量子计算简介

Le Yang
yangle0125@qq.com

第一部分　基本概念

1　量子比特

1.1　单量子比特

经典比特有一个状态，或者是 0，或者是 1。

量子比特也有一个状态，其可能的两种取值为 $|0\rangle$，$|1\rangle$。量子比特与经典比特的区别在于，量子比特可以是上述两个状态的线性组合，称为叠加态 (superposition)。例如

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \tag{1}$$

其中 α 和 β 是复数。在测量量子比特时，我们得到 0 的概率是 $|\alpha|^2$; 得到 1 的概率是 $|\beta|^2$。因此我们有 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$。

一个今后常用的状态称之为 $|+\rangle$，其定义为

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \tag{2}$$

因为 α 和 β 是模长和为 1 的复数，假定其幅角之差为 ϕ, 我们就可以将两者写作 $\alpha = \cos\frac{\theta}{2}e^{i\delta}$, $\beta = \sin\frac{\theta}{2}e^{i(\delta+\phi)}$。故而

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}e^{i\delta}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i(\delta+\phi)}|1\rangle \\ &= e^{i\delta}(\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|1\rangle)\end{aligned} \tag{3}$$

其中 $e^{i\delta}$, 称作共同相位（global phase）。因为对 $|0\rangle$、对 $|1\rangle$ 都一样影响，不具有观测效应，故可以将之舍弃不看。至于相对相位 (relative phase)$e^{i\phi}$, 就不同了，它的影响可以在球面上表现出来。故得

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|1\rangle \tag{4}$$

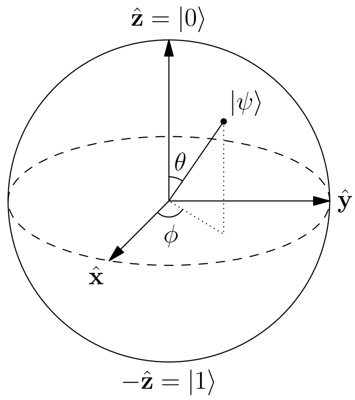

图 1: Bloch Sphere

1.2 多量子比特

Hilbert 空间很大。

— Carlton Caves

一个双量子比特有四种基态，分别记为 $|00\rangle$，$|01\rangle$，$|10\rangle$，$|11\rangle$。因此，描述双量子比特的状态向量为

$$|\psi\rangle = a_{00}\,|00\rangle + a_{01}\,|01\rangle + a_{10}\,|10\rangle + a_{11}\,|11\rangle \tag{5}$$

类似单比特的情况，测量得到 $|x\rangle$ 的概率为 $|a_x|^2$，故有归一化条件

$$\sum_{x\in\{0,1\}^2} |a_x|^2 = 1 \tag{6}$$

不过，对于双量子比特，我们还有可能只测量其中一个比特，例如第一个。如你所想，测量第一个比特得到 0 的概率为 $|a_{00}|^2 + |a_{01}|^2$。而测量后的状态为

$$|\psi'\rangle = \frac{a_{00}\,|00\rangle + a_{01}\,|01\rangle}{\sqrt{|a_{00}|^2 + |a_{01}|^2}} \tag{7}$$

注意这里的概率幅仍满足归一化条件。

双量子比特中有一个重要的状态，称之为 Bell 态或 EPR 对，其定义为

$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \tag{8}$$

Bell 态的性质是当测量第一量子比特时，以 1/2 概率得到 0, 进入测后状态 $|\psi'\rangle = |00\rangle$; 同样也会以 1/2 概率得到 1, 进入测后状态 $|\psi'\rangle = |11\rangle$。结果是，测量第二量子比特总会得到与第一量子比特一样的结果。也就是说，测量结果是相关的。

更一般地，可以考虑 n 量子比特系统。其基态形如 $|x_1x_2\cdots x_n\rangle$。其状态由 2^n 个概率幅所确定。n = 500 时，这个数字就已经超过了整个宇宙中原子的估算总数。所以 Hilbert 空间确实是个巨大的空间。然而即使是包含几百个原子的系统，大自然也要处理如此巨量的数据。看起来为了进一步的计算系统的演化，大自然需要在手边放上 2^{500} 张看不见的草稿纸。

一个大胆的设想是，我们是否能够—以及如何才能—利用如此强大的计算能力呢？

2 量子计算

2.1 单量子比特门

量子状态 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ 写成向量形式

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \tag{9}$$

其中上面一项代表 0 的幅度，而下面一项代表 1 的幅度。容易想到矩阵

$$X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{10}$$

可使两者互换，即

$$X \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix} \tag{11}$$

容易验证，$X|0\rangle = |1\rangle$，以及 $X|1\rangle = |0\rangle$。因此 X 就是量子非门。

如果一个矩阵可以表示一个量子门，那么对这个矩阵有什么要求呢？回忆归一化条件，归一化条件要求向量 $\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ 模长为 1。即 $\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = 1$。显然，经过一个合法的量子门转换后，其结果仍应满足归一化条件，我们就有 $(X\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix})^T(X\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}) = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}^T X^T X \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = 1$。因此，$X^T X = I$。其中 I 是单位矩阵。实际上，由于 X 是复矩阵，前述的转置准确来说应该是共轭转置，即表示量子门的复矩阵应满足条件

$$X^\dagger X = I \tag{12}$$

其中 $X^\dagger$ 是 X 的共轭转置。满足上述条件的矩阵数学上称为酉矩阵。令人惊奇的是，酉性是对量子门的唯一限制; 每一个酉矩阵都定义了一个有效的量子门。

让我们继续，后面我们常会用到另外两个量子门，它们分别是 Z 门

$$Z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{13}$$

它保持 $|0\rangle$ 不变而反转 $|1\rangle$ 为 $-|1\rangle$，以及 Hadamard 门

$$H \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \tag{14}$$

它将 $|0\rangle$ 变为 $\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$, 且将 $|1\rangle$ 变为 $\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}$。Hadamard 门是最有用的量子门之一。