Qubits
qubits.top

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，解析几何，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，或者大学授课使用
- 禁止用于任何商业用途

从线性运算说起

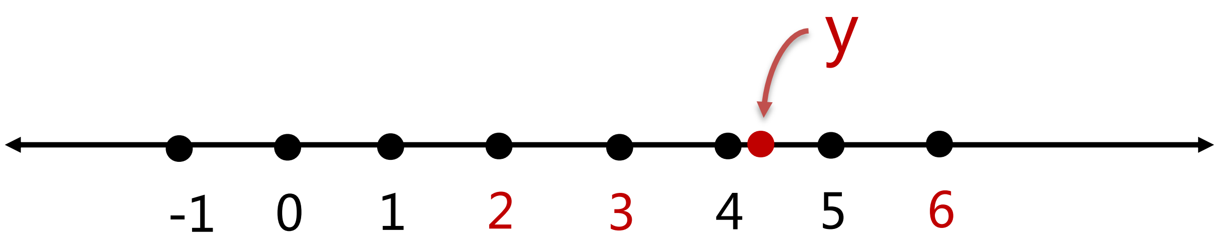
线性运算是**加法**和**数量乘法**， 在实数域像只包含加法和数量乘法二元一次方程就属于线性运算，如：

$$y=ax+b$$

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：

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

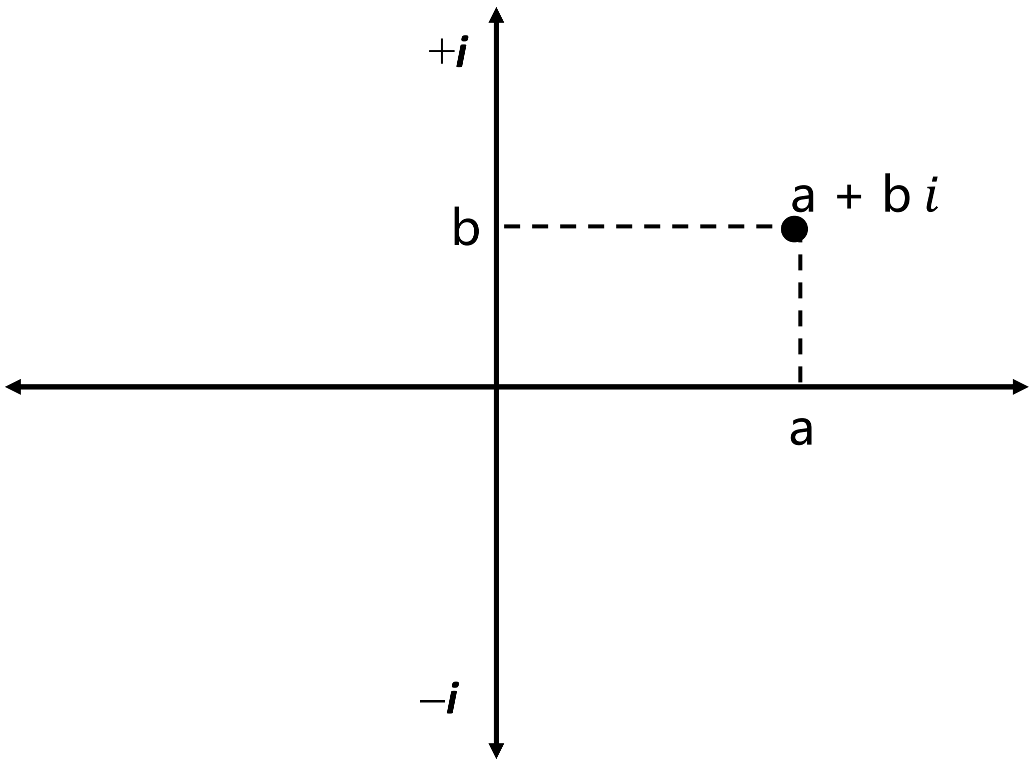


$$y = 1 * 2 + 0.5 * 3 + 0.1 * 6 = 2 + 1.5 + 0.6 = 4.1$$

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：

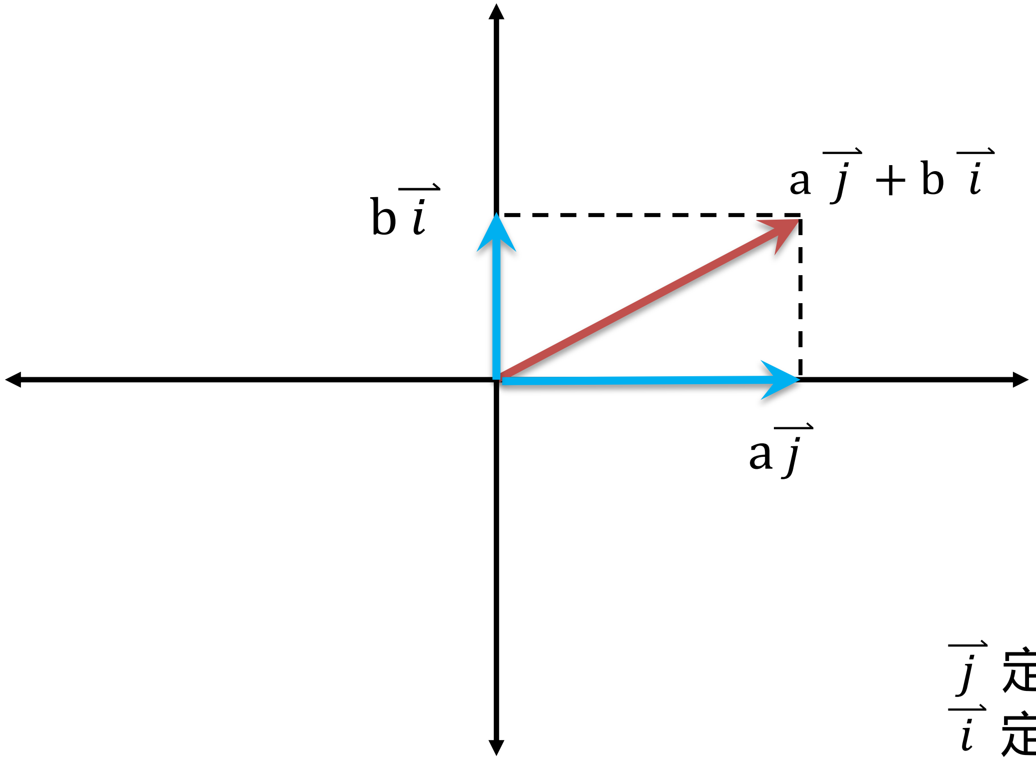
对于复数 a + b i，其在复平面里的坐标表示如下：



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：

$$a\vec{j} + b\vec{i} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$



$\vec{j}$ 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

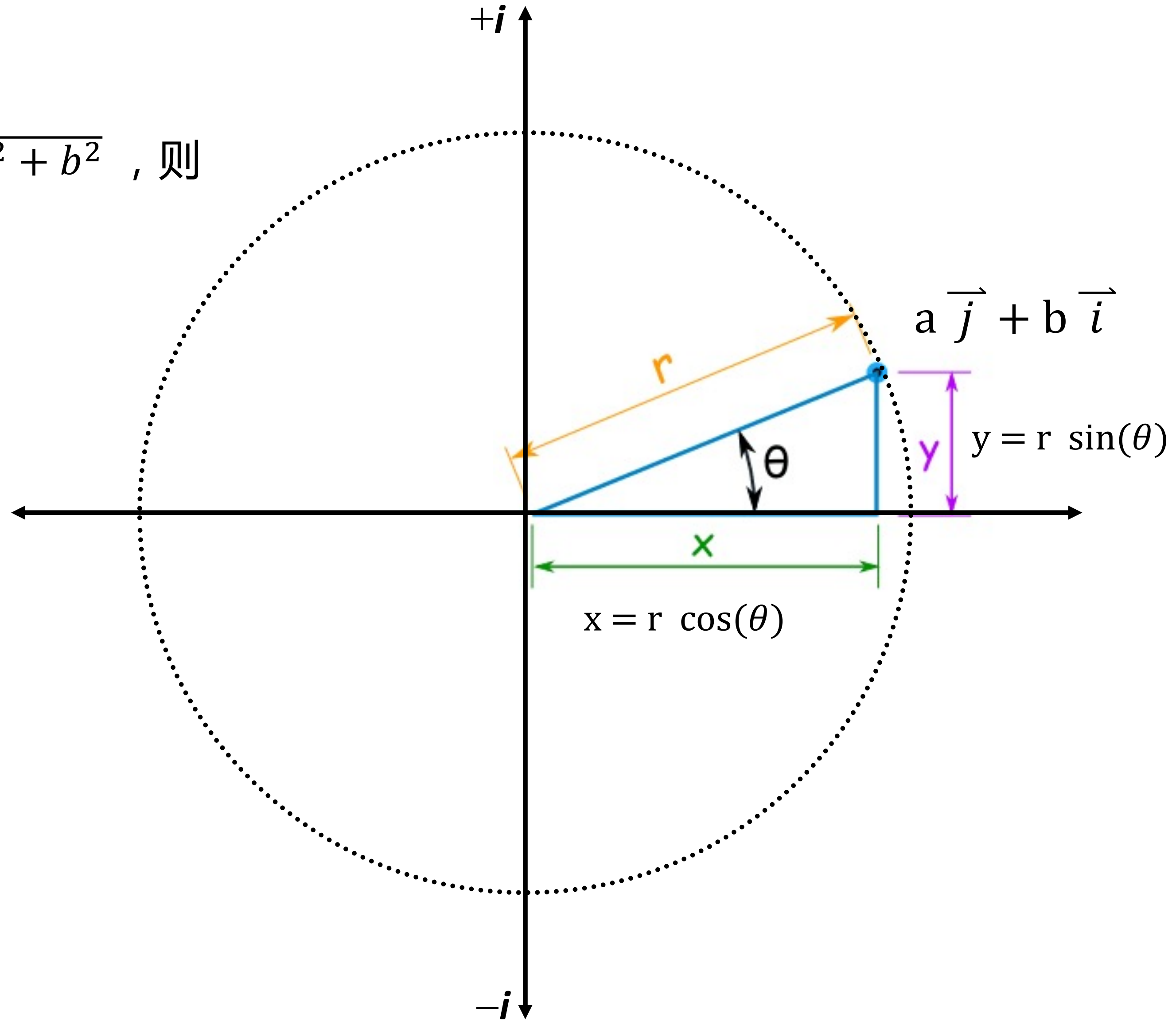
复数向量三角函数表示

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



欧拉公式（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（2/2）

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

$$e^{ix} = 1 + \frac{ix}{1!} - \frac{x^2}{2!} - \frac{ix^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{ix^5}{5!} - \frac{x^6}{6!} - \frac{ix^7}{7!} + \cdots + \frac{i^{2n}x^{2n}}{(2n)!} + \frac{i^{2n+1}x^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

$$= 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} + i\left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}\right)$$

$$= \cos(x) + i\ \sin(x)$$

由此可得欧拉公式：

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

θ取 π 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：

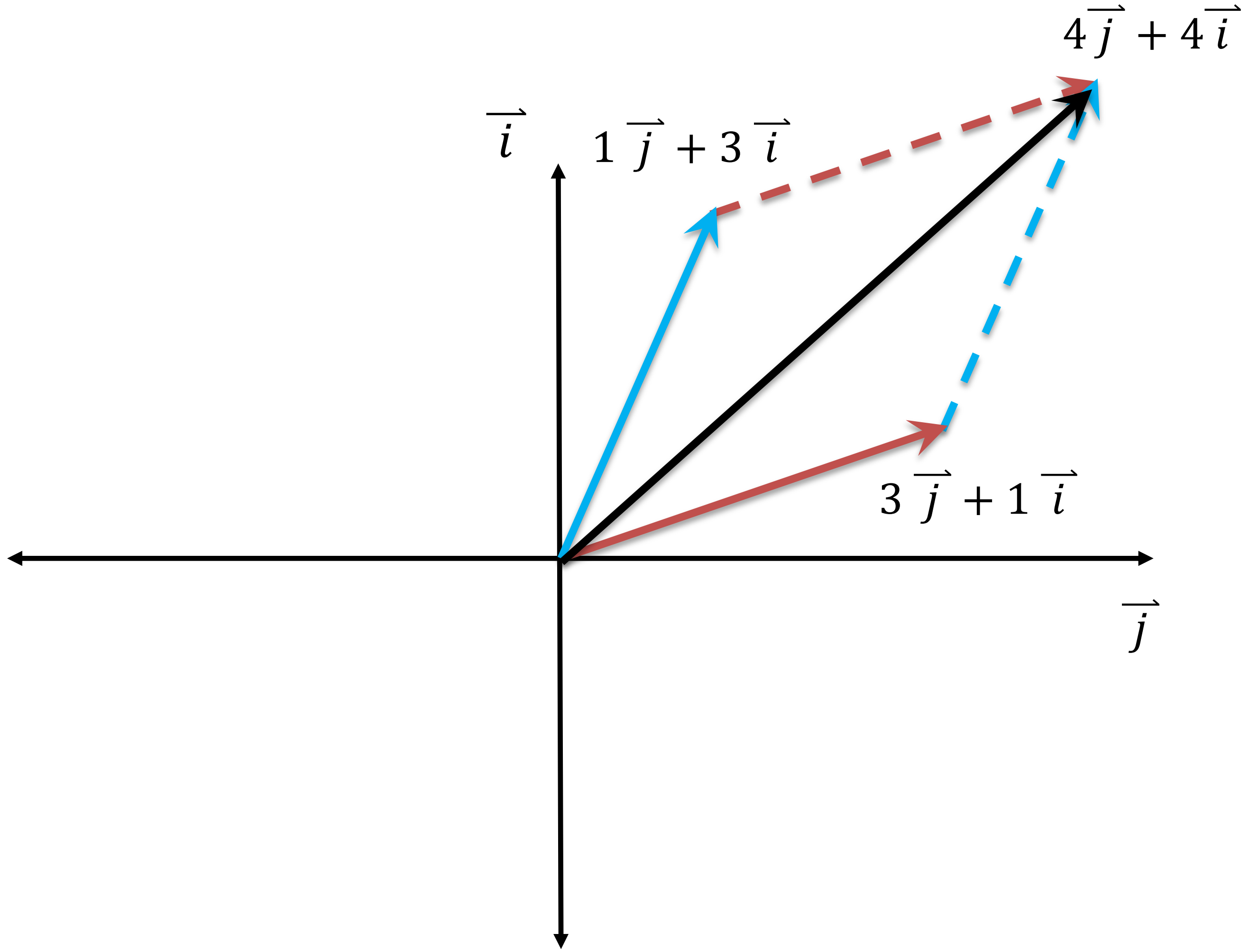
$c_1 = 1 + 3\,i = 1\,\vec{j} + 3\,\vec{i}$

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

则 $c_3 = c_1 + c_2$

$= (a+c)\,\vec{j} + (b+d)\,\vec{i}$

$= 4\,\vec{j} + 4\,\vec{i}$



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：

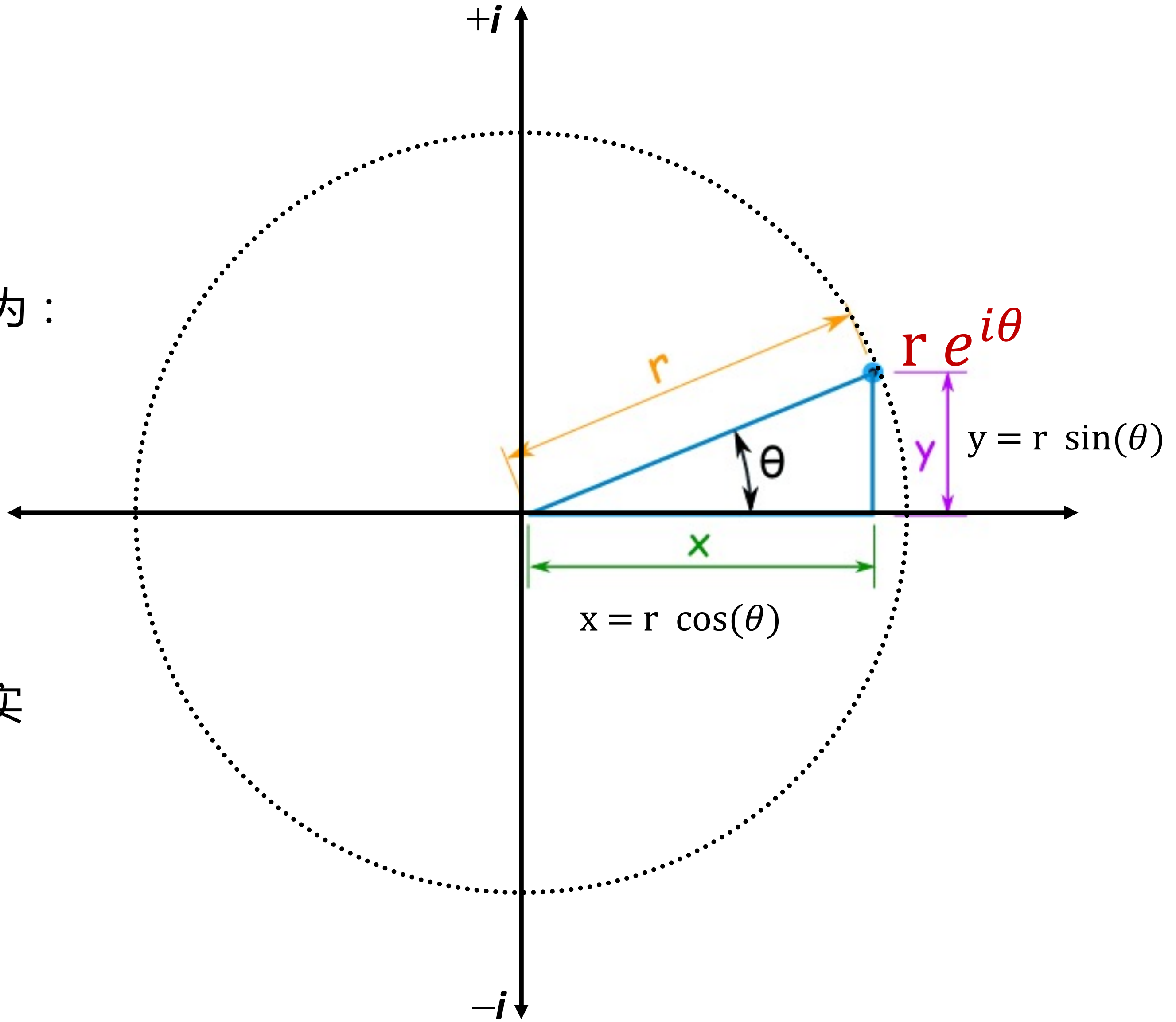
$$e^{i\theta} = \cos(\theta) + i\ \sin(\theta)$$

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

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 θ 角得到。



虚数 i 与实数关系 – 复数乘法的几何意义

复数 $c_1 = a + b\,i$ ：
- ➢ $c_1 = r_1(\cos(\theta_1) + i\ \sin(\theta_1))$
- ➢ $c_1 = r_1\, e^{i\theta 1}$

复数 $c_2 = c + d\,i$ ：
- ➢ $c_2 = r_2(\cos(\theta_2) + i\ \sin(\theta_2))$
- ➢ $c_2 = r_2\, e^{i\theta 2}$

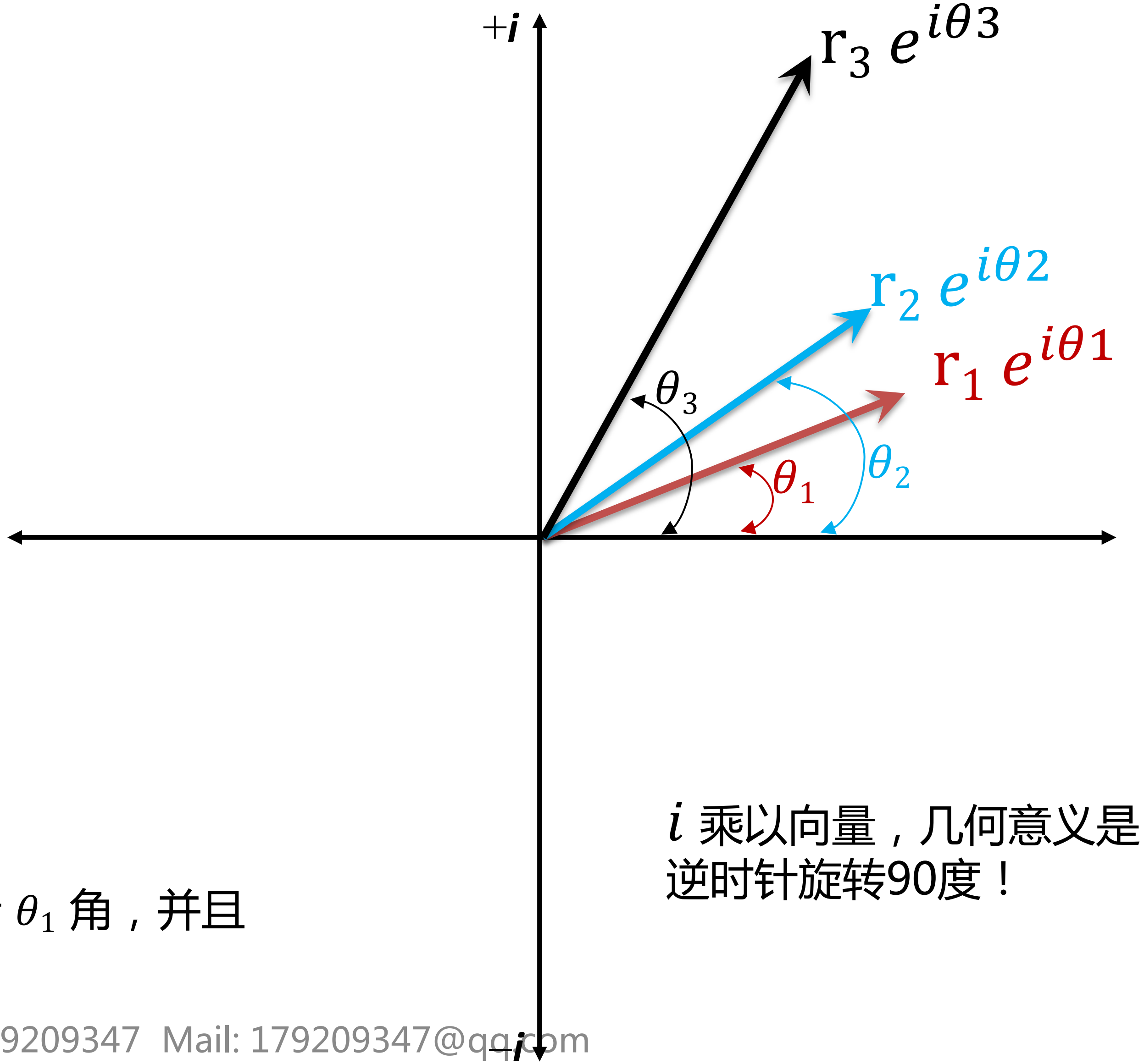
$$
\begin{aligned}
\text{复数 } c_1 * c_2 &= r_1\, e^{i\theta 1} * r_2\, e^{i\theta 2} \\
&= r_1\, r_2\, e^{i(\theta 1 + \theta 2)} \\
&= r_3\, e^{i\theta 3}
\end{aligned}
$$

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 θ_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！

复数空间与实数空间转换 – 向量

复向量：

$$\begin{bmatrix}\alpha\\\beta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a+b\,i\\c+d\,i\end{bmatrix}$$

（ α、β 都是复数 ）

实向量表示：

$$\begin{bmatrix}a\\b\\c\\d\end{bmatrix}$$

所有的门，都是希尔伯特空间中的算子，即算子矩阵中所有的元素都是复数（其中的实数应理解为虚部为 0 ）。

那么 $Y=\sigma_y=\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}$ **实向量空间**中的矩阵表示（看做 2 * 2 分块矩阵）：

$$\left[\begin{array}{cc|cc}0 & 0 & 0 & 1\\0 & 0 & -1 & 0\\\hline 0 & -1 & 0 & 0\\1 & 0 & 0 & 0\end{array}\right]$$

a + b i 算子其矩阵表示：

$$\begin{bmatrix}a & -b\\b & a\end{bmatrix}$$

复数空间与实数空间转换 – 矩阵

a + b i 作为算子其矩阵表示：

$$\begin{bmatrix} \mathrm{a} & -b \\ b & a \end{bmatrix}$$

那么$\mathrm{Y} = \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ **实向量空间**中的矩阵表示（看做 2 * 2 分块矩阵）：

$$\left[\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

欧拉公式 – 矩阵证明法 (1/4)

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

2 i 矩阵表示： $\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\pi}{2}) & -sin(\frac{\pi}{2}) \\ \sin(\frac{\pi}{2}) & \cos(\frac{\pi}{2}) \end{bmatrix}$

因为 a + b i 矩阵表示： $\begin{bmatrix} \mathrm{a} & -b \\ b & a \end{bmatrix}$

3 用 x $\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ 代入 e^x 中的 x：

4
$$\begin{aligned} e^x &= 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} \\ &= x^0 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} \\ &= (\mathrm{x}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix})^0 + \frac{1}{1!}(\mathrm{x}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix})^1 + \frac{1}{2!}(\mathrm{x}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix})^2 + \frac{1}{3!}(\mathrm{x}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix})^3 + \ldots + \frac{1}{n!}(\mathrm{x}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix})^n \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^0 + \frac{1}{1!}\mathrm{x}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^1 + \frac{x^2}{2!}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^2 + \frac{x^3}{3!}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^3 + \ldots + \frac{x^n}{n!}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^n \end{aligned}$$

1 要转换成 x^0，如此才能保证维度一致

Qubits
qubits.top

欧拉公式 – 矩阵证明法 (2/4)

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\cos(\frac{\pi}{2}) & -sin(\frac{\pi}{2})\\ \sin(\frac{\pi}{2}) & \cos(\frac{\pi}{2})\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}^3 = \begin{bmatrix}\cos(\frac{3\pi}{2}) & -sin(\frac{3\pi}{2})\\ \sin(\frac{3\pi}{2}) & \cos(\frac{3\pi}{2})\end{bmatrix} = -\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}$$

$$\cdots$$

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}^{2n+1} = \begin{bmatrix}\cos(\frac{(2n+1)\pi}{2}) & -sin(\frac{(2n+1)\pi}{2})\\ \sin(\frac{(2n+1)\pi}{2}) & \cos(\frac{(2n+1)\pi}{2})\end{bmatrix}$$

$$= (-1)^n \begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}^0 = \begin{bmatrix}\cos(\frac{0\pi}{2}) & -sin(\frac{0\pi}{2})\\ \sin(\frac{0\pi}{2}) & \cos(\frac{0\pi}{2})\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix}\cos(\frac{2\pi}{2}) & -sin(\frac{2\pi}{2})\\ \sin(\frac{2\pi}{2}) & \cos(\frac{2\pi}{2})\end{bmatrix} = -\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$$

$$\cdots$$

$$\begin{bmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{bmatrix}^{2n} = \begin{bmatrix}\cos(\frac{(2n)\pi}{2}) & -sin(\frac{(2n+1)\pi}{2})\\ \sin(\frac{(2n)\pi}{2}) & \cos(\frac{(2n+1)\pi}{2})\end{bmatrix}$$

$$= (-1)^n \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$$

欧拉公式 – 矩阵证明法 (3/4)

Qubits
qubits.top

$$e^{x\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}} = \begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}^0 + \frac{1}{1!}\text{x}\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}^1 + \frac{x^2}{2!}\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}^2 + \frac{x^3}{3!}\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}^3 + \ldots + \frac{x^n}{n!}\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}^n$$

$$= \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - \frac{x^2}{2!}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} + \frac{x^4}{4!}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} - \frac{x^6}{6!}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} + \cdots + (-1)^{\text{n}}\frac{x^{2n}}{(2n)!}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

$$+ x\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix} - \frac{x^3}{3!}\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix} + \frac{x^5}{5!}\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix} - \frac{x^7}{7!}\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix} + \cdots + (-1)^n\frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix}1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + (-1)^n\frac{x^{2n}}{(2n)!} & 0\\ 0 & 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \cdots + (-1)^n\frac{x^{2n}}{(2n)!}\end{bmatrix}$$

$$+ \begin{bmatrix}0 & -(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n\frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!})\\ x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \cdots + (-1)^n\frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} & 0\end{bmatrix}$$

欧拉公式 – 矩阵证明法（4/4）

根据泰勒公式：

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

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

可得：

欧拉公式： $e^{x\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}} = \begin{bmatrix}\cos x & 0\\ 0 & \cos x\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0 & -\sin x\\ \sin x & 0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\cos x & -\sin x\\ \sin x & \cos x\end{bmatrix}$

欧拉恒等式： $e^{\begin{bmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\pi} = \begin{bmatrix}\cos \pi & -\sin \pi\\ \sin \pi & \cos \pi\end{bmatrix} = -\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}$

也可以表示为：

$$e^{x(0,1)} = (\cos x\,,\ \sin x)$$

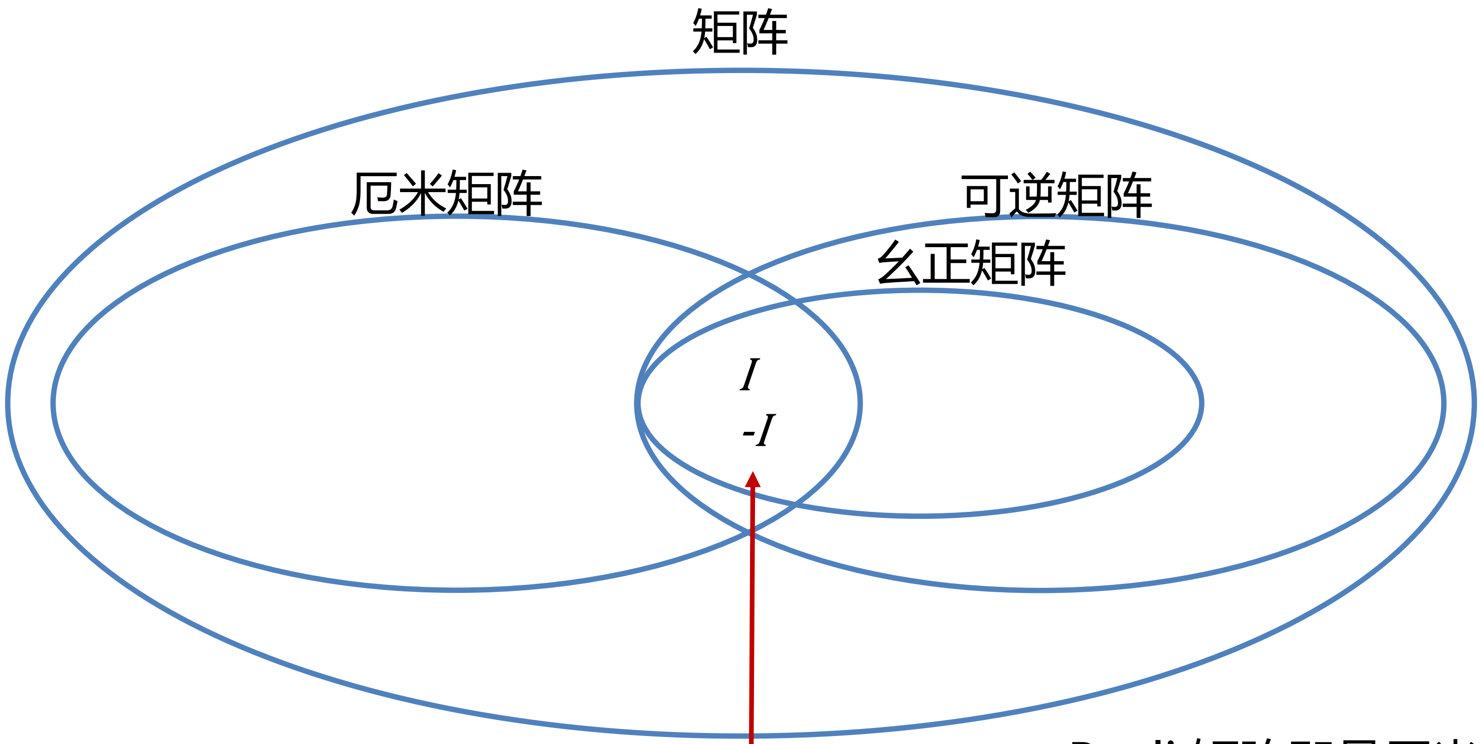
$$e^{(0,\pi)} = (-1\,,0)$$

矩阵表示或者二元组表示，更能体现复数的本质：
虚数不虚，复数是矩阵在2维上的特例！

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

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

矩阵类型



Pauli 矩阵即是厄米矩阵也是Pauli 矩阵。

Pauli 矩阵

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

实对称矩阵A^T vs 厄米矩阵$A^\dagger$ — 等价

实对称矩阵： $A^T = A$　　A^T 的意思是转置
厄米矩阵：　$A^\dagger = A$　　$A^\dagger$ 的意思是转置共轭

实对称矩阵是所有元素均为实数的对称矩阵。具有以下性质：
1、所有特征值均为实数
2、所有特征向量均为实向量
3、不同特征值对应的特征向量之间是正交的
4、具有n个线性无关的特征向量

为什么要加上共轭呢？
转换成实数矩阵后，就很清晰，没有共轭，矩阵并不对称。

$A^\dagger = A = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ **实向量空间**中的矩阵表示：

$$\left[\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

$A^T = A = \begin{bmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ **实向量空间**中的矩阵表示：

$$\left[\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

正交矩阵 vs 幺正矩阵 — 等价

正交矩阵： $A^TA = I$，即 $A^T = A^{-1}$

性质：正交矩阵的行（列）向量组是欧几里得空间的标准正交向量组。

幺正矩阵： $UU^\dagger = I$ ，即 $U^\dagger = U^{-1}$

性质：幺正矩阵的行（列）向量组是酉空间的标准正交向量组。

那么$Y = \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ **实向量空间**中的矩阵表示（看做 2 * 2 分块矩阵）：

$$\left[\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right]$$

$A^TA = I$ 其中的 I 意味着 A 行列式的值为 1， 也就意味着 A 对任何向量变换，只旋转，不缩放。

Qubit
qubits.top

Thank You