换可以化复杂的卷积运算为简单的乘积运算，从而提供了计算卷积的一种简单手段。
- 离散形式的傅里叶变换可以利用数字计算机快速的算出（其算法称为快速傅里叶变换算法(FFT)）

Calvin，QQ: 179209347 Mail: 179209347@qq.com

傅里叶级数

傅里叶级数，它可以将任意周期函数分解为简单震荡函数（正弦函数和余弦函数，这些函数作为基函数）的累加：

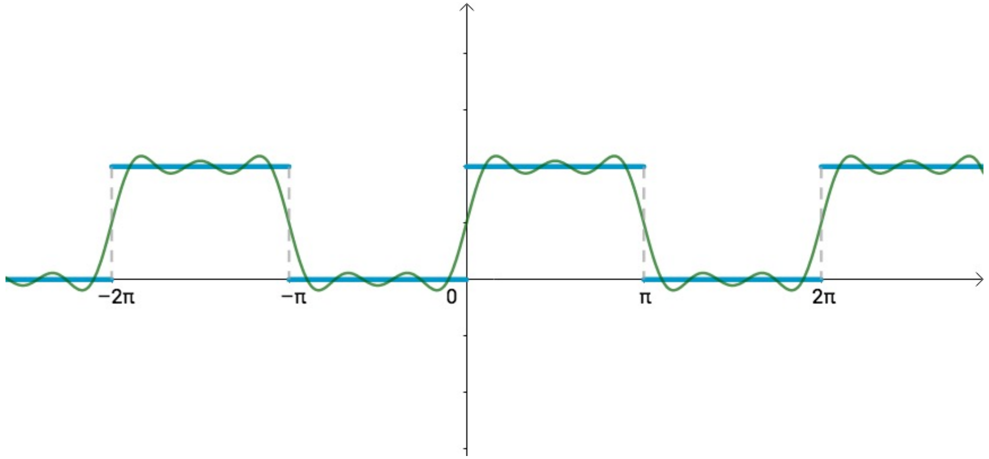
$$f(t)=a_0+\sum_{n=1}^{\infty}(a_n\cos(n\omega t)+b_n\sin(n\omega t))$$

$$T\text{ 为周期 ， }\omega=\frac{2\pi}{T}\text{ 称为基频率}$$

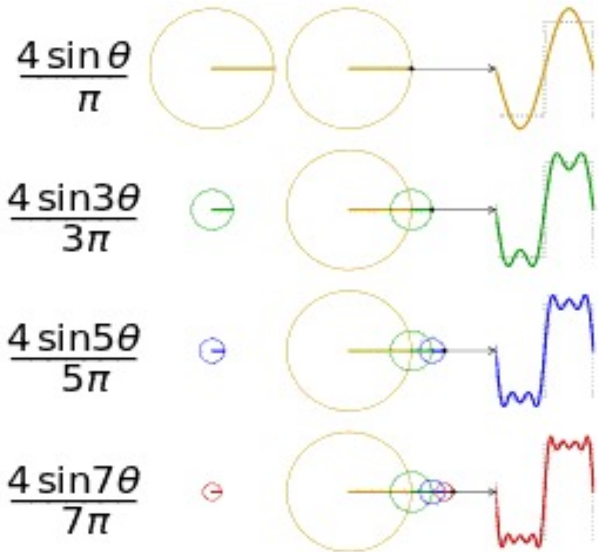
三角函数系：

$\{1,\sin(\omega t),\cos(\omega t),\sin(2\omega t),\cos(2\omega t),\cdots,\sin(n\omega t),\cos(n\omega t),\cdots\}$

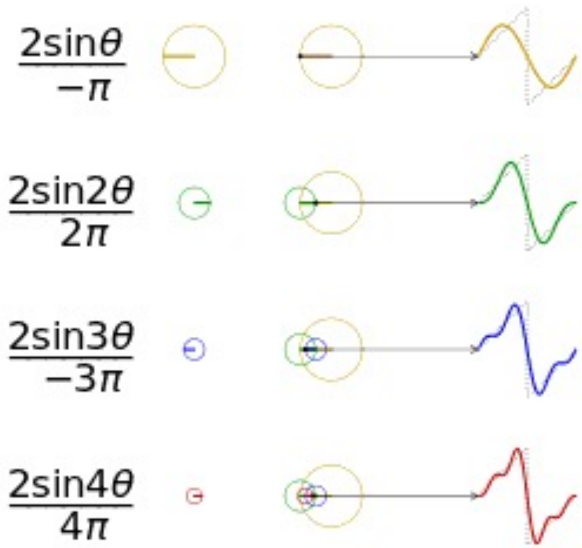
使用傅里叶级数分解周期函数时不同周期 T 的函数要使用不同的三角函数系来作为基函数。



方波



锯齿波



Calvin，QQ: 179209347 Mail: 179209347@qq.com

傅里叶变换

傅立叶变换使我们可以将信号分解为单个频率和频率幅度。 换句话说，它将信号**从时域转换到频域**，结果称为频谱。快速傅里叶变换（FFT）是一种可以有效计算傅立叶变换的算法，它广泛用于信号处理。

时域分析：以时间作为参照来观察动态世界的方法。

频域分析：应用频率特性研究线性系统的经典方法。

傅立叶级数的复数形式

$$f(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n\, e^{i\frac{2\pi n}{T}x}$$

其中：

$$c_n=\frac{1}{T}\int_{x_0}^{x_0+T} f(x)\, e^{-i\frac{2\pi n}{T}x}\,dx$$

傅立叶变换

当 $T=\infty$

$$f(x)=\int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)\, e^{i\omega x}\,d\omega$$

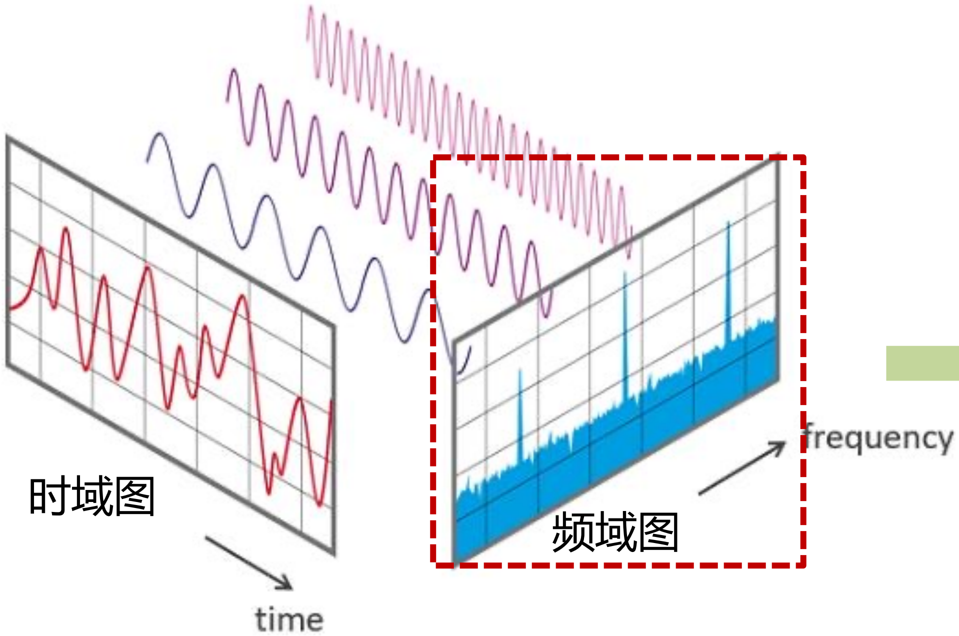
$$F(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, e^{-i\omega x}\,dx$$

两者称为傅立叶变换对，可以相互转换：

$$f(x)\Leftrightarrow F(\omega)$$

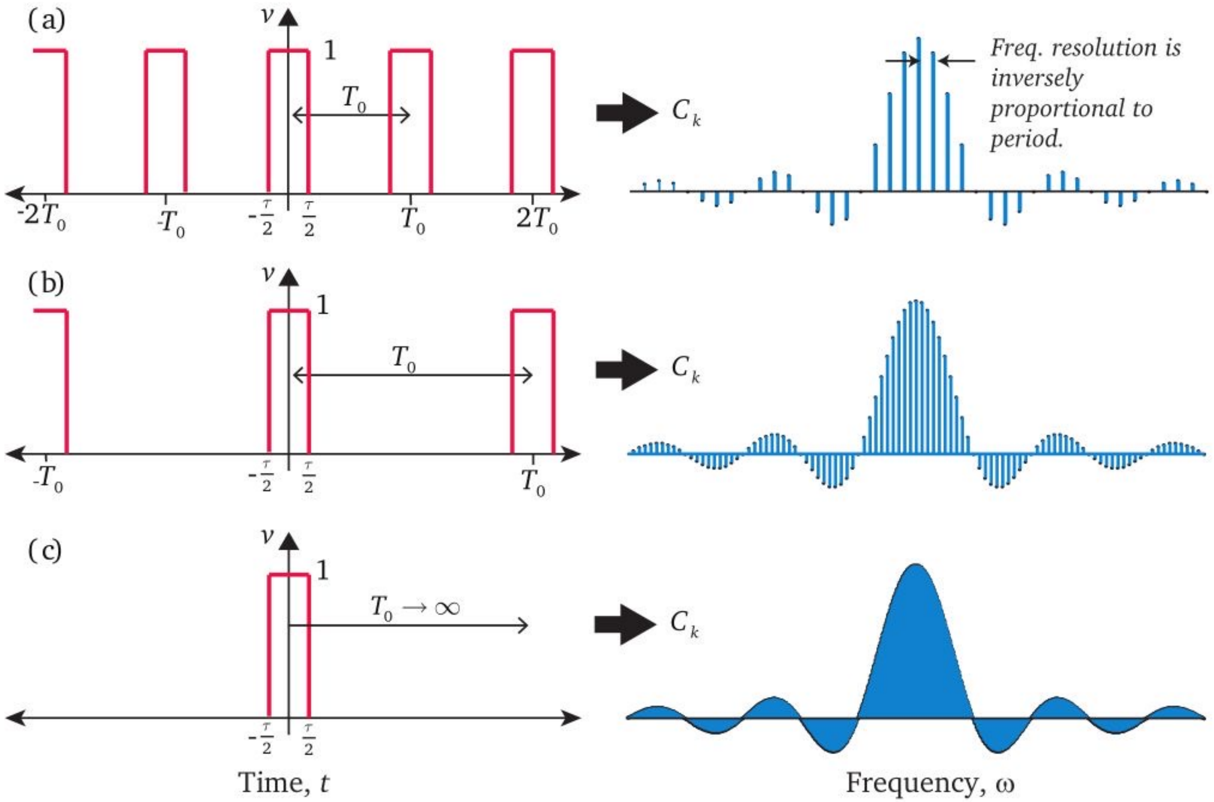
傅里叶变换

时域分析：以时间作为参照来观察动态世界的方法。



通过傅里叶级数可以画出频域图即频谱（Spectrum）

随着周期T增加，频域图越来越密集
当 $T=\infty$时，得到傅立叶变换，频域图变为连续曲线



Calvin，QQ: 179209347 Mail: 179209347@qq.com

离散傅里叶变换

离散傅里叶变换（DFT - Discrete Fourier Transform ）是离散傅里叶级数（DFS）引申出来的， 这二者的时域、频域都是离散的，因而它们的时域、频域又必然是周期的。但是 DFT 是针对有限长序列的。

离散傅里叶变换和傅里叶变换做的事是一样，也是从时域到频域，然后它做的事是把一组复数 $\{x_n\} = x_0, x_1, \ldots, x_{N-1}$ 变换到另一组复数 $\{X_n\} = X_0, X_1, \ldots, X_{N-1}$：

$$X_k = \sum_{n=0}^{\mathrm{N}-1} x_n \cdot e^{-i\frac{2\pi kn}{N}}$$
$$= \sum_{n=0}^{\mathrm{N}-1} x_n \cdot [\cos\left(\frac{2\pi kn}{N}\right) - i\sin(\frac{2\pi kn}{N})]$$

相应的，也有逆离散傅里叶变换（IDFT）公式：

$$x_n = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{\mathrm{N}-1} X_k \cdot e^{i\frac{2\pi kn}{N}}$$
$$= \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{\mathrm{N}-1} X_k \cdot [\cos\left(\frac{2\pi kn}{N}\right) + i\sin(\frac{2\pi kn}{N})]$$

量子傅里叶（Fourier）变换

量子傅里叶（Fourier）变换要点

1. 量子傅里叶变换是对量子力学振幅进行傅里叶变换的有效算法。
2. 量子傅里叶变换（QFT）实质上是经典的逆离散傅里叶变换（IDFT）的量子版本。
3. 量子傅里叶变换/逆变换，实质上可以视为一种振幅和基向量的相互转化。
4. QFT可以简单地通过对IDFT进行替换得到，QFT和DFT本质上都是同一个向量在两个等价空间中的不同表示形式，即基向量的更换。
5. 量子傅里叶变换**不加速计算经典数据的傅里叶变换**, 但它可以用做相位估计。

参考来源：https://pyqpanda-toturial.readthedocs.io/zh/latest/QFT.html

逆离散傅里叶变换

经典的逆离散傅里叶变换（IDFT）

$$x_n = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} X_k \cdot e^{i\frac{2\pi kn}{N}}$$

量子傅里叶变换（QFT）

实质上是经典的逆离散傅里叶变换（IDFT）的量子版本，可以简单地通过对 IDFT 进行替换得到：

$$QFT|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}}\sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i\frac{2\pi kx}{2^n}}|k\rangle$$

$$\sum_{j=0}^{N-1} x_j\,|x\rangle \rightarrow \sum_{j=0}^{N-1} y_k\,|k\rangle$$

由定义可知，空间 $\{|x\rangle\}$ 中的某个向量 $\sum_{j=0}^{N-1} x_j\,|x\rangle$ 通过傅里叶变换可以表示为另一个等价空间 $\{|k\rangle\}$ 中基向量的线性组合 $\sum_{j=0}^{N-1} y_k\,|k\rangle$, 且线性组合的系数 y_k 由 $|x\rangle$ 和 x_j 决定。

矢态的二进制表示

计算基矢态的二进制表示

设n个量子位的量子计算机的计算基矢态为 $|x\rangle$, 则其二进制展开 $k=\sum_{i=0}^{n} k_i\, 2^{n-i}$ 为：

$$x = x_1 x_2 \ldots x_n$$

$$x = x_1 2^{n-1} + x_2 2^{n-2} + \ldots + x_n 2^0$$

x = 110

x = 1*2^2 + 1*2^1 + 0*2^0

二进制分数的表示

$$0.x_l x_{l+1} \ldots x_m$$

$$x_l/2^1 + x_{l+1}/2^2 + \ldots + x_m/2^{m-l+1}$$

QFT的求和形式与张量积形式

对任给整数 x ，由二进制展开 $k=\sum_{i=0}^{n} k_i\, 2^{n-i}$ ，对$|x\rangle$ 进行量子傅里叶变换的结果可表示为：

整数部分：$x_1x_2 \ldots x_n = x_1 2^{n-1} + x_2 2^{n-2} + \ldots + x_n 2^0$

小数部分：$0.x_1x_2 \ldots x_n = \frac{x_1}{2^1} + \frac{x_2}{2^2} + \ldots + \frac{x_n}{2^n}$

$$
\begin{aligned}
QFT|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i\frac{2\pi kx}{2^n}} |k\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i2\pi x \frac{k_1 2^{n-1} + k_2 2^{n-2} + \ldots + k_n 2^0}{2^n}} |k\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i2\pi x \left(\frac{k_1}{2^1} + \frac{k_2}{2^2} + \ldots + \frac{k_n}{2^n}\right)} |k\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^{1} \sum_{k_2=0}^{1} \ldots \sum_{k_n=0}^{1} e^{i2\pi x \left(\sum_{l=1}^{n} k_l 2^{-l}\right)} |k_1 k_2 \ldots k_n\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^{1} \sum_{k_2=0}^{1} \ldots \sum_{k_n=0}^{1} \otimes_{l=1}^{n} e^{i2\pi x k_l 2^{-l}} |k_1 k_2 \ldots k_n\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \otimes_{l=1}^{n} \left(\sum_{k_l=0}^{1} e^{i2\pi x k_l 2^{-l}} |k_l\rangle\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \otimes_{l=1}^{n} \left(|0\rangle + e^{i2\pi x 2^{-l}} |1\rangle\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \otimes_{l=1}^{n} \left(|0\rangle + e^{i2\pi q} e^{i2\pi p 2^{-l}} |1\rangle\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_n} |1\rangle\right)\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_{n-1}x_n} |1\rangle\right) \ldots \left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_1x_2 \ldots x_n} |1\rangle\right)
\end{aligned}
$$

$x2^{-l} = x_1 2^{n-1-l} + x_2 2^{n-2-l} + \ldots + x_n 2^{0-l}$

$x2^{-l} = a$ (整数部分) $+ b$(小数部分)

$e^{i2\pi x} = e^{i2\pi(a+b)} = e^{i2\pi a}\, e^{i2\pi b} = e^{i2\pi b}$

Calvin，QQ: 179209347 Mail: 179209347@qq.com

QFT的求和形式与张量积形式

直积形式

$$|x_1x_2 \dots x_N\rangle \to \frac{1}{\sqrt{2^n}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_n}|1\rangle\right)\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_{n-1}x_n}|1\rangle\right)\dots\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_1x_2 \dots x_n}|1\rangle\right)$$

由上式可知，QFT不仅可以将特定量子态 $|x\rangle$ 表示为另一组基的线性组合，这个线性组合还能表示为多个单比特量子态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi x 2^{-l}}|1\rangle)$ 的张量积。

因此对任给整数 x，如果可以由二进制展开位 $|x_{n+1-l}\rangle$ 快速构造量子态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi x 2^{-l}}|1\rangle)$，那么就可以通过张量积形式的QFT表达式完成相应QFT量子线路的构造。

二进制展开与量子态制备

$$|x_1x_2 \dots x_N\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2^n}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_n}|1\rangle\right)\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_{n-1}x_n}|1\rangle\right)\dots\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_1x_2 \dots x_n}|1\rangle\right)$$

制备 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{i2\pi x 2^{-l}}|1\rangle\right)$ 转化为制备 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_{n+1-l}\dots x_n}|1\rangle\right)$

由于：

$$\mathrm{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + |1\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i[0.x_n]}|1\rangle\right)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i[0.x_{n-1}x_n]}|1\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i[0.x_{n-1}]}e^{2\pi i[0.0x_n]}|1\rangle\right)$$

$\mathrm{R_m}|0\rangle = |0\rangle$，$\mathrm{R_m}|1\rangle = e^{2\pi i/2^{\mathrm{m}}}|1\rangle$

$\mathrm{R_k}$ 逻辑门

$$\mathrm{R_k} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi i/2^k} \end{bmatrix}$$

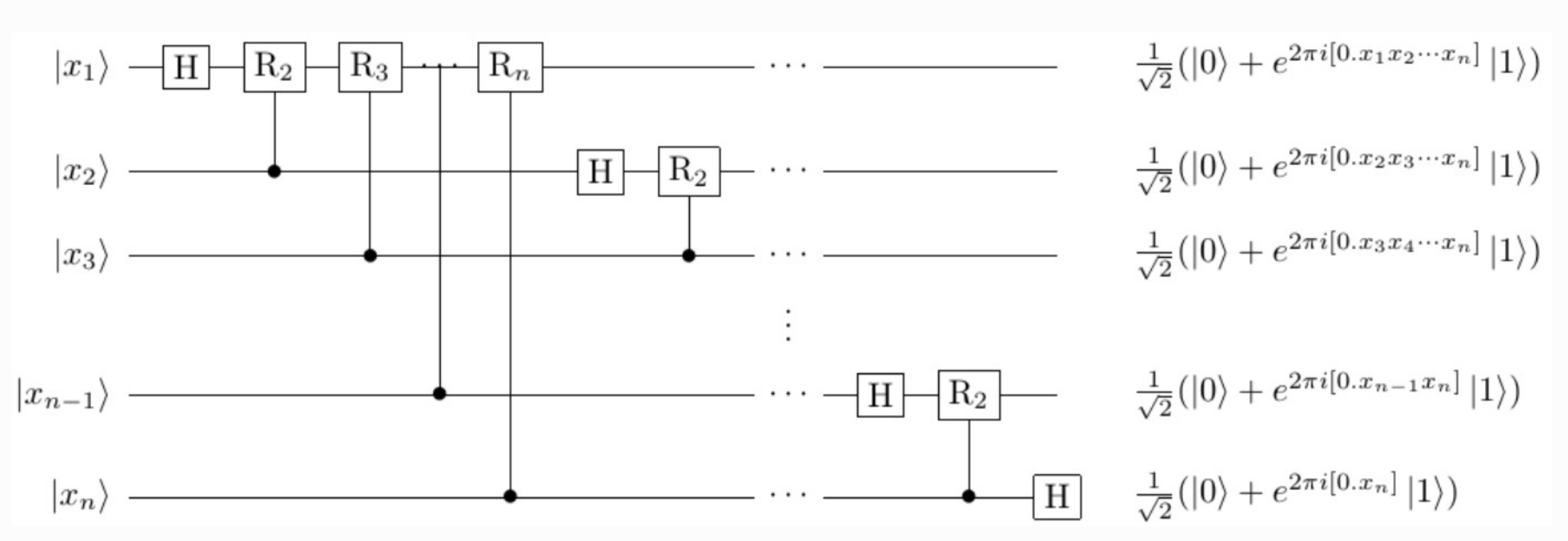
且定义受控旋转量子门$(\mathrm{Ctrl - R})_{\mathrm{j-k+1}}$ 满足：

$$(\mathrm{Ctrl - R})_{\mathrm{j-k+1}} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i[0.x_{n-j}]}|1\rangle\right)|x_{n-k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i[0.x_{n-j}0\dots 0x_{n-k}]}|1\rangle\right)$$

于是利用量子门H和$(\mathrm{C - R})_{\mathrm{j-k+1}}$ 就可以完成对量子态 $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{i2\pi x 2^{-l}}|1\rangle\right)$ 的制备，进而完成QFT的量子线路。

参考来源：https://pyqpanda-toturial.readthedocs.io/zh/latest/QFT.html

QFT的量子线路图



特别地，注意到上图中初始量子态为 $|x_i\rangle$ 的量子比特对应的结果量子态为 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi x2^{n+1-l}}|1\rangle)$ 而非 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi x2^{-l}}|1\rangle)$ 因此实际使用时还需要追加相应的多组 $SWAP$ 门。

参考来源：https://pyqpanda-toturial.readthedocs.io/zh/latest/QFT.html

Qubits
qubits.top

Thank You