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

四元数

四元数是复数的拓展，性质相似。相当于一个四维向量，在作为算子操作时，相当于一个四维矩阵。有兴趣的话可以找相关资料深入学习，这里就不展开了。

四元数的表示：

$$q = a + bi + cj + dk$$

$$i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1$$

X	1	i	j	k
1	1	i	j	k
i	i	-1	k	$-j$
j	j	$-k$	-1	i
k	k	j	$-i$	-1

一个四元数$q=a+bi+cj+dk$的共轭为 $q^* = a-bi-cj-dk$ （q^* 读作 q star).
如果用标量向量有序对的形式来定义的话，$q = [s, \mathbf{v}]$ 的共轭为 $q^* = [s, -\mathbf{v}]$.

四元数 – 加法和减法

四元数：

$$q_1 = a + bi + cj + dk$$
$$q_2 = e + fi + gj + hk$$

四元数的加法：

$$\begin{aligned} q_1 + q_2 &= a + bi + cj + dk + e + fi + gj + hk \\ &= (a + e) + (b + f)i + (c + g)j + (d + h)k \end{aligned}$$

四元数的减法：

$$q_1 - q_2 = (a - e) + (b - f)i + (c - g)j + (d - h)k$$

四元数 – 乘法

四元数：
$$q_1 = a + bi + cj + dk$$
$$q_2 = e + fi + gj + hk$$

$$\begin{aligned} q_1 q_2 &= (a + bi + cj + dk)(e + fi + gj + hk) \\ &= ae + afi + agj + ahk + \\ &\quad bei - bf + bgk - bhj + \\ &\quad cej - cfk - cg + chi + \\ &\quad dek + dfj - dgi - dh \\ &= (ae - bf - cg - dh) + \\ &\quad (be + af - dg + ch)i + \\ &\quad (ce + cf + ag - bh)j + \\ &\quad (de - df + bg + ah)k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q_2 q_1 &= (e + fi + gj + hk)(a + bi + cj + dk) \\ &= ea + ebi + ecj + edk + \\ &\quad fai - fb + fck - fdj + \\ &\quad gaj - gbk - gc + gdi + \\ &\quad hak + hbj - hci - hd \\ &= (ea - fb - gc - hd) + \\ &\quad (eb + fa + gd - hc)i + \\ &\quad (ec - fd + ga + hb)j + \\ &\quad (ed + fc - gb + ha)k \\ &= (ae - bf - cg - dh) + \\ &\quad (be + af + dg - ch)i + \\ &\quad (ce - df + ag + bh)j + \\ &\quad (de + cf - bg + ah)k \end{aligned}$$

左乘一个四元数等同于**左乘**这个矩阵:
$$= \begin{bmatrix} a & -b & -c & -d \\ b & a & -d & c \\ c & d & a & -b \\ d & -c & b & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e \\ f \\ g \\ h \end{bmatrix}$$

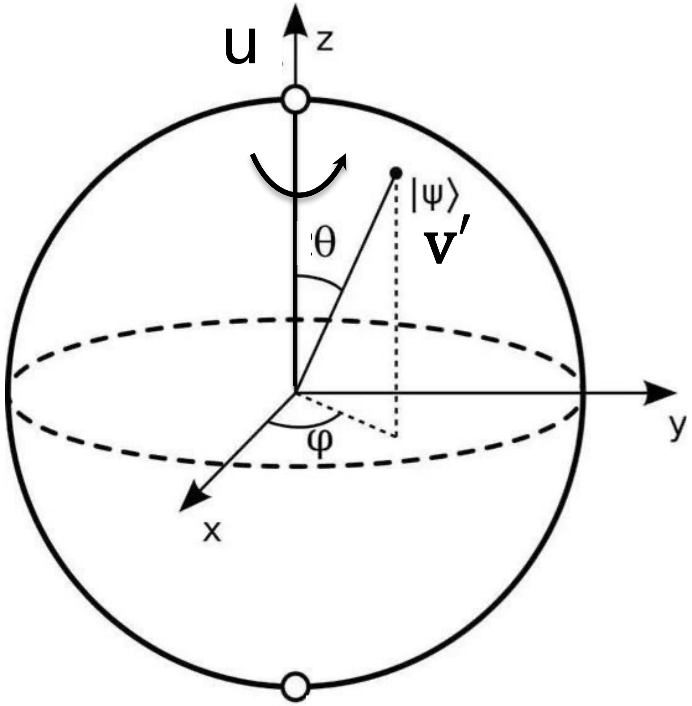
右乘一个四元数等同于**左乘**这个矩阵:
$$= \begin{bmatrix} a & -b & -c & -d \\ b & a & d & -c \\ c & -d & a & b \\ d & c & -b & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e \\ f \\ g \\ h \end{bmatrix}$$

3D 旋转公式

3D 旋转公式 (Rodrigues Rotation Formula)：

3D 空间中任意一个 **v** = $\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}$ 沿着单位向量 **u** 旋转 φ 角度之后的 **v'** 为:

$$\mathbf{v}' = \cos(\varphi)\mathbf{v} + (1 - \cos(\varphi))(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})\mathbf{u} + \sin(\varphi)(\mathbf{u} \times \mathbf{v})$$



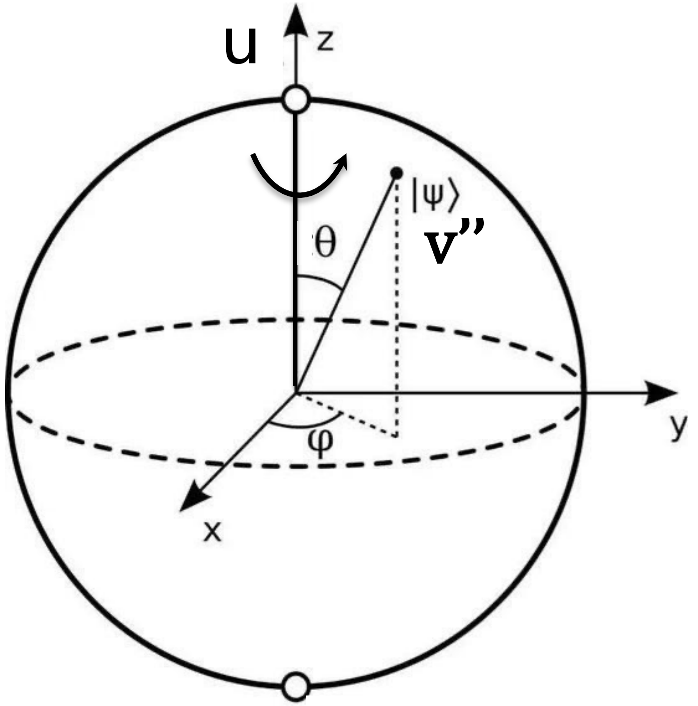
四维空间中旋转 – 四元数

四维空间中任意向量 $\boldsymbol{v}$ = [0, **v**] ，在三维子空间中的投影 **v** 沿着单位向量 **u** 旋转 φ 度之后，有：

$$\boldsymbol{v}' = q\boldsymbol{v}q^* = q\boldsymbol{v}q^{-1}$$
$$= [0, \cos(\varphi)\mathbf{v} + (1-\cos(\varphi))(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})\mathbf{u} + \sin(\varphi)(\mathbf{u}\times\mathbf{v})]$$

其中：
$$q = a + bi + cj + dk = [\cos(\tfrac{\varphi}{2}),\ \sin(\tfrac{\varphi}{2})\,\mathbf{u}]$$

*上述公式的证明，涉及到四元数。四元数是复数的拓展，性质相似。相当于一个四维向量，在作为算子操作时，相当于一个四维矩阵。



四维空间中的三维子空间

四维空间中旋转 - 矩阵形式

由于：

$$\boldsymbol{v}' = q\boldsymbol{v}q^{-1} \qquad q = a + bi + cj + dk$$

左乘一个四元数 q 等同于**左乘**下面这个矩阵：

$$M_1 = \begin{bmatrix} a & -b & -c & -d \\ b & a & -d & c \\ c & d & a & -b \\ d & -c & b & a \end{bmatrix}$$

右乘一个四元数 q 等同于**左乘**下面这个矩阵：

$$M_2 = \begin{bmatrix} a & -b & -c & -d \\ b & a & d & -c \\ c & -d & a & b \\ d & c & -b & a \end{bmatrix}$$

右乘一个四元数 q^{-1} 等同于**左乘** 矩阵 $M_3 = M_2^T$(M_2 转置）：

$$\mathrm{M}_3 = \begin{bmatrix} a & b & c & d \\ -b & a & -d & c \\ -c & d & a & -b \\ -d & -c & b & a \end{bmatrix}$$

所以有：

$$\boldsymbol{v}' = q\boldsymbol{v}q^{-1} = \mathrm{M}_1\,\mathrm{M}_3\,\boldsymbol{v} = \mathrm{M}_3\,\mathrm{M}_1\boldsymbol{v}$$

四维空间中旋转 - 矩阵形式

$$\boldsymbol{v}' = q\boldsymbol{v}q^{-1} = \mathrm{M}_1\,\mathrm{M}_2\,\boldsymbol{v} = \mathrm{M}_2\,\mathrm{M}_1\boldsymbol{v}$$

$$= \begin{bmatrix} a & -b & -c & -d \\ b & a & -d & c \\ c & d & a & -b \\ d & -c & b & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b & c & d \\ -b & a & -d & c \\ -c & d & a & -b \\ -d & -c & b & a \end{bmatrix} \boldsymbol{v}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-2c^2-2d^2 & 2bc-2ad & 2ac+2bd \\ 0 & 2bc+2ad & 1-2b^2-2d^2 & 2cd-2ab \\ 0 & 2bd-2ac & 2ab+2cd & 1-2b^2-2c^2 \end{bmatrix} \boldsymbol{v}$$

$(\,a^2+b^2+c^2+d^2=1\,)$

这样我们就得到了四维空间里，三维子空间中的旋转的矩阵形式。

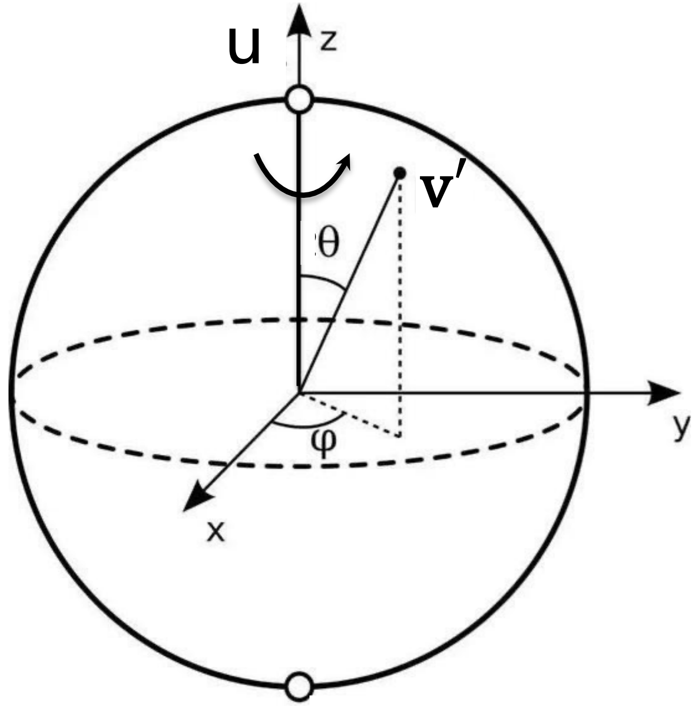
四维空间中旋转 - 矩阵形式

因为矩阵的最外层不对 v 进行任何变换，所以 4 × 4 矩阵可以压缩成 3 × 3 矩阵。于是得到四维空间中三维子空间的 3D 旋转公式 (矩阵型) ：

四维空间中任意向量 $\boldsymbol{v}$ = [0, **v**] ，在三维子空间中的投影 **v** 沿着单位向量 **u** 旋转 φ 度之后 $\mathbf{v}'$ 为：

$$\mathbf{v}' = \begin{bmatrix} 1-2c^2-2d^2 & 2bc-2ad & 2ac+2bd \\ 2bc+2ad & 1-2b^2-2d^2 & 2cd-2ab \\ 2bd-2ac & 2ab+2cd & 1-2b^2-2c^2 \end{bmatrix} \mathbf{v}$$

$$\boldsymbol{v} = [0, \mathbf{v}] = \begin{bmatrix} 0 \\ v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{q} = [\cos(\frac{\varphi}{2}), \ \sin(\frac{\varphi}{2})\,\mathbf{u}\,] = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\varphi}{2}) \\ \sin(\frac{\varphi}{2})\,u_x \\ \sin(\frac{\varphi}{2})\,u_y \\ \sin(\frac{\varphi}{2})\,u_z \end{bmatrix}$$



绕任意轴旋转 – 指数形式

欧拉公式复数形式：

$$e^{ix} = \cos x + i\ \sin x$$

类似于欧拉公式复数形式，四元数也有一个类似的公式，如果 **u** 是一个单位向量，那么对于单位四元数 u = [0, **u**]，即 u = **u** = $u_x i + u_y j + u_z k$， 有（证明略）：

$$e^{u\frac{\theta}{2}} = \cos\frac{\theta}{2} + u\sin\frac{\theta}{2} = \cos\frac{\theta}{2} + \mathbf{u}\sin\frac{\theta}{2}$$

将 $u = u_x i + u_y j + u_z k$， 代入公式可得：

$$e^{\frac{\theta}{2}(u_x i + u_y j + u_z k)} = \cos\frac{\theta}{2} + \sin\frac{\theta}{2}(u_x i + u_y j + u_z k)$$

这个公式为四维空间中三维子空间绕单位向量 **u** 旋转 θ 角公式（证明略）。

绕任意轴旋转 – 指数形式

根据公式：

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

如果 **u** = $\begin{bmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{bmatrix}$，$\vec{\sigma}$ = $\begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix}$ 泡利矩阵组成的三维向量，

那么有：

$$A = \mathbf{u} \cdot \vec{\sigma} = u_x X + u_y Y + u_z Z$$

$$U(\varphi) = \boldsymbol{e}^{(-i\varphi \mathbf{u}\cdot \vec{\sigma})} = \cos(\varphi)\; I - i \sin(\varphi)\, \mathbf{u} \cdot \vec{\sigma} = \cos(\varphi)\; I - i \sin(\varphi)\, (u_x X + u_y Y + u_z Z)$$
$$= \cos(\varphi)\; I + \sin(\varphi)\, (-u_x \boldsymbol{iX} - u_y \boldsymbol{iY} - u_z \boldsymbol{iZ})$$

如果以 $\{I, -iX, -iY, -iZ\}$ 为基，则 $U(\varphi)$ 与四元数同构，即（证明略）：

这个公式为四维空间中三维子空间绕单位向量 **u** 旋转公式。

绕任意轴旋转 – 指数形式

于是有 **u** = $\begin{bmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{bmatrix}$ 是四维空间三维子空间中的实单位向量，那么在布洛赫球上绕 **u 旋转** φ 角度公式为(证明略) ：

$$\mathrm{R}_u(\varphi) \equiv e^{(-i\varphi\mathbf{u}\cdot\vec{\sigma}\,/\,2)} \qquad \text{其中 } \vec{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix}$$

由于上述旋转，实质是四维空间中的旋转，所以需要乘以一个全局相位，以使 $|0\rangle$ 的系数为实数，所以有任意幺正变换公式为：

$$\mathrm{U} = e^{(i\alpha)}\mathrm{R}_u(\varphi)$$

Qubits
qubits.top

Thank You