

# 量子计算 —基础篇

# Quantum Computer

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

Calvin Tang

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/quantum\\_quest](https://github.com/mymagicpower/quantum_quest)

[https://gitee.com/mymagicpower/quantum\\_quest](https://gitee.com/mymagicpower/quantum_quest)

## \* 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

# 从线性运算说起

线性运算是**加法**和**数量乘法**，在实数域像只包含加法和数量乘法二元一次方程就属于线性运算，如：

$$y = ax + b$$

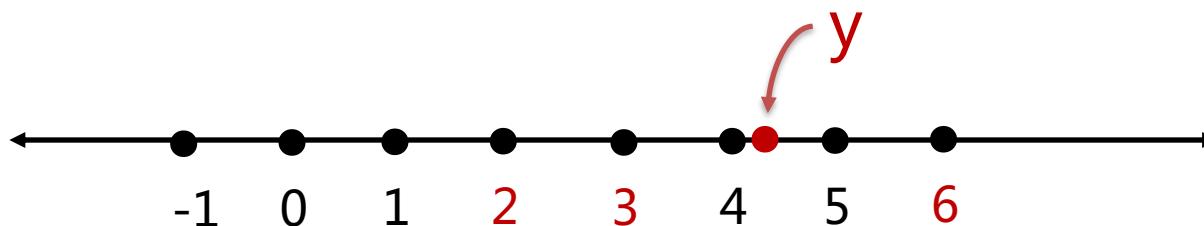
矩阵的线性运算：矩阵的加法和数乘运算

向量的线性运算：向量的加法和数乘运算

它们满足交换律、结合律、分配律等。

对于一个实数轴而言，任意多个实数的线性组合仍然是实数，即其仍在实数轴上，如：

$$y = a_0x_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n$$

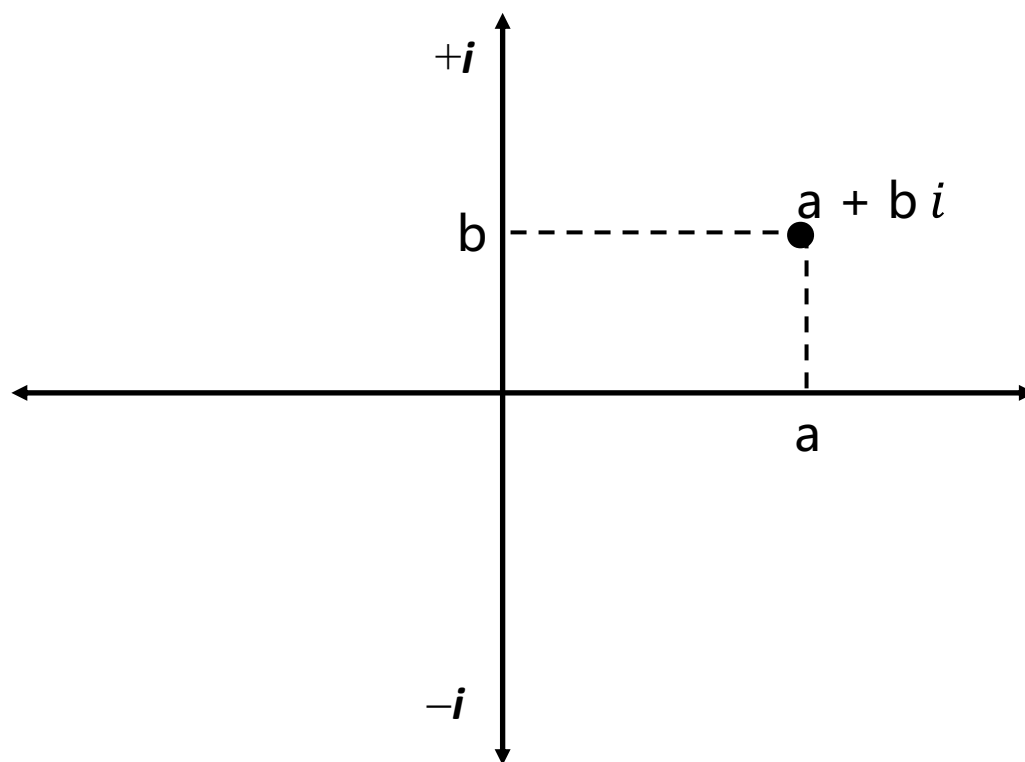


$$y = 1 * 2 + 0.5 * 3 + 0.1 * 6 = 2 + 1.5 + 0.6 = 4.1$$

# 复平面

对于虚数  $i$ ，我们无法在实数轴上线性运算获得，也就是说**与实数线性无关**。而线性无关意味着虚数  $i$  在与实数轴垂直的一个数轴上：

对于复数  $a + b i$ ，其在复平面里的坐标表示如下：

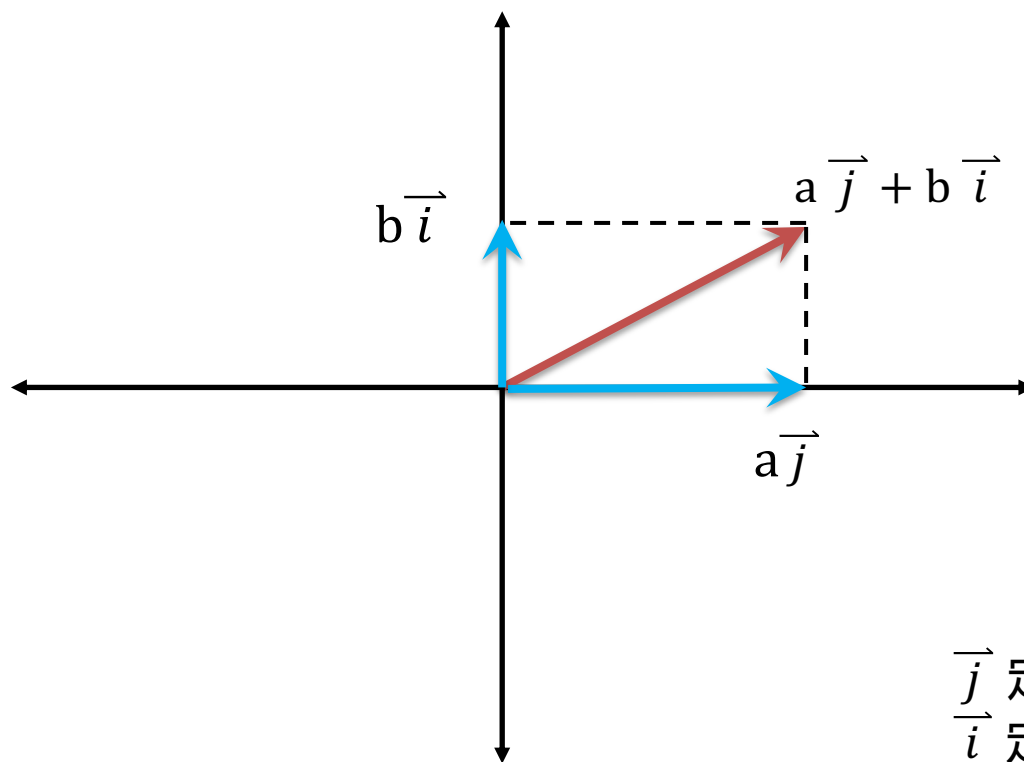




# 复数向量表示

如果我们用向量来理解的话，复数  $a + b i$  可以表示为，向量  $a \vec{j}$  和  $b \vec{i}$  的线性组合：  

$$a \vec{j} + b \vec{i}$$



$\vec{j}$  定义为实数轴单位向量，单位长度为 1  
 $\vec{i}$  定义为虚数轴单位向量，单位长度为  $i$

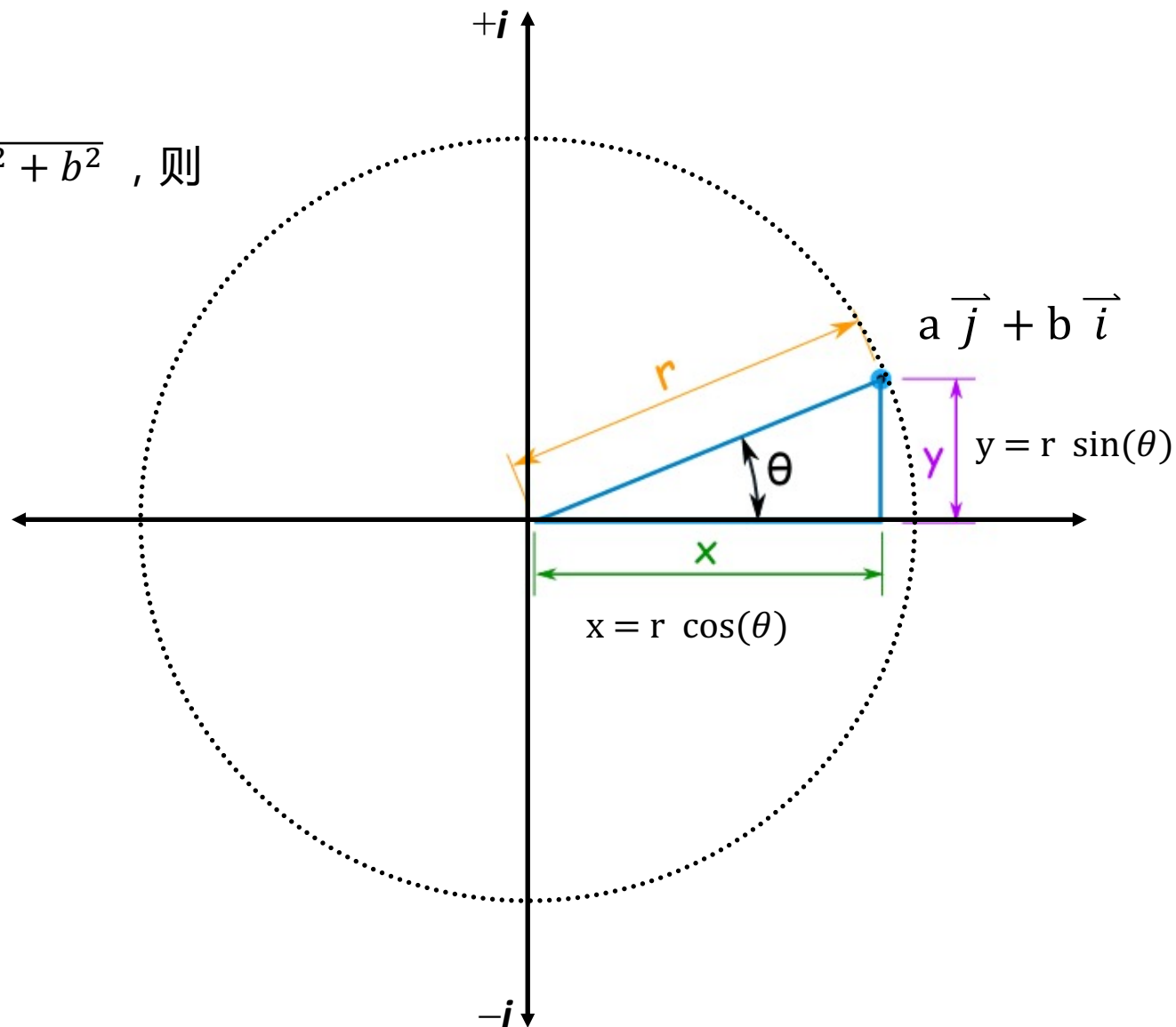
# 复数向量三角函数表示

如右图所示，如果将向量长度定义为  $r$ ，且  $r = \sqrt{a^2 + b^2}$ ，则根据三角函数有：

- $a = r \cos(\theta)$
- $b = r \sin(\theta)$

那么复数  $c = a + b i$  可以表示为：  
 $r(\cos(\theta) + i \sin(\theta))$

向量  $a \vec{j} + b \vec{i}$  可以表示为：  
 $r \cos(\theta) \vec{j} + r \sin(\theta) \vec{i}$



## 欧拉公式证明 ( 1/2 )

泰勒公式：

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

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

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

由公式3，用ix代入x

$$e^{ix} = 1 + \frac{ix}{1!} + \frac{(ix)^2}{2!} + \frac{(ix)^3}{3!} + \cdots + \frac{(ix)^n}{n!}$$

## 欧拉公式证明 ( 2/2 )

代入虚数  $i$ :  $i^0 = 1, i^1 = i, i^2 = -1, i^3 = -i \dots i^{2n} = (-1)^n, i^{2n+1} = (-1)^n i$

$$\begin{aligned} e^{ix} &= 1 + \frac{ix}{1!} - \frac{x^2}{2!} - \frac{ix^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{ix^5}{5!} - \frac{x^6}{6!} - \frac{ix^7}{7!} + \dots + \frac{i^{2n}x^{2n}}{(2n)!} + \frac{i^{2n+1}x^{2n+1}}{(2n+1)!} \\ &= 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} + i(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}) \\ &= \cos(x) + i \sin(x) \end{aligned}$$

由此可得欧拉公式：

$$e^{i\theta} = \cos(\theta) + i \sin(\theta)$$

$\theta$  取  $\pi$  时，可得欧拉恒等式：

$$e^{i\pi} = -1$$



# 虚数 $i$ 与实数关系 – 复数加法的几何意义

复数：

$$c_1 = a + b i = a \vec{j} + b \vec{i}$$

$$c_2 = c + d i = c \vec{j} + d \vec{i}$$

令：

$$c_1 = 1 + 3 i = 1 \vec{j} + 3 \vec{i}$$

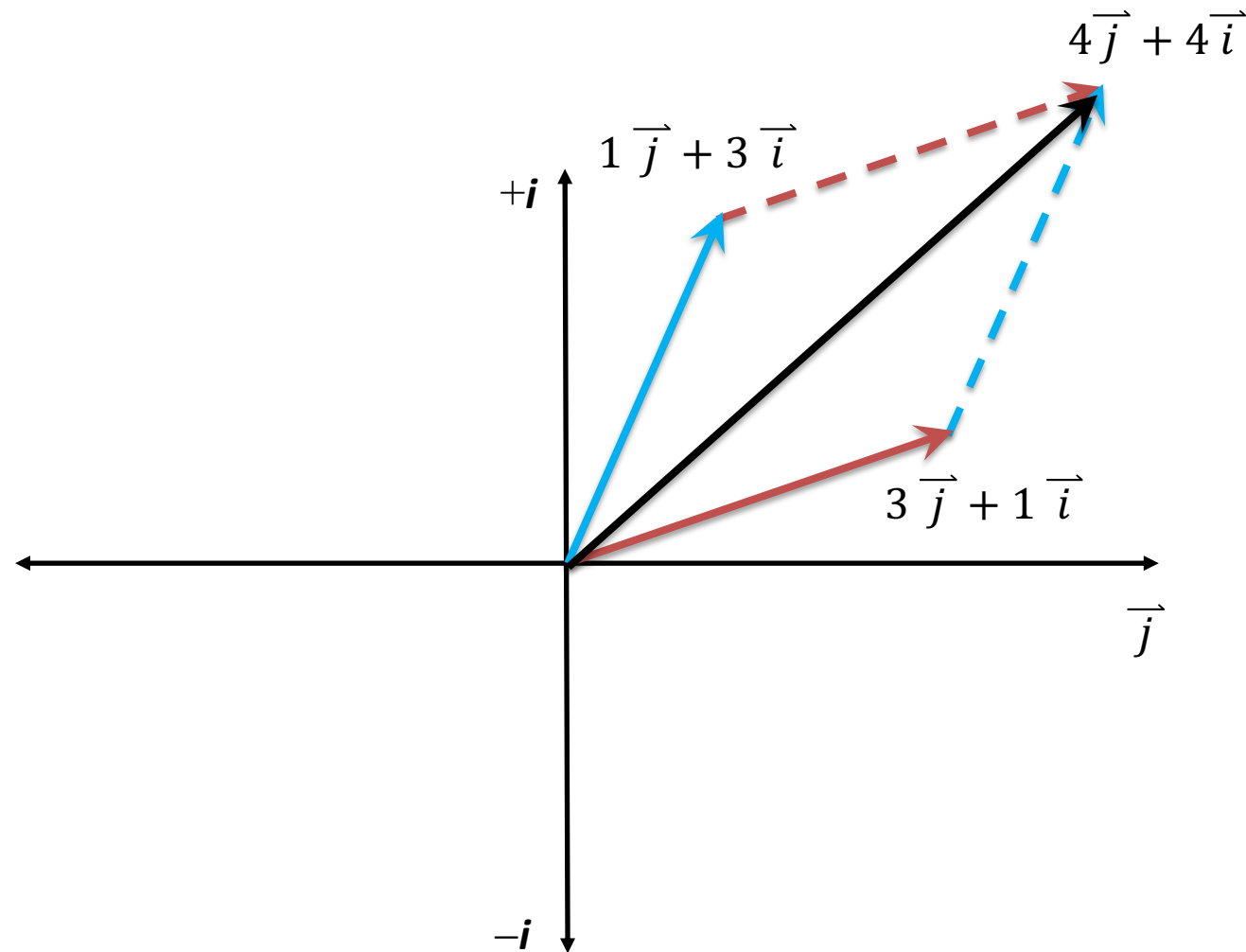
$$c_2 = 3 + i = 3 \vec{j} + 1 \vec{i}$$

$$\begin{aligned} \text{则 } c_3 &= c_1 + c_2 \\ &= (a+c) \vec{j} + (b+d) \vec{i} \\ &= 4 \vec{j} + 4 \vec{i} \end{aligned}$$

复数加法的几何意义可以概括为：

**平行四边形法则**

结果为两个复数向量形成的平行四边形的对角线



## 虚数 $i$ 与实数关系 – 向量旋转

根据欧拉公式：

$$e^{i\theta} = \cos(\theta) + i \sin(\theta)$$

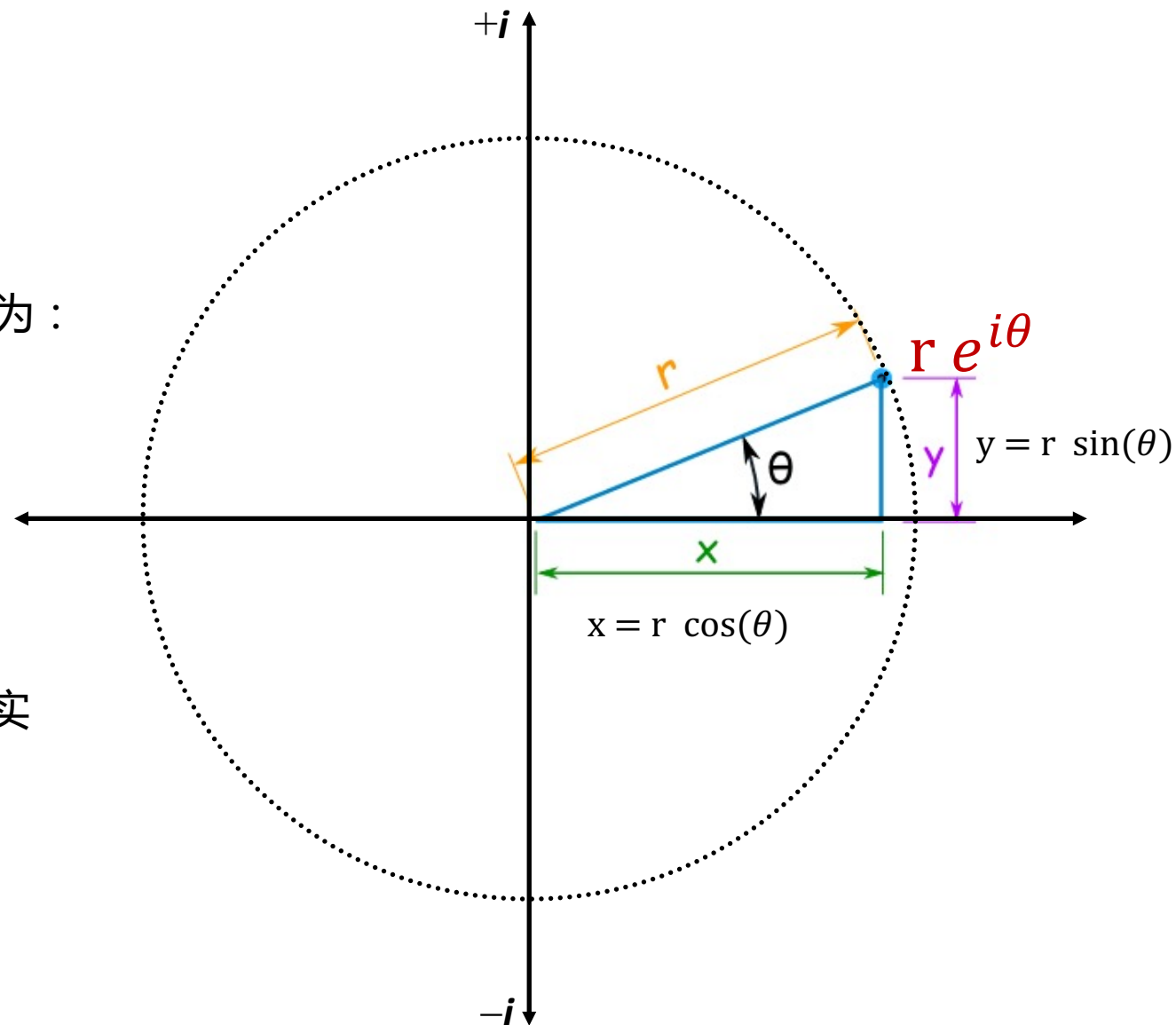
复数  $c = a + b i$  即  $r(\cos(\theta) + i \sin(\theta))$  可以表示为：

$$c = r e^{i\theta}$$

$\theta = 0$  时,  $c = r e^{i\theta} = r e^0 = r$

根据图形可知：

复数  $c = a + b i$  即  $r(\cos(\theta) + i \sin(\theta))$  可以理解为实数轴上长度为  $r$  的向量逆时针旋转  $\theta$  角得到。



# 虚数 $i$ 与实数关系 – 复数乘法的几何意义

复数  $c_1 = a + bi$  :

➤  $c_1 = r_1(\cos(\theta_1) + i \sin(\theta_1))$

➤  $c_1 = r_1 e^{i\theta_1}$

复数  $c_2 = c + di$  :

➤  $c_2 = r_2(\cos(\theta_2) + i \sin(\theta_2))$

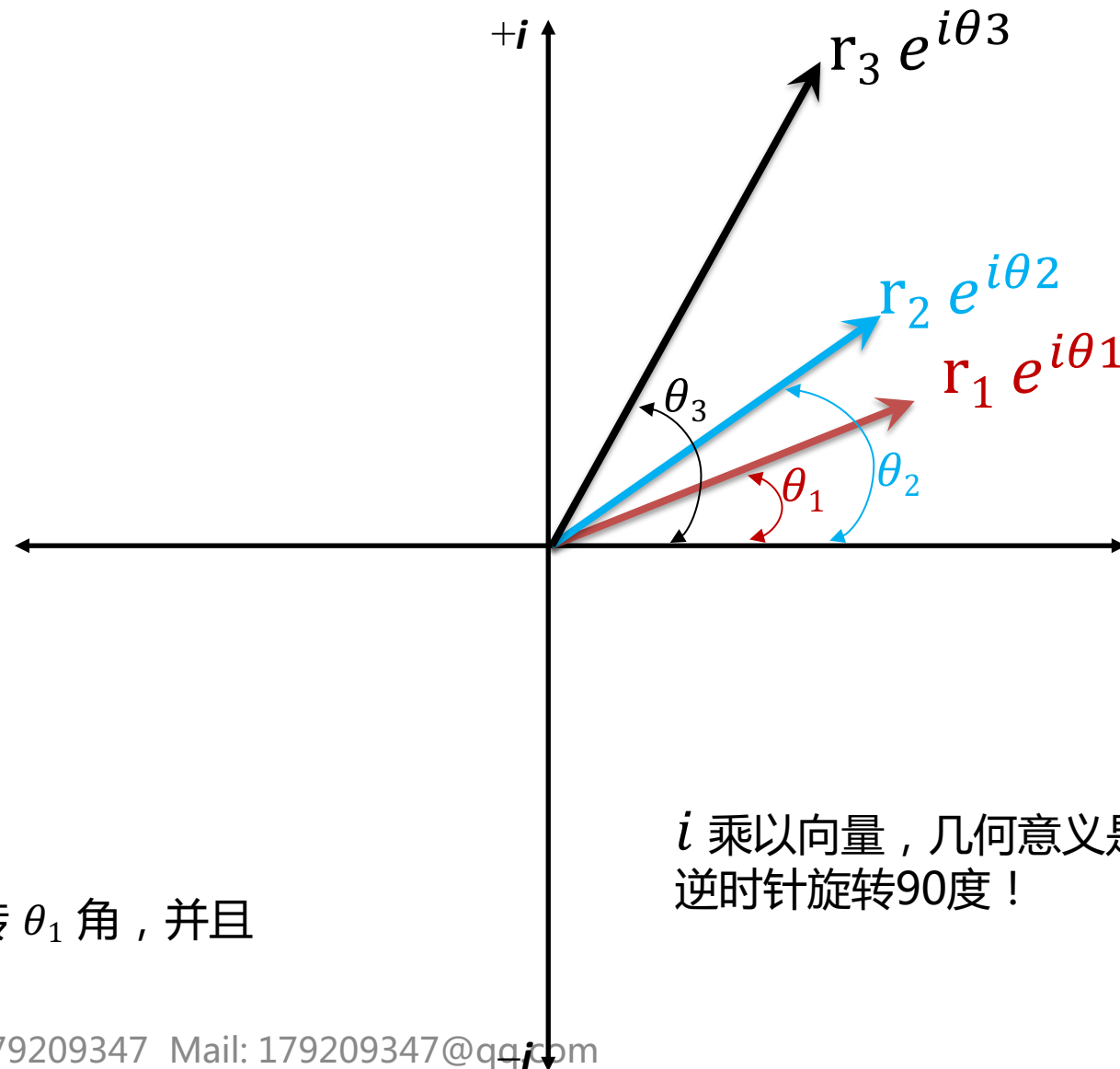
➤  $c_2 = r_2 e^{i\theta_2}$

$$\begin{aligned} \text{复数 } c_1 * c_2 &= r_1 e^{i\theta_1} * r_2 e^{i\theta_2} \\ &= r_1 r_2 e^{i(\theta_1 + \theta_2)} \\ &= r_3 e^{i\theta_3} \end{aligned}$$

根据上面的计算过程可知**复数乘法几何意义**：  
**旋转缩放**

$$c_3 = c_1 * c_2 = r_1 r_2 e^{i(\theta_1 + \theta_2)}$$

可以理解为  $c_1$  作用于  $c_2$ ，将复数  $c_2$  向量逆时针旋转  $\theta_1$  角，并且长度进行缩放，缩放系数为  $r_1$ 。



$i$  乘以向量，几何意义是逆时针旋转90度！

# 单量子比特

一个量子比特 $|\psi\rangle$ 可以同时处于  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  两个状态，可用线性代数中的线性组合(linear combination)来表示为：

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$$

$|\psi\rangle$  狄拉克符号 ket

在量在此处键入公式。子力学中常称量子比特 $|\psi\rangle$ 处于  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  的叠加态(superpositions)，其中 $\alpha$ 、 $\beta$ 都是复数(complex number)，满足归一化条件  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 。  
两维复向量空间的一组标准正交基(orthonormal basis)  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  组成一组计算基(computational basis)。

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

量子比特的信息不能直接获取，而是通过测量来获取量子比特的可观测的信息。可观测量在量子理论中由自伴算子(self-adjoint operators)来表征，自伴的有时也称 Hermitian。量子理论中的可观测量与经典力学中的动力学量，如位置、动量和角动量等对应，而系统的其他特征，如质量或电荷，并不在可观测量的类别之中，它是作为参数被引入到系统的哈密顿量(Hamiltonian)。

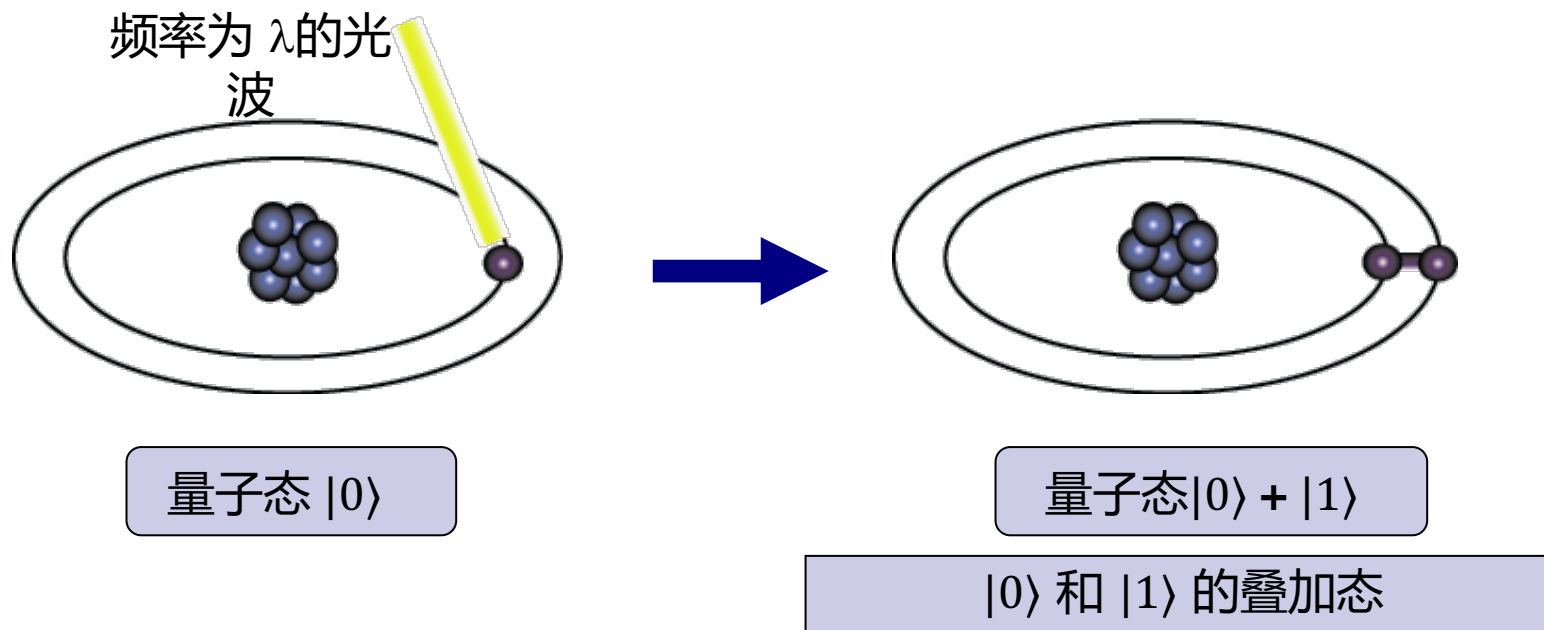
# 叠加态

单量子比特可以制备成叠加态：

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$$

其中的  $\alpha$  和  $\beta$  是复数，并且  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 。

$\alpha$ ， $\beta$  分别代表了从叠加态塌缩到  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  态的概率。 $\alpha$ ， $\beta$  被称为概率振幅。



# 单量子比特

由于一个量子比特  $|\psi\rangle$  线性代数中的线性组合来表示为：

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

且  $\alpha$ 、 $\beta$  都是复数，那么有：

$$\alpha = a + b i = r_1(\cos(\theta_1) + i \sin(\theta_1))$$

$$\beta = c + d i = r_2(\cos(\theta_2) + i \sin(\theta_2))$$

由于  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  两个状态正交（线性无关），那么我们可以定义两个垂直关系的坐标轴  $j$ ,  $k$  分别表示  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$ 。

那么有：

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \\ &= \alpha \overrightarrow{j} + \beta \overrightarrow{k} \\ &= (a + b i) \overrightarrow{j} + (c + d i) \overrightarrow{k} \end{aligned}$$



# 单量子态布洛赫球 (Bloch Sphere) 几何表示

- 单量子态的几何（两个基向量的线性组合）表示：

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle$$

$$c_0 = r_0(\cos(\varphi_0) + i \sin(\varphi_0)) = r_0 e^{i\varphi_0}$$

$$c_1 = r_1(\cos(\varphi_1) + i \sin(\varphi_1)) = r_1 e^{i\varphi_1}$$

$|0\rangle$  代表  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$      $|1\rangle$  代表  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$

- 4个实数（两个实质上的自由度）：

$$|\psi\rangle = r_0 e^{i\varphi_0} |0\rangle + r_1 e^{i\varphi_1} |1\rangle$$

- 为什么实质上只有2个自由度呢？

$$|\psi\rangle = r_0 e^{i\varphi_0} |0\rangle + r_1 e^{i\varphi_1} |1\rangle = e^{i\varphi_0} (r_0 |0\rangle + r_1 e^{i(\varphi_1 - \varphi_0)} |1\rangle)$$

由于  $e^{i\varphi_0}$ （共同相位）对  $|0\rangle$ 、 $|1\rangle$  影响都一样，即不改变量子态，且在实验上无法测量，所以公式简化为：

$$|\psi\rangle = r_0 |0\rangle + r_1 e^{i(\varphi_1 - \varphi_0)} |1\rangle = r_0 |0\rangle + r_1 e^{i\varphi} |1\rangle$$

并且由于  $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$

$$r_0 = \cos(\theta)$$

$$r_1 = \sin(\theta)$$

\* 注意  $|e^{i\varphi_1}|^2$  是复数模运算

$$|r_0 e^{i\varphi_0}|^2 + |r_1 e^{i\varphi_1}|^2 = r_0^2 |e^{i\varphi_0}|^2 + r_1^2 |e^{i\varphi_1}|^2 = r_0^2 + r_1^2 = 1$$

最终可得： $|\psi\rangle = r_0 |0\rangle + r_1 e^{i\varphi} |1\rangle = \cos(\theta) |0\rangle + \sin(\theta) e^{i\varphi} |1\rangle$

\* 即得到布洛赫球公式

# 单量子态布洛赫球 (Bloch Sphere) 几何表示

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

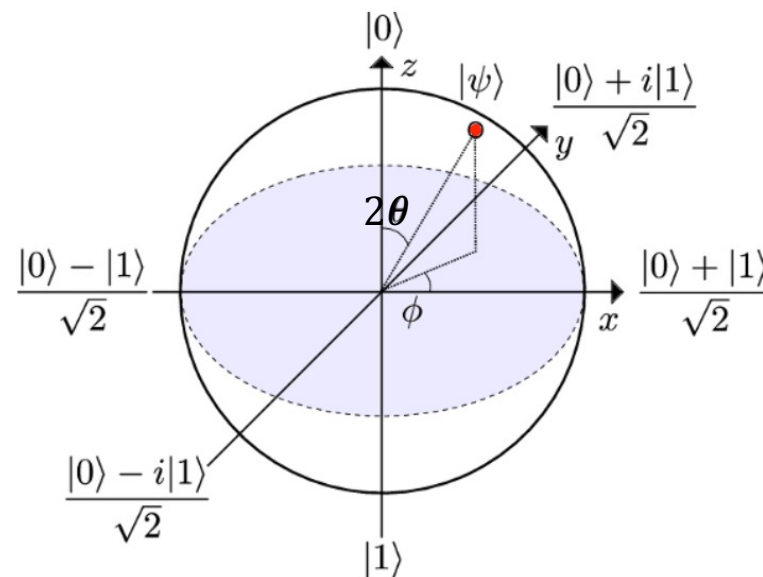
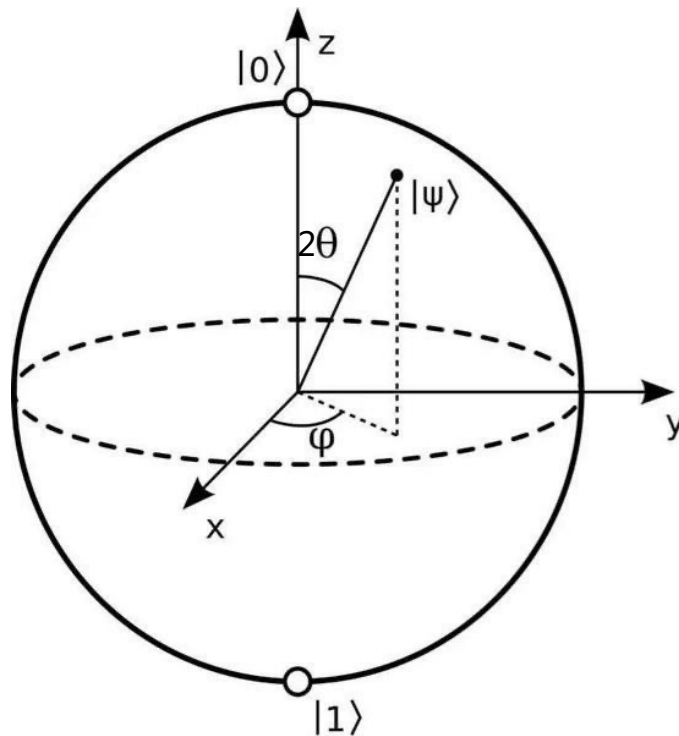
用  $2\theta$  代替  $\theta$  , 且  $0 \leq \theta \leq \pi/2$  ,  $0 \leq \varphi < 2\pi$

可得 :

$$x = \sin 2\theta \cos \varphi$$

$$y = \sin 2\theta \sin \varphi$$

$$z = \cos 2\theta$$



## 多量子比特

以两个量子比特为例，对比两个经典比特的四个可能状态：00、01、10、11，相应的两个量子比特，有四个基： $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|10\rangle$ 、 $|11\rangle$ 。于是一个双量子比特可以处于如下态：

$$|\psi\rangle = \alpha_{00} |00\rangle + \alpha_{01} |01\rangle + \alpha_{10} |10\rangle + \alpha_{11} |11\rangle$$

归一化条件为：

$$\sum_{x \in \{0,1\}^2} |\alpha_x|^2 = 1$$

对于更多的量子比特(n量子比特)，可以看出，其基态可以表示为 $|x_1 x_2 \dots x_n\rangle$ ，其量子状态由 $2^n$ 个幅度来确定。

# 塌缩

根据量子力学标准的塌缩形式，运动定律由两部分组成：

- 其一是线性动力学：  
如果一个物理系统没有被测量，它将按照薛定谔方程以一种确定的、线性的方式演化；
- 其二是非线性的塌缩动力学：  
如果对系统进行一个测量，系统将立即非线性地、随机地从初始的叠加态跃迁到正被测量的可观察量的一个本征态，这时，实验者就会感知到一个确定的观察值，即本征态相应的本征值，这也就是20世纪30年代初狄拉克（P.Dirac）- 冯·诺依曼（John von Neumann）为了统一海森堡（W.Heisenberg）和薛定谔（W.Schrodinger）的理论工作与玻恩（M.Born）的几率解释而首先提出的本征态 - 本征值关联。

在量子力学中测量(measure)会导致坍塌，即是说测量会影响到原来的量子状态，因此量子状态的全部信息不可能通过一次测量得到。当对量子比特 $|\psi\rangle$ 进行测量时，仅能得到该量子比特概率  $|\alpha|^2$  处在 $|0\rangle$  态，或概率  $|\beta|^2$ 处在  $|1\rangle$  态。由于所有情况的概率和为 1，则有  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 。

# 测量

量子测量是由测量算子(measurement operators)的集合 $\{M_i\}$ 来描述，这些算子可以作用在待测量系统的状态空间(state space)上。指标(index)  $i$  表示在实验上可能发生的结果。如果测量前的量子系统处在最新状态 $|\psi\rangle$ ，那么结果发生的概率为：

$$p(i) = \langle \psi | M_i^\dagger M_i | \psi \rangle$$

测量就是将量子态  $|\psi\rangle$  投影到另一个态  $|\alpha\rangle$  上。  
 获得这个态的概率是它们内积的平方：

$$P_\alpha = |\langle \psi | \alpha \rangle|^2$$

其它概率下会将量子态投影到它的正交态上去，即：

$$P_{\alpha\perp} = 1 - P_\alpha$$

测量之后量子态就坍缩到测量到的态上。

并且测量后的系统状态变为

$$\frac{M_i |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_i^\dagger M_i | \psi \rangle}}$$

由于所有可能情况的概率和为 1，即

$$\sum_i p(i) = \sum_i \langle \psi | M_i^\dagger M_i | \psi \rangle = 1$$

因此，测量算子需满足

$$\sum_i M_i^\dagger M_i = I$$

该方程被称为完备性方程(completeness equation)。

# 密度矩阵

对于一个纯态而言，密度矩阵的形式是：

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

而对于一个混合态而言，密度矩阵的形式是：

$$\rho = \sum_i P_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

对于每一个纯态分量，连接球心和球面上的点，可以形成一个矢量。根据概率列表，对所有的纯态矢量进行加权平均，即可得到混合态的矢量，即得到了混合态对应的点。

混合态是布洛赫球内部的点，根据混合的程度不同，矢量的长度也不同。最大混合态是球心，它意味着这里不存在任何量子叠加性。

密度矩阵有以下性质：

- ✓ 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  $\rho$  表示。  
 $\rho = \rho^2$  当且仅当量子态为纯态时成立。
- ✓  $\rho$  对角线上的分量表示整个系统如果经历一次测量，那么可以得到这个态的概率。



# 密度矩阵

1. 对于量子态：

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$$

其密度矩阵为：

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

$$\text{矩阵迹为：} \text{tr}(\rho) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

2. 而对于如下量子态表达式：

$$|\psi\rangle = r_0|0\rangle + r_1e^{i\varphi}|1\rangle = \cos(\theta)|0\rangle + \sin(\theta)e^{i\varphi}|1\rangle$$

其密度矩阵为：

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{bmatrix} r_0^2 & r_0r_1e^{-i\varphi} \\ r_0r_1e^{i\varphi} & r_1^2 \end{bmatrix}$$



Thank

You