量子计算

—数学基础

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

矩阵的指数函数

泰勒公式：

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

利用函数的幂级数定义矩阵 A 的函数，矩阵A的指数函数表示：

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

如果 A 是对角阵：

$A = diag(A_{11}, A_{22}, A_{33}, \ldots)$

则(证明略)：

$A^n = diag(A_{11}^n, A_{22}^n, A_{33}^n, \ldots)$

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

$$= diag\left(1 + \frac{A_{11}^1}{1!} + \frac{A_{11}^2}{2!} + \frac{A_{11}^3}{3!} + \cdots, 1 + \frac{A_{22}^1}{1!} + \frac{A_{22}^2}{2!} + \frac{A_{22}^3}{3!} + \cdots, \ldots\right)$$

$$= diag(e^{A_{11}}, e^{A_{22}}, e^{A_{33}} \ldots)$$

如果A不是对角阵，则可以通过幺正变换将其对角化 $\mathrm{D} = \mathrm{UAU}^\dagger$

矩阵的指数函数 – 例子

如果 A 是 2 X 2 对角阵： $A = \begin{bmatrix} a_0 & 0 \\ 0 & a_1 \end{bmatrix}$, a_0, a_1 为矩阵 A 的特征值。

则： $A^k = \begin{bmatrix} a_0^k & 0 \\ 0 & a_1^k \end{bmatrix}$

则：

$$e^A = I + \frac{A}{1!} + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \cdots + \frac{A^n}{n!} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_0 & 0 \\ 0 & a_1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2!}\begin{bmatrix} a_0^2 & 0 \\ 0 & a_1^2 \end{bmatrix} + \frac{1}{3!}\begin{bmatrix} a_0^3 & 0 \\ 0 & a_1^3 \end{bmatrix} + \ldots$$

由于：

$$|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

可得：

$$e^A = diag(e^{A11}, e^{A22}, e^{A33} \ldots) = \begin{bmatrix} e^{a_0} & 0 \\ 0 & e^{a_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{a_0} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & e^{a_1} \end{bmatrix} = e^{a_0}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + e^{a_1}\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = e^{a_0}|0\rangle\langle 0| + e^{a_1}|1\rangle\langle 1|$$

如果A为对角阵，容易根据特征值构造出矩阵指数函数形式。

生成元

泰勒公式：

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

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

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

根据上述公式：

$$\begin{aligned} \mathrm{U}(\varphi) &= e^{(-i\varphi A)} \\ &= \mathrm{I} + \frac{-i\varphi A}{1!} + \frac{(-i\varphi A)^2}{2!} + \frac{(-i\varphi A)^3}{3!} + \cdots + \frac{(-i\varphi A)^n}{n!} \\ &= \left(1 - \frac{\varphi^2}{2!} + \frac{\varphi^4}{4!} - \frac{\varphi^6}{6!} + \cdots + (-1)^n \frac{\varphi^{2n}}{(2n)!}\right) \mathrm{I} - \mathrm{i}\left(\varphi - \frac{\varphi^3}{3!} + \frac{\varphi^5}{5!} - \frac{\varphi^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{\varphi^{2n+1}}{(2n+1)!}\right) A \\ &= \cos(\varphi)\,\mathrm{I} - \mathrm{i}\sin(\varphi) A \end{aligned}$$

其中 $A^2 = \mathrm{I}$

这种表达形式称为以 A 为生成元生成的幺正变换（其对应的实数矩阵为正交矩阵，证明略）。

生成元 - 单位矩阵

单位矩阵 $\mathrm{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

以单位矩阵 I 作为生成元，则可以构建一种特殊的幺正变换：

$$\mathrm{U}(\varphi) = e^{(-i\varphi A)} = \begin{bmatrix} e^{-i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{bmatrix} = e^{-i\varphi} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = e^{-i\varphi}\ \mathrm{I}$$

它作用在单量子态上，相当于对整体乘以一个系数。这个系数称为量子态的整体相位。

分别用不同的泡利矩阵 X, Y ,Z 作为生成元，可以构成RX, RY, RZ，即 $\mathrm{R_x}(\theta)$, $\mathrm{R_y}(\theta)$, $\mathrm{R_z}(\theta)$ 逻辑门。

泡利矩阵

泡利矩阵 (Pauli matrices) 有时也被称作自旋矩阵 (spin matrices)。三个泡利矩阵表示的泡利算符代表着对量子态最基本的操作。泡利算符是**一组三个2x2的幺正厄米复矩阵**，一般都以希腊字母 σ (西格玛)来表示。
读作泡利 x，泡利 y，泡利 z。

$$X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad Y = \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad Z = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad \sigma_x \sigma_y = i\sigma_z \quad \sigma_y \sigma_z = i\sigma_x \quad \sigma_z \sigma_x = i\sigma_y$$

每个泡利矩阵有两个特征值，1 和 -1， 其对应的归一化特征向量为：

$$\psi_{x+} = |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \psi_{y+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} \quad \psi_{z+} = |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\psi_{x-} = |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad \psi_{y-} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \quad \psi_{z-} = |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

生成元 - 泡利矩阵

根据 $U(\theta) = e^{(-i\varphi A)} = \cos(\theta)\ I - i\sin(\theta)A$，可得：

$$R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)X$$

$R_x(\theta)$可将布洛赫球上的向量 **v** 绕 x 轴旋转 θ 角。

$$R_y(\theta) = e^{-i\theta Y/2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)Y$$

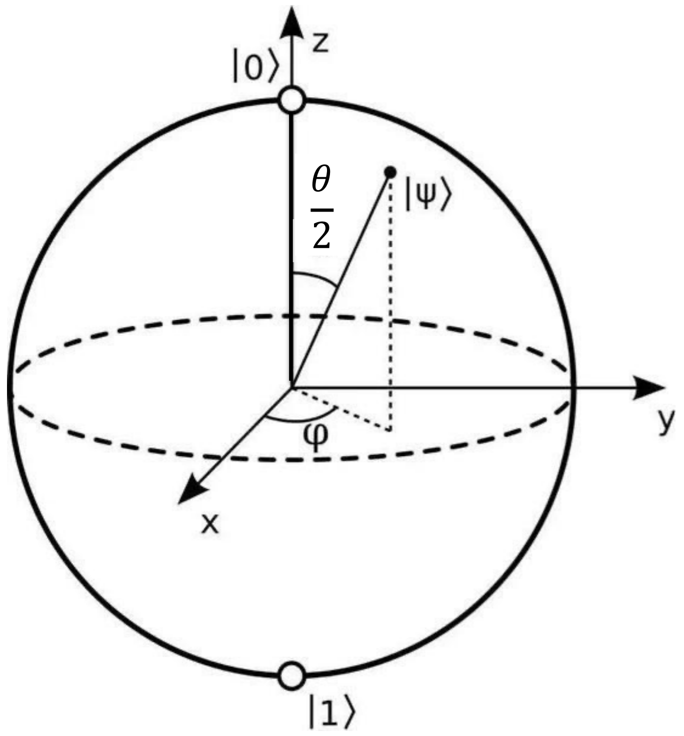
$R_y(\theta)$可将布洛赫球上的向量 **v** 绕 y 轴旋转 θ 角。

$$R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)Z$$

$R_z(\theta)$可将布洛赫球上的向量 **v** 绕 z 轴旋转 θ 角。

布洛赫球上的向量 **v**：

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\frac{\theta}{2}\cos\varphi \\ \sin\frac{\theta}{2}\sin\varphi \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}$$



旋转算符

$$X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad Y = \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad Z = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

由于 $X^2 = Y^2 = Z^2 = I$ 则有：

$$R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)X$$
$$= \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{bmatrix}$$

$$R_y(\theta) = e^{-i\theta Y/2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)Y$$
$$= \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{bmatrix}$$

$$R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)Z$$
$$= \begin{bmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{bmatrix} = e^{-i\theta/2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix}$$

由于$e^{-i\theta/2}$ 是一个整体相位，只考虑单门，则可以省略该参数。于是，RZ门矩阵可简写为：

$$R_z(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix}$$

密度算符(矩阵)

1. 对于纯态（连接球心和球面上的点形成的一个矢量）量子态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$，其密度矩阵为：

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\bar{\alpha} & \bar{\beta}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\alpha\bar{\alpha} & \alpha\bar{\beta}\\ \beta\bar{\alpha} & \beta\bar{\beta}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}|\alpha|^2 & \alpha\bar{\beta}\\ \beta\bar{\alpha} & |\beta|^2\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix}x\\ y\\ z\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\cos\varphi\\ \sin\frac{\theta}{2}\sin\varphi\\ \cos\frac{\theta}{2}\end{bmatrix}$$

其中 $\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger$ ，且矩阵迹为：$\mathrm{tr}(\rho) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

2. 而对于如下量子态表达式：

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

则有：

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{bmatrix}\cos^2\frac{\theta}{2} & e^{-i\varphi}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\\ e^{i\varphi}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} & \sin^2\frac{\theta}{2}\end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1+\cos\theta & \cos\varphi\sin\theta - i\sin\varphi\sin\theta\\ \cos\varphi\sin\theta + i\sin\varphi\sin\theta & 1-\cos\theta\end{bmatrix}$$

密度矩阵有以下的性质:

- ✓ 对于一个两能级体系表述的态，不论是纯的还是混合的，都可以用密度矩阵 ρ 表示 。$\rho = \rho^2$ 当且仅当量子态时纯态时成立。
- ✓ ρ 对角线上的分量表示整个系统如果经历一次测量，可以得到这个态的概率。

密度算符（矩阵）

由于：

$$\mathrm{I} = \sigma_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \mathrm{X} = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathrm{Y} = \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \mathrm{Z} = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

则有：

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1+\cos\theta & \cos\varphi\sin\theta - i\sin\varphi\sin\theta \\ \cos\varphi\sin\theta + i\sin\varphi\sin\theta & 1-\cos\theta \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \cos\varphi\sin\theta \\ \cos\varphi\sin\theta & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -i\sin\varphi\sin\theta \\ -i\sin\varphi\sin\theta & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 \\ 0 & -\cos\theta \end{bmatrix}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \cos\varphi\sin\theta\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \sin\varphi\sin\theta\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} + \cos\theta\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\right)$$

$$= \frac{1}{2}(\mathrm{I} + r_x\mathrm{X} + r_y\mathrm{Y} + r_z\mathrm{Z})$$

$$= \frac{1}{2}(\mathrm{I} + \vec{r}\cdot\vec{\sigma})$$

其中 $\vec{v} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{bmatrix}$ 布洛赫球上的单位向量，$\vec{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix}$ 泡利矩阵组成的三维向量

如果以 $\{I, \mathrm{X}, \mathrm{Y}, \mathrm{Z}\}$ 为基，则 ρ 与四元数同构。

密度算符（矩阵）

酉（幺正）变换是一种矩阵，它作用在量子态上得到的是一个新的量子态。 使用 U 来表达酉矩阵，$U^\dagger$ 表示酉矩阵的转置共轭矩阵，二者满足运算关系 $U^\dagger U = UU^\dagger = \mathrm{I}$。

一般酉变换在量子态上的作用是变换矩阵左乘右矢进行计算的。如开始量子态 $|\psi_0\rangle$ ，则状态的变换为一个 U 矩阵，变换后得到：

$$|\psi\rangle = U|\psi_0\rangle$$

通过酉变换表示密度矩阵的演化：

$$\rho_0 = |\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle \otimes (|\psi\rangle)^\dagger$$

$$\begin{aligned}\rho &= (U|\psi\rangle) \otimes (U|\psi\rangle)^\dagger \\ &= (U|\psi\rangle) \otimes (\langle\psi|U^\dagger) \\ &= U|\psi\rangle\langle\psi|U^\dagger \\ &= U\rho_0 U^\dagger\end{aligned}$$

$\mathrm{R_z}(\theta)$ - 绕 Z 轴旋转 θ 角

通过酉变换 $\mathrm{R_z}(\theta)$ 表示密度矩阵的演化：

$$
\begin{aligned}
\rho \ &= \mathrm{R_z}(\theta)\rho_0\mathrm{R_z}(\theta)^\dagger \\
&= \mathrm{R_z}(\theta)\frac{1}{2}(\mathrm{I} + \vec{v} \cdot \vec{\sigma})\mathrm{R_z}(\theta)^\dagger \\
&= \mathrm{R_z}(\theta)\frac{1}{2}(\mathrm{I} + v_x\mathrm{X} + v_y\mathrm{Y} + v_z\mathrm{Z})\mathrm{Rz}(\theta)^\dagger \\
&= \frac{1}{2}(\mathrm{I} + v_x\mathrm{R_z}(\theta)\mathrm{X}\mathrm{Rz}(\theta)^\dagger + v_y\mathrm{R_z}(\theta)\mathrm{Y}\mathrm{Rz}(\theta)^\dagger + v_z\mathrm{R_z}(\theta)\mathrm{Z}\mathrm{Rz}(\theta)^\dagger)
\end{aligned}
$$

其中 $\vec{v} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{bmatrix}$ 布洛赫球上的单位向量，$\vec{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix}$ 泡利矩阵组成的三维向量

$R_z(\theta)$ - 绕 Z 轴旋转 θ 角

$$R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)Z$$

$$X^2 = Y^2 = Z^2 = -iXYZ = I$$
$$XY = -YX = iZ$$
$$YZ = -ZY = iX$$
$$ZX = -XZ = iY$$

$$\begin{aligned}
R_z(\theta)XRz(\theta)^\dagger &= \left(\cos\frac{\theta}{2}I - i\sin\frac{\theta}{2}Z\right)X\left(\cos\frac{\theta}{2}I + i\sin\frac{\theta}{2}Z\right)\\
&= \cos^2\frac{\theta}{2}X + i\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}XZ - i\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}ZX + \sin^2\frac{\theta}{2}ZXZ\\
&= \cos^2\frac{\theta}{2}X + \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}Y + \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}Y - \sin^2\frac{\theta}{2}X\\
&= \left(\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}\right)X + 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}Y\\
&= \cos\theta\, X + \sin\theta\, Y
\end{aligned}$$

同样的计算可得：

$$R_z(\theta)YRz(\theta)^\dagger = \cos\theta\, Y - \sin\theta\, X$$
$$R_z(\theta)ZRz(\theta)^\dagger = Z$$

$R_z(\theta)$ - 绕 Z 轴旋转 θ 角

于是有：

$$\rho = \frac{1}{2}(I + v_x R_z(\theta) X Rz(\theta)^\dagger + v_y R_z(\theta) Y Rz(\theta)^\dagger + v_z R_z(\theta) Z Rz(\theta)^\dagger)$$
$$= \frac{1}{2}(I + v_x(\cos\theta\, X + \sin\theta\, Y) + v_y(\cos\theta\, Y - \sin\theta\, X) + v_z Z)$$
$$= \frac{1}{2}(I + (v_x \cos\theta - v_y \sin\theta) + (v_x \sin\theta + v_y \cos\theta)Y + v_z Z)$$

因为：

$$\rho' = \frac{1}{2}(I + v'_x X + v'_y Y + v'_z Z)$$
$$= \frac{1}{2}(I + \overrightarrow{v'} \cdot \vec{\sigma})$$

于是有：

$$v'_x X = v_x \cos\theta - v_y \sin\theta$$
$$v'_y Y = v_x \sin\theta + v_y \cos\theta$$
$$v'_z Z = v_z$$

$R_z(\theta)$ - 绕 Z 轴旋转 θ 角

于是有：

$$\begin{aligned} v'_x X &= v_x \cos\theta - v_y \sin\theta \\ v'_y Y &= v_x \sin\theta + v_y \cos\theta \\ v'_z Z &= v_z \end{aligned}$$

绕 z 轴旋转 θ 角矩阵

$$\vec{v'} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \vec{v}$$

其中 $\vec{v} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{bmatrix}$ 布洛赫球上的单位向量， $\vec{v'}$ 为 $\vec{v}$ 绕 z 轴旋转 θ 角后的向量

同样的方法可证：

$R_x(\theta)$ 为绕 x 轴旋转 θ 角矩阵

$R_y(\theta)$ 为绕 y 轴旋转 θ 角矩阵

Thank You