

# 量子计算

## —数学基础

# Quantum Computing

网址: [www.qubits.top](http://www.qubits.top)

作者: Calvin Tang

邮箱: [179209347@qq.com](mailto: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](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，或者大学授课使用
- 禁止用于任何商业用途

## 酉（么正）变换性质

$$1. UU^\dagger = U^\dagger U = I \Rightarrow U^\dagger = U^{-1}$$

2. 如果：  $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$  是么正矩阵，对于所有的  $v, w \in \mathbb{C}^n$

$$\langle Uv, Uw \rangle = \langle v, w \rangle \quad \langle Uv, w \rangle = \langle v, U^\dagger w \rangle$$

$$\text{证明：} \langle Uv, Uw \rangle = (Uv)^\dagger (Uw) = v^\dagger U^\dagger U w = v^\dagger I w = \langle v, w \rangle$$

3. 如果：  $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$  是么正矩阵，对于所有的  $v \in \mathbb{C}^n$

$$\|Uv\| = \|v\|$$

$$\text{证明：} \|Uv\| = \sqrt{\langle Uv, Uv \rangle} = \sqrt{\langle v, v \rangle} = \|v\|$$

4. 如果：  $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$  是么正矩阵，对于所有的  $v, w \in \mathbb{C}^n$

$$d(Uv, Uw) = d(v, w)$$

$$\text{证明：} d(Uv, Uw) = |Uv - Uw| = |U(v - w)| = |v - w| = d(v, w)$$

## 酉 ( 么正 ) 变换性质

$$5. \langle Uv, Uv \rangle = \langle v, U^\dagger U v \rangle = \langle v, v \rangle = \|v\|^2$$

6. 如果：  $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$  是么正矩阵，存在另一个么正矩阵  $V$ , 和么正对角阵  $D \in \mathbb{C}^{n \times n}$

$$U = V^\dagger D V$$

$$D = V U V^\dagger$$

# 狄拉克符号

$$\langle v| = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}^\dagger = [\bar{v}_1 \quad \bar{v}_2 \quad \dots \quad \bar{v}_n]$$

$$|w\rangle = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix}$$

$$|w\rangle\langle v| = \begin{bmatrix} w_1\bar{v}_1 & \dots & w_1\bar{v}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_m\bar{v}_1 & \dots & w_m\bar{v}_n \end{bmatrix}$$

$$\langle v|w\rangle = \langle v||w\rangle = (\langle v|)(|w\rangle)$$

当  $n = m$  时：

$$\langle v|w\rangle = \langle v, w\rangle = \bar{v}_1 w_1 + \bar{v}_2 w_2 + \dots + \bar{v}_n w_n$$

$v$  的长度为：

$$\|v\| = \sqrt{\langle v, v\rangle}$$



# 共轭

$$[v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n]^\dagger = \begin{bmatrix} \bar{v}_1 \\ \bar{v}_2 \\ \dots \\ \bar{v}_n \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_n \end{bmatrix}^\dagger = [\bar{v}_1 \ \bar{v}_2 \ \dots \ \bar{v}_n]$$

$$(vu)^* = u^*v$$

$$(u + v)^* = u^* + v^*$$

$$(\lambda u)^* = \bar{\lambda} u^*$$

$$(y|ux) = (u^*y|x)$$

$$||u|| = ||u^*||$$

$$||u||^2 = ||u^*u|| = ||uu^*||$$

# 厄米共轭算符公式

给定一个线性算符  $A$ ，它的厄米共轭算符（转置共轭）定义为：

$$\langle u|A|v\rangle = \langle A^\dagger u|v\rangle = \langle v|A^\dagger|u\rangle^* \quad A^\dagger = (A^*)^T$$

由上述定义可得：

$$\langle e_j|A|e_k\rangle = \langle e_k|A^\dagger|e_j\rangle^*$$

于是有：

$$(c^\dagger)_{jk} = c^*_{kj}$$

根据上述定义，可得：

$$|x\rangle^\dagger = (x_1^*, \dots, x_n^*) = \langle x|$$

$$(\sum_i a_i A_i)^\dagger = \sum_i a_i^* A_i^\dagger \quad (cA)^\dagger = c^* A^\dagger \quad (A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$(A|v\rangle)^\dagger = \langle v|A^\dagger \quad (|u\rangle\langle v|)^\dagger = |v\rangle\langle u|$$

$$||\langle u|A|v\rangle||^2 = \langle u|A|v\rangle \langle v|A^\dagger|u\rangle$$

## 厄米共轭算符公式

$$(A + B)^T = A^T + B^T$$

$$(A - B)^T = A^T - B^T$$

$$(-A)^T = -A^T$$

$$(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$$

$$(A - B)^\dagger = A^\dagger - B^\dagger$$

$$(-A)^\dagger = -A^\dagger$$



## 矩阵的迹

$$\text{tr}(A + B) = \text{tr}(A) + \text{tr}(B)$$

$$\text{tr}(dA) = d \text{tr}(A)$$

$$\text{tr}(-A) = -\text{tr}(A)$$

$$\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$$

$$\text{tr}(ABC) = \text{tr}(CAB) = \text{tr}(BCA)$$

对于方阵：

$$\text{tr}(A) = \text{tr}(A^T)$$

$$\text{tr}(\bar{A}) = \text{tr}(A^\dagger) = \overline{\text{tr}(A)}$$

## 矩阵的直和

$$v = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n]$$

$$w = [w_1 \ w_2 \ \dots \ w_n]$$

$$v \oplus w = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n, w_1 \ w_2 \ \dots \ w_n]$$

# 张量积 ( tensor product )

张量积是两个或多个向量空间张成一个更大向量空间的运算。

在量子力学中，**量子的状态**由希尔伯特空间 (Hilbert spaces) 中的**单位向量**来描述。

本质上复合系统中量子态的演化也是矩阵的乘法，其与单个子系统相比，只是多了张量积的运算。

$$|00\rangle = |0, 0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ 0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |01\rangle = |0, 1\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ 0 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$|10\rangle = |1, 0\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ 1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |11\rangle = |1, 1\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ 1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

## 张量积 – 重要公式

$$1. A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C, \quad |a\rangle \otimes (|b\rangle + |c\rangle) = |a\rangle \otimes |b\rangle + |a\rangle \otimes |c\rangle$$

$$2. (A + B) \otimes C = A \otimes C + B \otimes C, \quad (|a\rangle + |b\rangle) \otimes |c\rangle = |a\rangle \otimes |c\rangle + |b\rangle \otimes |c\rangle$$

$$3. z(|a\rangle \otimes |b\rangle) = (z|a\rangle) \otimes |b\rangle = |a\rangle \otimes (z|b\rangle) \quad z \text{ 为标量}$$

$$4. (A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger \quad (A \otimes B)^* = A^* \otimes B^*$$

$$5. (A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1} \quad (A \otimes B)^T = A^T \otimes B^T$$

$$6. \text{tr}(A \otimes B) = \text{tr}(A) \text{tr}(B)$$

$$7. \det(A \otimes B) = (\det A)^p (\det B)^m$$

## 张量积 – 重要公式

1. 不同子空间的张量积的矩阵乘，相当于各自子空间下的矩阵乘，再把结果张量积。

$$① \quad (A \otimes B) (C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$$

$$② \quad (A_1 \otimes B_1) (A_2 \otimes B_2) (A_3 \otimes B_3) = (A_1 A_2 A_3) \otimes (B_1 B_2 B_3)$$

$$③ \quad (|a\rangle\langle b|) \otimes (|c\rangle\langle d|) = (|a\rangle \otimes |c\rangle)(\langle b| \otimes \langle d|) = |ac\rangle\langle bd| \quad (\text{公式1逆向狄拉克符号写法})$$

$$④ \quad (A \otimes B) (|x\rangle \otimes |y\rangle) = A |x\rangle \otimes B |y\rangle$$

$$⑤ \quad (A \otimes B) (\sum_i c_i |x_i\rangle \otimes |y_i\rangle) = \sum_i c_i A |x_i\rangle \otimes B |y_i\rangle$$

$$⑥ \quad (\sum_i c_i A_i \otimes B_i) (|x\rangle \otimes |y\rangle) = \sum_i c_i A_i |x\rangle \otimes B_i |y\rangle$$

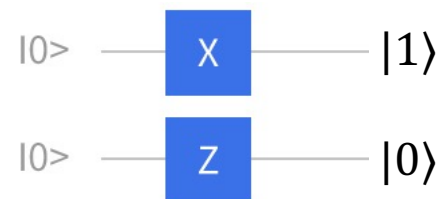
$$2. \quad H^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x,y} (-1)^{x \cdot y} |x\rangle\langle y| \quad (H|0\rangle)^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle$$

## 张量积 – 例子

例如，复合系统 H 由两能级系统 H1 和 H2 复合而成，

在 t1 时刻，两个系统的状态都为  $|0\rangle$ ，则复合系统的状态为  $|00\rangle$ ；

在 t2 时刻，第一个系统经过 X 门，状态变为  $|1\rangle$ ，第二个系统经过 Z 门，状态为  $|0\rangle$ ，那么复合系统的状态经过的变换用矩阵运算表示为：



因为： $X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$      $Z = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

所以： $X \otimes Z = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} & 1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\ 1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} & 0 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

则有： $X \otimes Z |00\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |10\rangle$

# 三角函数公式

两角和与差的三角函数公式：

$$\sin(\alpha \pm \beta) = \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta$$

$$\cos(\alpha \pm \beta) = \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta$$

$$\sin(2\theta) = 2\sin \theta \cos \theta$$

$$\cos(2\theta) = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta = 2\cos^2 \theta - 1 = 1 - 2\sin^2 \theta$$





Thank

You