4.7 量子系统的仿真——习题与解答

DanX, Yuchen He*, and Joe Chen

练习 4.46 (密度算符的参数数量). 设 ρ 是一个 n 比特量子系统的密度算符（即一个 $2^n \times 2^n$ 的密度矩阵）。证明：为了给出 ρ 的完整描述，一共需要 $4^n - 1$ 个独立的实参数。

解答. 记 Hilbert 空间维数 $d = 2^n$，则 ρ 是一个 $d \times d$ 的密度矩阵。

1. Hermite 矩阵的参数个数

任意 $d \times d$ Hermite 矩阵 H 满足 $H^\dagger = H$。写成分量，

$$H = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1d} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{d1} & h_{d2} & \cdots & h_{dd} \end{pmatrix}.$$

- 对角元 $h_{jj} \in \mathbb{R}$，共有 d 个实自由度；
- 非对角元 h_{jk}（$j < k$）是复数，满足 $h_{kj} = \overline{h_{jk}}$。每个这样的共轭对提供 2 个实自由度（实部和虚部），共
$$2\binom{d}{2} = d(d-1)$$
个实自由度。

因此所有 $d \times d$ Hermite 矩阵构成的实向量空间维数为

$$d + d(d-1) = d^2.$$

2. 迹归一约束

密度算符还要满足 $\mathrm{tr}(\rho) = 1$。这是对 Hermite 矩阵空间的一个线性约束：

$$\mathrm{tr}(\rho) = 1 \quad \Longrightarrow \quad \text{自由参数个数从}d^2\text{ 降为}d^2 - 1.$$

注意：正定性 $\rho \geq 0$ 不是线性约束，它只是在 $d^2 - 1$ 维的实向量空间中选出了一个凸集，不会进一步减少参数维数。

代入 $d = 2^n$，得到

$$d^2 - 1 = (2^n)^2 - 1 = 4^n - 1.$$

这 $4^n - 1$ 个实数常被称为该密度算符的“广义 Bloch 向量”坐标。 □

*heyuchen@tgqs.net

练习 4.47 (可对易 Hamiltonian 的指数). 设 $H = \sum_{k=1}^{L} H_k$，并且对所有 j, k 有

$$[H_j, H_k] = 0.$$

证明

$$e^{-iHt} = \prod_{k=1}^{L} e^{-iH_k t} = e^{-iH_1 t} e^{-iH_2 t} \cdots e^{-iH_L t}.$$

解答. 因为所有 H_k 两两对易，线性代数中可同时对角化：存在一组正交归一基 $\{|\phi_m\rangle\}$，对所有 k 有

$$H_k |\phi_m\rangle = \lambda_{k,m} |\phi_m\rangle,$$

其中 $\lambda_{k,m} \in \mathbb{R}$。

在这组公共本征基下，

$$H |\phi_m\rangle = \Big(\sum_{k=1}^{L} H_k\Big) |\phi_m\rangle = \sum_{k=1}^{L} \lambda_{k,m} |\phi_m\rangle.$$

于是对每个本征态 $|\phi_m\rangle$，

$$e^{-iHt} |\phi_m\rangle = e^{-i\left(\sum_k \lambda_{k,m}\right)t} |\phi_m\rangle,$$
$$\prod_{k=1}^{L} e^{-iH_k t} |\phi_m\rangle = \prod_{k=1}^{L} e^{-i\lambda_{k,m} t} |\phi_m\rangle = e^{-i\left(\sum_k \lambda_{k,m}\right)t} |\phi_m\rangle.$$

两边在每个公共本征态上作用结果一致，因此算符本身相等：

$$e^{-iHt} = \prod_{k=1}^{L} e^{-iH_k t}.$$

□

练习 4.48 (模拟所需项数的界). 对一个含有 n 个粒子的体系，设每一项 H_k 最多只作用于其中的 c 个粒子（即 H_k 是一个 c 体算符）。证明在分解

$$H = \sum_{k=1}^{L} H_k$$

中，L 至多是 n 的某个多项式数量级，而不是指数级。

解答. 关键是估算可能出现的不同 k 体项的数量，其中 $1 \le k \le c$，而 c 是一个常数，且与 n 无关。

1. 选取参与相互作用的粒子个数

对固定的 k，选择作用的粒子集合有

$$\binom{n}{k}$$

种可能。当 n 很大且 k 固定时，

$$\binom{n}{k} = O(n^k).$$

2. 在选定粒子上的算符种类

对给定的一组 k 个粒子，H_k 是这 k 个比特 Hilbert 空间上的 Hermite 算符。这一空间的维数是有限的（例如用 Pauli 张量积基来展开，每个粒子有 $\{I, X, Y, Z\}$ 四种基元），因此在给定粒子集合上可写出的线性独立算符种类数是某个常数 C_k，它只依赖于 k，不依赖于系统大小 n。

因此，对固定 k，

$$\text{最多的不同 } k \text{ 体项数} \le C_k \binom{n}{k} = O(n^k).$$

3. 汇总所有阶数的相互作用

总的项数 L 满足

$$L \le \sum_{k=1}^{c} C_k \binom{n}{k} = O\big(n^1\big) + O\big(n^2\big) + \cdots + O(n^c) = O(n^c).$$

因为 c 是常数，n^c 是关于 n 的多项式级别函数，而远小于 Hilbert 空间维数 2^n 的指数级增长。这说明对局域 Hamiltonian，H 中的独立项数 L 仅多项式增长。 □

练习 4.49 (Trotter 公式的近似). 证明

$$e^{(A+B)\Delta t} = e^{A\Delta t} e^{B\Delta t} e^{-\frac{1}{2}[A,B]\Delta t^2} + O(\Delta t^3). \tag{1}$$

进而证明

$$e^{i(A+B)\Delta t} = e^{iA\Delta t} e^{iB\Delta t} + O(\Delta t^2), \tag{2}$$

$$e^{i(A+B)\Delta t} = e^{iA\Delta t/2} e^{iB\Delta t} e^{iA\Delta t/2} + O(\Delta t^3). \tag{3}$$

这里不再假设 $[A, B] = 0$。

解答. 记 Δt 为小参数，只在 Δt^3 及更高阶时统称为 $O(\Delta t^3)$。

1. 证明 (1)

左边按幂级数展开：

$$\begin{aligned} e^{(A+B)\Delta t} &= I + (A+B)\Delta t + \frac{1}{2}(A+B)^2 \Delta t^2 + O(\Delta t^3) \\ &= I + (A+B)\Delta t + \frac{1}{2}(A^2 + AB + BA + B^2)\Delta t^2 + O(\Delta t^3). \end{aligned}$$

右边先写成三项的乘积：

$$e^{A\Delta t} e^{B\Delta t} e^{-\frac{1}{2}[A,B]\Delta t^2}.$$

分别展开到所需阶数：

$$\begin{aligned} e^{A\Delta t} &= I + A\Delta t + \frac{1}{2}A^2\Delta t^2 + O(\Delta t^3), \\ e^{B\Delta t} &= I + B\Delta t + \frac{1}{2}B^2\Delta t^2 + O(\Delta t^3), \\ e^{-\frac{1}{2}[A,B]\Delta t^2} &= I - \frac{1}{2}[A,B]\Delta t^2 + O(\Delta t^4). \end{aligned}$$

先乘前两项：

$$\begin{aligned} e^{A\Delta t}e^{B\Delta t} &= \big(I + A\Delta t + \tfrac{1}{2}A^2\Delta t^2 + O(\Delta t^3)\big)\big(I + B\Delta t + \tfrac{1}{2}B^2\Delta t^2 + O(\Delta t^3)\big) \\ &= I + (A+B)\Delta t + \big(\tfrac{1}{2}A^2 + AB + \tfrac{1}{2}B^2\big)\Delta t^2 + O(\Delta t^3). \end{aligned}$$

再乘上第三项时，只有 I 与 Δt^2 项的乘积会贡献到 Δt^2 阶：

$$\begin{aligned} e^{A\Delta t}e^{B\Delta t}e^{-\frac{1}{2}[A,B]\Delta t^2} &= I + (A+B)\Delta t \\ &\quad + \big(\tfrac{1}{2}A^2 + AB + \tfrac{1}{2}B^2 - \tfrac{1}{2}[A,B]\big)\,\Delta t^2 + O(\Delta t^3). \end{aligned}$$

计算括号中的二阶系数：

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{2}A^2 + AB + \tfrac{1}{2}B^2 - \tfrac{1}{2}(AB - BA) &= \tfrac{1}{2}A^2 + AB + \tfrac{1}{2}B^2 - \tfrac{1}{2}AB + \tfrac{1}{2}BA \\ &= \tfrac{1}{2}A^2 + \tfrac{1}{2}AB + \tfrac{1}{2}BA + \tfrac{1}{2}B^2 \\ &= \frac{1}{2}(A^2 + AB + BA + B^2). \end{aligned}$$

恰好与左边展开式中的二阶项一致，因此得到 (1)。

2. 推出一阶 Trotter 公式 (2)

在 (1) 中令 $A \to iA$，$B \to iB$，得到

$$e^{i(A+B)\Delta t} = e^{iA\Delta t}e^{iB\Delta t}e^{-\frac{1}{2}[iA,iB]\Delta t^2} + O(\Delta t^3).$$

由于 $[iA, iB] = i^2[A,B] = -[A,B]$，有

$$e^{-\frac{1}{2}[iA,iB]\Delta t^2} = e^{\frac{1}{2}[A,B]\Delta t^2} = I + O(\Delta t^2).$$

于是

$$e^{i(A+B)\Delta t} = e^{iA\Delta t}e^{iB\Delta t} + O(\Delta t^2),$$

得到一阶 Trotter 公式。

3. 推出对称 Trotter 公式 (3)

考虑对称乘积

$$S(\Delta t) := e^{iA\Delta t/2}e^{iB\Delta t}e^{iA\Delta t/2}.$$

我们分别展开三项到二阶：

$$\begin{aligned} e^{iA\Delta t/2} &= I + \frac{iA}{2}\Delta t - \frac{A^2}{8}\Delta t^2 + O(\Delta t^3), \\ e^{iB\Delta t} &= I + iB\Delta t - \frac{B^2}{2}\Delta t^2 + O(\Delta t^3). \end{aligned}$$

将它们相乘（过程有些繁琐，但只是普通代数展开），收集到 Δt^2 为止，得到

$$S(\Delta t) = I + i(A+B)\Delta t - \frac{1}{2}(A^2 + AB + BA + B^2)\Delta t^2 + O(\Delta t^3).$$

另一方面，直接展开

$$e^{i(A+B)\Delta t} = I + i(A+B)\Delta t - \frac{1}{2}(A+B)^2\Delta t^2 + O(\Delta t^3),$$

而

$$(A+B)^2 = A^2 + AB + BA + B^2.$$

因此两者在 $\Delta t^0, \Delta t^1, \Delta t^2$ 的系数完全相同，差别只出现在三阶及更高阶项：

$$e^{i(A+B)\Delta t} = e^{iA\Delta t/2} e^{iB\Delta t} e^{iA\Delta t/2} + O(\Delta t^3).$$

这就是对称 Trotter 分解。 □

练习 4.50. 设

$$H = \sum_{k=1}^{L} H_k, \qquad U_{\Delta t} = \left(e^{-iH_1\Delta t} \cdots e^{-iH_L\Delta t}\right)\left(e^{-iH_L\Delta t} \cdots e^{-iH_1\Delta t}\right).$$

1. 证明

$$U_{\Delta t} = e^{-2iH\Delta t} + O(\Delta t^3).$$

2. 利用盒子 *4.1* 中的误差叠加结论，证明存在常数 α，使得对任意正整数 m 有

$$E\left(U_{\Delta t}^m, e^{-2miH\Delta t}\right) \le m\alpha\Delta t^3,$$

其中 $E(U,V)$ 是量子门之间的距离度量。

解答. **(1) 单步近似误差是** $O(\Delta t^3)$

对 $L=1$ 的情形，$U_{\Delta t} = e^{-iH_1\Delta t} e^{-iH_1\Delta t} = e^{-2iH_1\Delta t}$，结论严格成立。

下面对 L 使用归纳法。记

$$H^{(L)} := \sum_{k=1}^{L} H_k,$$

并对 $H_1, \ldots, H_L$ 定义

$$U_{\Delta t}^{(L)} := \left(e^{-iH_1\Delta t} \cdots e^{-iH_L\Delta t}\right)\left(e^{-iH_L\Delta t} \cdots e^{-iH_1\Delta t}\right).$$

归纳假设：对 $L-1$ 个项，有

$$U_{\Delta t}^{(L-1)} = e^{-2iH^{(L-1)}\Delta t} + O(\Delta t^3), \quad H^{(L-1)} = \sum_{k=2}^{L} H_k.$$

注意 $U_{\Delta t}^{(L)}$ 可写为

$$U_{\Delta t}^{(L)} = e^{-iH_1\Delta t}\, U_{\Delta t}^{(L-1)}\, e^{-iH_1\Delta t}.$$

另一方面，把 Hamiltonian 分成两部分

$$H = H_1 + K, \qquad K := \sum_{k=2}^{L} H_k = H^{(L-1)}.$$

根据上一题得到的对称 Trotter 公式 (3)，对总时间 $2\Delta t$ 有

$$e^{-2i(H_1+K)\Delta t} = e^{-iH_1\Delta t} e^{-2iK\Delta t} e^{-iH_1\Delta t} + O(\Delta t^3).$$

利用归纳假设 $U_{\Delta t}^{(L-1)} = e^{-2iK\Delta t} + O(\Delta t^3)$，将 $e^{-2iK\Delta t}$ 用 $U_{\Delta t}^{(L-1)}$ 代换，会多出一个 $O(\Delta t^3)$ 的误差。于是

$$\begin{aligned} U_{\Delta t}^{(L)} &= e^{-iH_1\Delta t}\, U_{\Delta t}^{(L-1)}\, e^{-iH_1\Delta t} \\ &= e^{-iH_1\Delta t} e^{-2iK\Delta t} e^{-iH_1\Delta t} + O(\Delta t^3) \\ &= e^{-2i(H_1+K)\Delta t} + O(\Delta t^3) = e^{-2iH\Delta t} + O(\Delta t^3). \end{aligned}$$

结合 $L = 1$ 的基础情形，归纳成立。因此题中 $U_{\Delta t} = U_{\Delta t}^{(L)}$ 满足

$$U_{\Delta t} = e^{-2iH\Delta t} + O(\Delta t^3).$$

(2) 多步演化的误差上界

上一问说明存在常数 $\alpha > 0$ 使得单步误差有界：

$$E\big(U_{\Delta t}, e^{-2iH\Delta t}\big) \le \alpha \Delta t^3.$$

考虑 m 步演化。理想演化为

$$U_{\text{ideal}} = \big(e^{-2iH\Delta t}\big)^m = e^{-2miH\Delta t},$$

实际实现为

$$U_{\text{approx}} = U_{\Delta t}^m.$$

盒子 4.1 给出的误差叠加结论可以概括为：若一串理想门 $U_1, \ldots, U_m$ 分别被近似门 $V_1, \ldots, V_m$ 代替，则

$$E(V_m \cdots V_1,\, U_m \cdots U_1) \le \sum_{j=1}^{m} E(V_j, U_j).$$

在本题中每一步都是同一个门，

$$U_j = e^{-2iH\Delta t}, \quad V_j = U_{\Delta t},$$

从而

$$\begin{aligned} E\big(U_{\Delta t}^m, e^{-2miH\Delta t}\big) &\le \sum_{j=1}^{m} E(U_{\Delta t}, e^{-2iH\Delta t}) \\ &\le \sum_{j=1}^{m} \alpha \Delta t^3 = m\alpha\Delta t^3. \end{aligned}$$

证毕。 $\square$

练习 4.51. 构造一个量子线路，来模拟三比特 *Hamiltonian*

$$H = X_1 \otimes Y_2 \otimes Z_3$$

在任意时间步长 Δt 下的酉演化

$$U(\Delta t) = e^{-i\Delta t H}.$$

要求线路只使用单比特门和 *CNOT* 门等标准基本门。

解答. 标准做法分三步：

1. 用局域基变换把 X, Y, Z 都变成 Z；
2. 在 Z 基下实现 $e^{-i\Delta t Z_1 Z_2 Z_3}$；
3. 再把基变换还原。

1. 把 X, Y, Z 变成 Z

找单比特酉算符 u_j 使得

$$u_1 X u_1^\dagger = Z, \quad u_2 Y u_2^\dagger = Z, \quad u_3 Z u_3^\dagger = Z.$$

常用的选择：

$$u_1 = H, \qquad u_2 = R_x\left(\frac{\pi}{2}\right), \qquad u_3 = I,$$

其中 $R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2}$。可以验证（在 Bloch 球上就是围绕 x 轴旋转 $90°$）：

$$HXH = Z, \qquad R_x\left(\frac{\pi}{2}\right) Y R_x\left(-\frac{\pi}{2}\right) = Z.$$

令

$$U_{\text{loc}} := u_1 \otimes u_2 \otimes u_3,$$

则

$$U_{\text{loc}}\, H\, U_{\text{loc}}^\dagger = Z_1 \otimes Z_2 \otimes Z_3.$$

于是

$$e^{-i\Delta t H} = U_{\text{loc}}^\dagger\, e^{-i\Delta t Z_1 Z_2 Z_3}\, U_{\text{loc}}.$$

在量子线路中,算符作用顺序从右到左,因此电路顺序是:先作用 U_{loc},再实现 $e^{-i\Delta t Z_1 Z_2 Z_3}$,最后作用 $U_{\text{loc}}^\dagger$。

2. 在 Z 基下实现 $e^{-i\Delta t Z_1 Z_2 Z_3}$

$Z_1 Z_2 Z_3$ 对计算基态 $|x_1 x_2 x_3\rangle$ 的本征值为

$$Z_1 Z_2 Z_3 \, |x_1 x_2 x_3\rangle = (-1)^{x_1 + x_2 + x_3} \, |x_1 x_2 x_3\rangle \, .$$

因此

$$e^{-i\Delta t Z_1 Z_2 Z_3} \, |x_1 x_2 x_3\rangle = e^{-i\Delta t (-1)^{x_1 + x_2 + x_3}} \, |x_1 x_2 x_3\rangle \, .$$

我们可以用 CNOT 计算出三比特的奇偶性 $x_1 \oplus x_2 \oplus x_3$，暂存在第 3 个比特上，然后对第 3 个比特施加单比特 Z 旋转 $R_z(2\Delta t)$，最后“解算”回去。

- 计算奇偶性：对初态 $|x_1x_2x_3\rangle$，依次作用

$$\mathrm{CNOT}(1\to 3),\quad \mathrm{CNOT}(2\to 3),$$

  可以检查此时第 3 个比特变为 $|x_1\oplus x_2\oplus x_3\rangle$。

- 在第 3 个比特上施加

$$R_z(2\Delta t)=e^{-i\Delta t Z}=\begin{pmatrix} e^{-i\Delta t} & 0 \\ 0 & e^{i\Delta t}\end{pmatrix}.$$

  这样，当奇偶性为 0 时得到相位 $e^{-i\Delta t}$，为 1 时得到相位 $e^{i\Delta t}$，正好对应 $(-1)^{x_1+x_2+x_3}$。

- 再依次作用

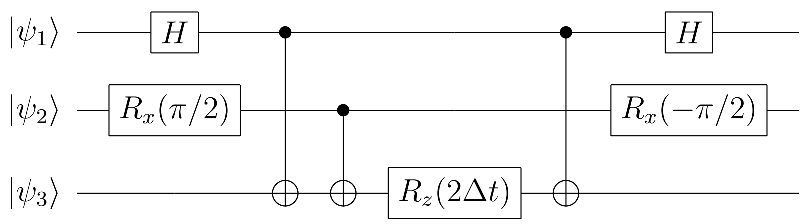
$$\mathrm{CNOT}(2\to 3),\quad \mathrm{CNOT}(1\to 3),$$

  把寄存的奇偶性擦除，恢复三个比特的计算基值，只留下全局相位。

因此该 CNOT 梯子加一次 $R_z(2\Delta t)$ 的组合实现了 $e^{-i\Delta t Z_1Z_2Z_3}$。

3. 完整线路

综合以上三步，得到模拟 $e^{-i\Delta t X_1Y_2Z_3}$ 的电路：



其中：

- 左侧 H、$R_x(\pi/2)$ 是局域基变换 U_{loc}；
- 中间一串 CNOT 和 $R_z(2\Delta t)$ 实现 $e^{-i\Delta t Z_1Z_2Z_3}$；
- 右侧 H、$R_x(-\pi/2)$ 是 $U_{\mathrm{loc}}^\dagger$。

该线路只使用单比特旋转门与 CNOT，满足题目要求。 □