

量子计算

—基础篇

Quantum Computing

网址: 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，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：

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

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：

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

如果 A 是对角阵：

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

则(证明略)：

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

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

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

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

如果 A 不是对角阵，则可以通过么正变换将其对角化 $D = UAU^\dagger$

矩阵的指数函数 – 例子

如果 A 是 2×2 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。

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

则：

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

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：

$$e^A = \text{diag}(e^{A_{11}}, e^{A_{22}}, e^{A_{33}} \dots) = \begin{bmatrix} e^{a_0} & 0 \\ 0 & e^{a_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{a_0} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & e^{a_1} \end{bmatrix} = e^{a_0} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + e^{a_1} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = e^{a_0} |0\rangle\langle 0| + e^{a_1} |1\rangle\langle 1|$$

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：

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

根据上述公式可得：

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

其中 $A^2 = I$

生成元 - 单位矩阵

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

以单位矩阵 I 作为生成元，则可以构建一种特殊的么正变换：

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

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。

泡利矩阵

一组三个 2x2 的么正厄米复矩阵：

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

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

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 $U(\theta) = e^{(-i\theta A)} = \cos(\theta) I - i \sin(\theta) A$, 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 \mathbf{v} 绕 x 轴旋转 θ 角。

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

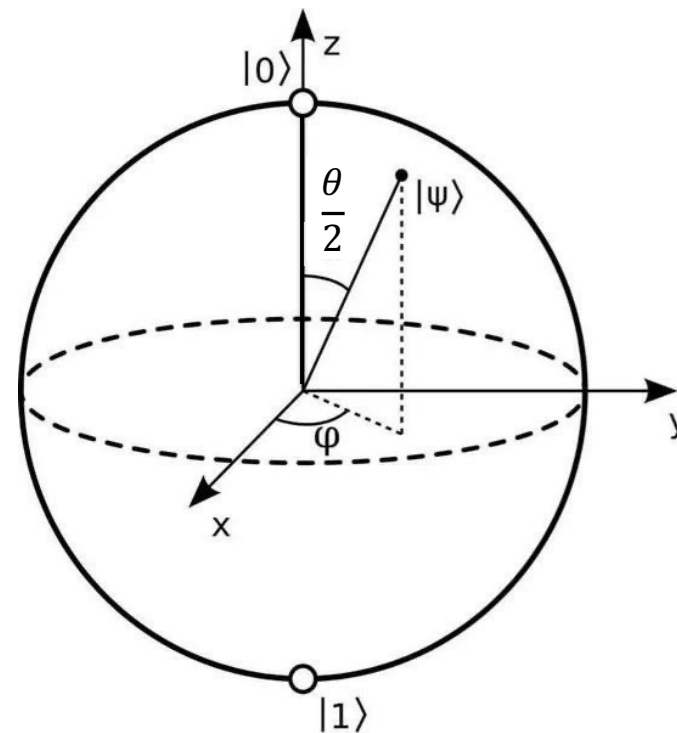
$R_y(\theta)$ 可将布洛赫球上的向量 \mathbf{v} 绕 y 轴旋转 θ 角。

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

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

布洛赫球上的向量 \mathbf{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：

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

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

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

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：

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

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

2. 而对于如下量子态表达式：

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

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。
 $\rho = \rho^2$ 当且仅当量子态为纯态时成立。
- ✓ 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：

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

则有：

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \cos\theta & \cos\varphi \sin\theta - i \sin\varphi \sin\theta \\ \cos\varphi \sin\theta + i \sin\varphi \sin\theta & 1 - \cos\theta \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \cos\varphi \sin\theta \\ \cos\varphi \sin\theta & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -i \sin\varphi \sin\theta \\ i \sin\varphi \sin\theta & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 \\ 0 & -\cos\theta \end{bmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \cos\varphi \sin\theta \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \sin\varphi \sin\theta \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} + \cos\theta \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{2} (I + r_x X + r_y Y + r_z Z) \\ &= \frac{1}{2} (I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}) \end{aligned}$$

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

如果以 $\{I, X, Y, Z\}$ 为基，则 ρ 与四元数同构。

密度算符（矩阵）

酉变换作用于量子态 $|\psi_0\rangle$ ，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：

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

$$\begin{aligned}\rho &= (U|\psi\rangle)\otimes(U|\psi\rangle)^\dagger \\ &= (U|\psi\rangle)\otimes(\langle\psi|U^\dagger) \\ &= U|\psi\rangle\langle\psi|U^\dagger \\ &= U\rho_0U^\dagger\end{aligned}$$

$R_z(\theta)$ - 绕 Z 轴旋转 θ 角

通过酉变换 $R_z(\theta)$ 表示密度矩阵的演化：

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

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

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

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

$$X^2 = Y^2 = Z^2 = -iXYZ = I$$

$$XY = -YX = iZ$$

$$YZ = -ZY = iX$$

$$ZX = -XZ = iY$$

同样的计算可得：

$$R_z(\theta) Y R_z(\theta)^\dagger = \cos\theta Y - \sin\theta X$$

$$R_z(\theta) Z R_z(\theta)^\dagger = Z$$

$R_z(\theta)$ - 绕 Z 轴旋转 θ 角

于是有：

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

因为：

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

于是有：

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

$R_z(\theta)$ - 绕 Z 轴旋转 θ 角

于是有：

$$\begin{aligned}
 v'_x X &= v_x \cos \theta - v_y \sin \theta \\
 v'_y Y &= v_x \sin \theta + v_y \cos \theta \\
 v'_z Z &= v_z
 \end{aligned}
 \quad \Rightarrow \quad
 \vec{v'} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \vec{v}$$

绕 z 轴旋转 θ 角矩阵

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