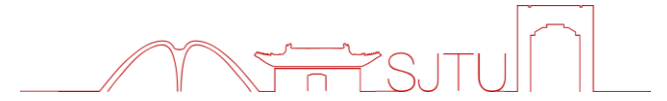




上海交通大学  
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY



# 量子计算入门

马汝辉 副教授、博导  
计算机科学与工程系  
上海交通大学

饮水思源 · 爱国荣校



1

背景知识

2

量子计算基础

3

案例分析：量子机器学习

# 01

## 背景知识

- 三问量子计算
- 量子计算的发展
- 量子计算软件介绍



# 什么是量子计算?



- ❶ 量子计算是一种遵循量子力学规律调控量子信息单元进行计算的新型计算模式。在理解量子计算的概念时，通常将它和经典计算相比较。
- ❷ 经典计算使用2进制的数字电子方式进行运算，而二进制总是处于0或1的确定状态。
- ❸ 量子计算和现有的计算模式完全不同，它借助量子力学的叠加特性，能够实现计算状态的叠加，它不仅包含0和1，还包含0和1同时存在的叠加态（Superposition）。



经典计算与量子计算的区别





# 什么是量子计算?



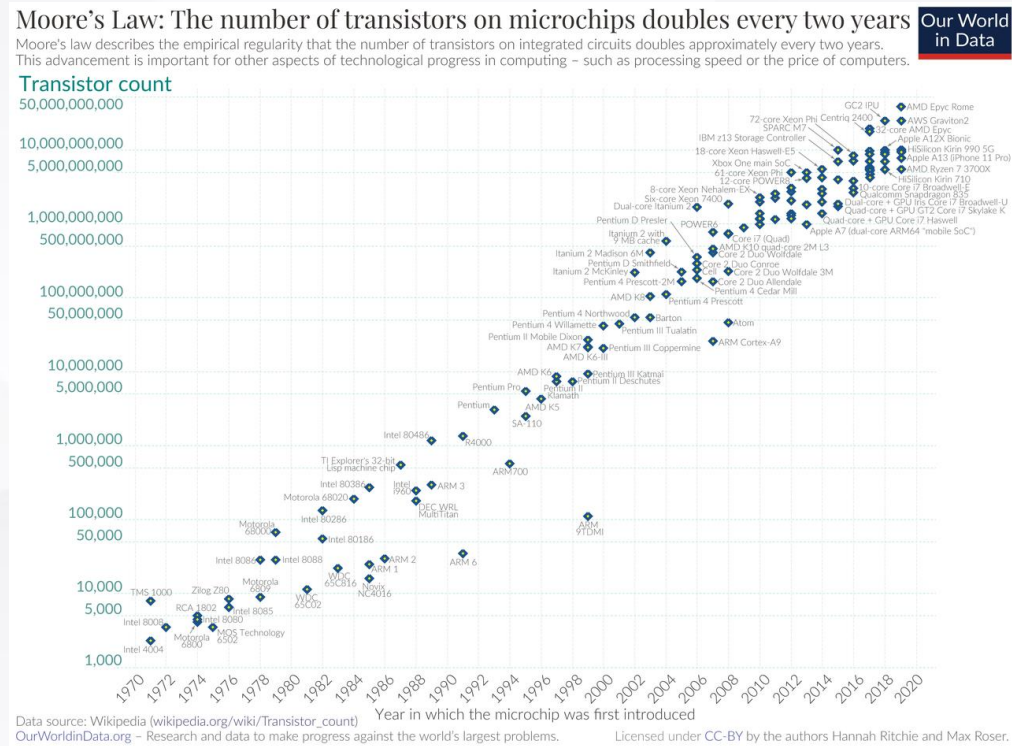
- ④ 普通计算机中的2位寄存器在某一时间仅能存储4个二进制数 (00、01、10、11) 中的一个
- ④ 量子计算机中的2位量子位 (qubit) 寄存器可同时存储这四种状态的叠加状态
- ④ 随着量子比特数目的递增, 对于n个量子比特而言, 量子信息可以处于**2种可能状态的叠加**, 配合量子力学演化的并行性, 可以展现比传统计算机更快的处理速度
- ④ 量子纠缠 (Entanglement) 等特性, 理论上, 量子计算机相较于当前使用最强算法的经典计算机



# 为什么需要量子计算?



- 根据摩尔定律，集成电路上可容纳的晶体管数目每隔约18-24个月增加一倍，性能也相应增加一倍。
- 挑战一：随着芯片元件集成度的不断提高，芯片内部单位体积内散热也相应增加，再由于现有材料散热速度有限，就会因“**热耗效应**”产生计算上限。
- 挑战二：元器件尺寸的不断缩小，在纳米甚至更小尺度下经典计算世界的物理规律将不再适用，产生“**尺寸效应**”。



## 摩尔定律





# 为什么需要量子计算?



- ④ 量子计算的基本思想是利用量子力学的规则和思想来处理问题和信息，遵循这样的思维导向可以轻易了解到量子计算的优势所在。
- ④ 在传统的计算机中，每当输入对应数量的信息，电脑即会相应地输出对应的数据；
- ④ 而如今将量子力学应用在计算机硬件设备中并且输入信息，就不仅是有序提供一些输入和读出数据那么简单，利用量子叠加态定律可实现一键式处理多个输入的强并行性；与传统的程序相比，这是一个指数级的加速和飞跃。
- ④ 除了理论意义上的计算速度的增长，量子计算还具有在**不同领域**发挥作用的现实可能性。



- ① **大数据检索**: 在当前的大数据和人工智能时代, 量子计算可以解决海量的数据检索问题
- ② **量子模拟**: 在量子模拟方面, 特别是生化制药中, 量子模拟有望利用相应的量子算法在更长的时间范围内准确地进行分子模拟, 从而实现当前技术水平无法做到的精确建模
- ③ **金融计算**: 量子计算影响金融服务行业的方式是解决复杂的优化问题, 如投资组合风险优化和欺诈检测。量子计算可以更好地确定有吸引力的投资组合



大数据检索



量子模拟



金融计算





# 为什么需要量子计算?



- ① **大数据检索:** 在人工智能方面, 量子计算能有效提高机器学习的深度和速度, 突破人工智能发展的瓶颈。
- ② **现代农业:** 量子计算机能够快速分析化学催化过程, 并提出最佳的催化剂组合来产生氨。
- ③ **云计算:** 量子云计算正在成为富有前景的领域。量子云平台可以简化编程, 并提供对量子计算机的低成本访问。



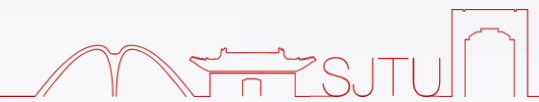
人工智能



现代农业



云计算





# 谁在研究量子计算?



⊙ D-Wave、谷歌、Rigetti Computing、1Qbit、IBM等都是研发量子计算的世界领军机构。





# 谁在研究量子计算?



机构	总部	研究进展
D-Wave	加拿大	<ul style="list-style-type: none"> <li>2011年5月11日正式发布了全球第一款商用型量子计算机“D-Wave One”。</li> <li>2017年1月，D-Wave公司推出D-Wave 2000Q，其声称该系统由2000个qubit构成，可以用于求解最优化、网络安全、机器学习和采样等问题。</li> </ul>
谷歌	美国	2016年，谷歌与加州大学合作布局超导量子计算，报道了9位超导量子比特的高精度操控，并购买了初创企业D-Wave公司的量子退火机，探索人工智能领域。
微软	美国	微软的量子技术采用“拓扑量子比特 (Topological qubit)”进行计算，而不是普通的“逻辑量子比特 (logical qubit)”。
Intel	美国	在CES 2018 (国际消费类电子产品展览会)，英特尔正式展示了49量子比特的超导量子计算芯片。
IBM	美国	IBM在CES 2019正式亮相了Q System One，将其宣传为“世界上为商用和科研打造的首个全面集成化的通用量子计算系统”，拥有20个量子位的计算力。
阿里巴巴	中国	2018年5月8日，阿里巴巴宣布已经研制出世界上运算最快的量子电路模拟器“太章”，并已成功模拟了81 (9x9) 比特40层基准的谷歌随机量子电路。
百度	中国	2018年3月8日上午，百度宣布成立量子计算研究所，开展量子计算软件和信息技术应用业务研究。
本源量子	中国	2017年9月11日，本源量子计算科技有限责任公司成立。 目前已研制出量子比特处理器玄微XW B2-100、量子测控一体机OriginQ Quantum AIO，并且上线了本源量子计算云平台、发布了完全自主的高级量子编程语言QRunes、量子编程软件开发工具QPanda等产品。



对于量子计算的真正发展，业界普遍认为源自20世纪最具丰富多彩科学家，诺贝尔奖获得者Richard Feynman在1982年一次公开演讲中提出的两个问题：

□经典计算机是否能够有效地模拟量子系统？

不可能，因为目前没有任何可行的方法，可以求解出这么多变量的微分方程。

□如果放弃经典的图灵机模型，是否可以做得更好？

Richard Feynman提出如果拓展一下计算机的工作方式，不使用逻辑门来建造计算机，而是一些其他的東西，比如分子和原子。



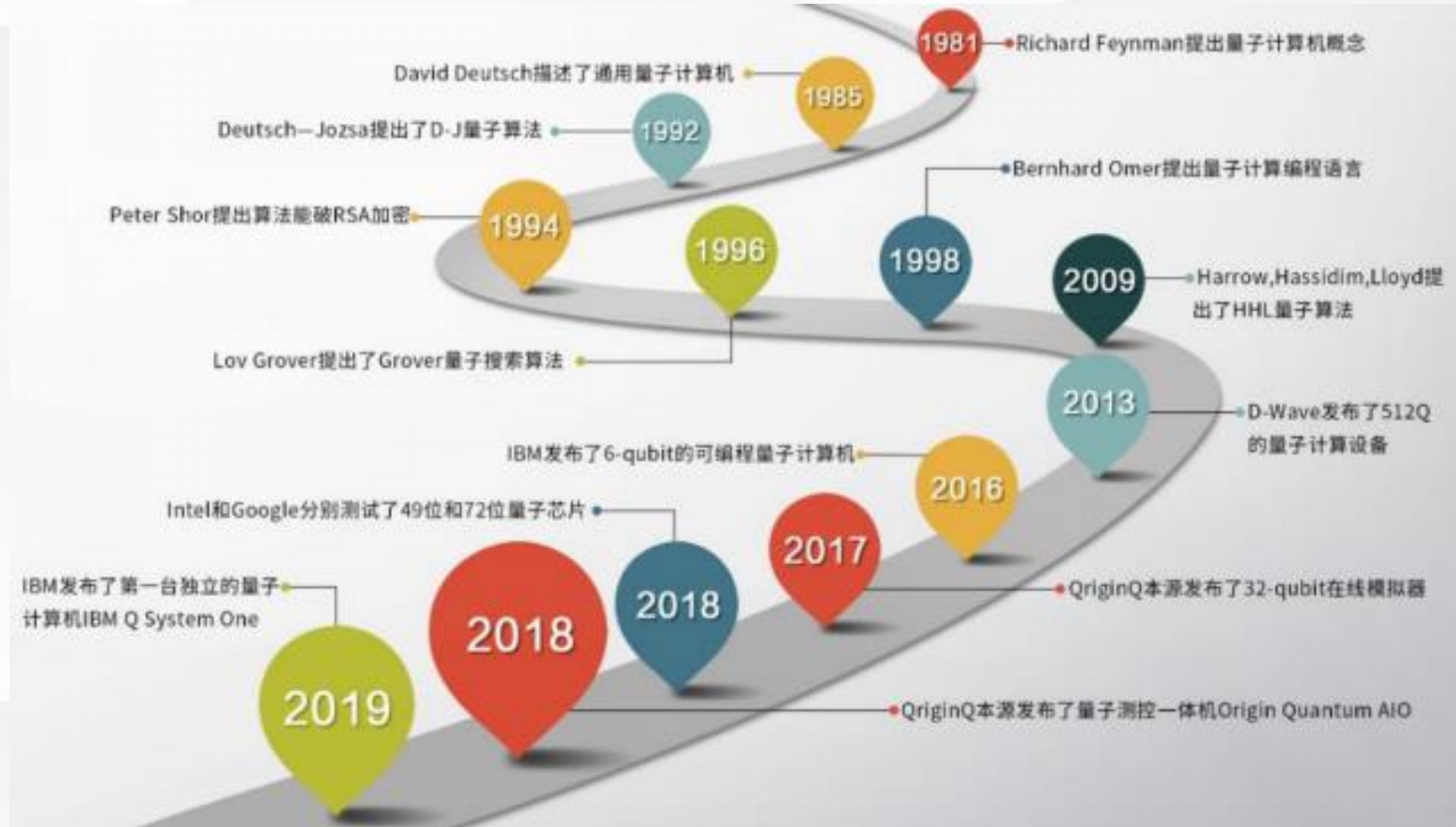
理查德·费曼



# 量子计算的发展



此后，计算机科学家们一直在努力攻克这一艰巨挑战。伴随时代发展的趋势，在20世纪90年代，量子计算机的算法发展得到了巨大的进步。

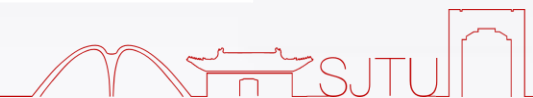




# 量子计算的发展



年份	发展	年份	发展
1992年	Deutsch和Jozsa提出了D-J量子算法	2013年	加拿大D-Wave系统公司发布了512Q的量子计算设备
1994年	Peter Shor提出了Shor算法	2016年	IBM发布了6量子比特的可编程量子计算机
1996年	Lov Grover提出了Grover量子搜索算法	2017年	本源量子发布了32位量子计算虚拟系统
1998年	Bernhard Omer提出量子计算编程语言	2018年	Intel和Google分别测试了49位和72位量子芯片
2009年	MIT三位科学家联合开发了一种求解线性系统的HHL量子算法	2018年12月6日	本源量子发布了第一款测控一体机Origin Quantum AIO
		2019年1月	IBM发布了世界上第一台独立的量子计算机IBM Q System One

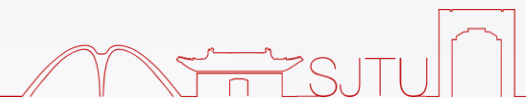
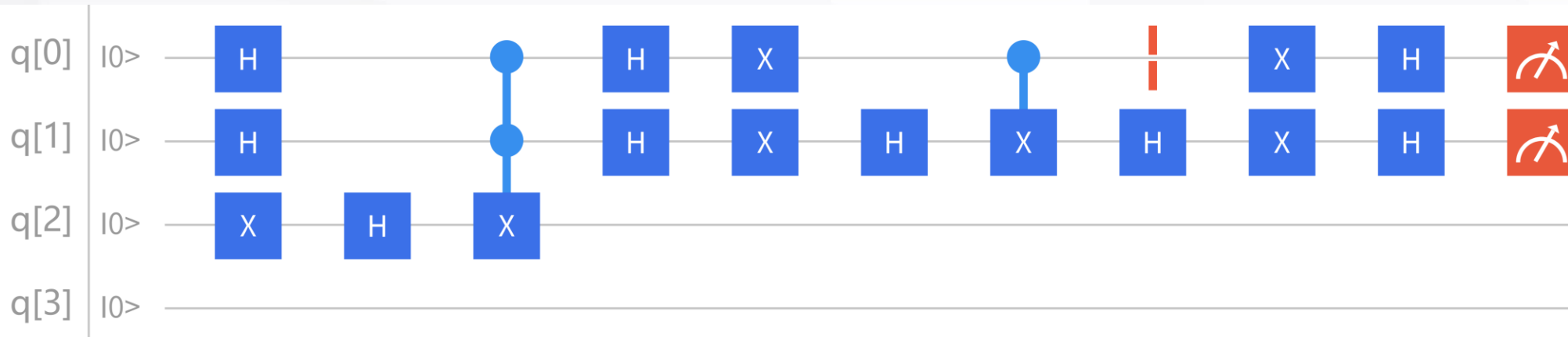




# 量子计算软件介绍—量子语言



- 由于当前量子计算机的通用体系架构未得到统一，在硬件层面上的技术路线也未最终确定，所以目前还无法确定哪种量子机器指令集相对更科学、更合理。
- 现阶段在量子计算编程领域的研究者们大多从“量子线路图”、“量子计算汇编语言”、“量子计算高级编程语言”的方式入手，不断寻找未来可能最受量子计算机发展欢迎的编程语言。
- 在量子比特数量较少的前提条件下，量子线路图是大多数从事量子计算的研究者一开始采用的最广泛的形式，目前大多数的量子计算平台（如本源量子计算云平台、IBM Q平台）均支持这一编程方式。





随着量子计算技术研究的不断深入，人类能够使用的量子比特数量也逐步增长，在这种情况下，量子线路图的编程方式显然无法适应研究需要了，量子汇编语言应用而生。

- QASM

- 本源推出的初代量子计算汇编语言 Qrunes

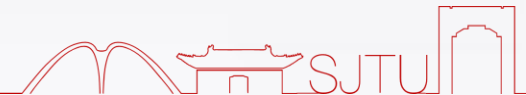
- Rigetti 提出的 Quil

在经典计算世界，高级编程语言分为命令式和函数式两大类，而在量子计算编程领域，同样适用。

- 命令式：将经典代码和量子代码组合在同一程序中的 QCL、微软开发的 Q#、适用于量子退火器的 QMASM

- 函数式：Peter Selinger 定义的两类密切相关的量子编程语言 QFC 和 QPL、微软研究院 Station Q 工作的 LIQUI|>、Quipper

- 现有的量子编程语言包含经典控制结构，例如循环和条件执行，并允许对经典和量子数据进行操作；量子编程语言有助于使用高级构造表达量子算法。







# 量子计算软件介绍—量子软件开发包



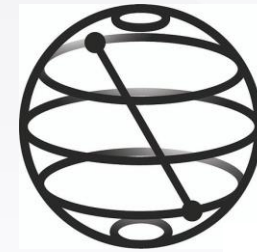
- 随着量子语言的不断成熟，量子计算行业中各类量子软件开发包层出不穷，它们提供着各种量子编程工具，诸如各类数据库、代码示例、程序开发的流程和指南，允许开发人员在特定量子平台上创造量子软件应用程序等。
- 量子软件开发工具分为两大类：一类是**可以访问量子处理器的SDK**，一类是**基于量子计算模拟器的SDK**。

- 类型一允许开发者在原型量子器件和量子模拟器上运行量子电路

- 苏黎世联邦理工学院开发的ProjectQ、IBM的qiskit、Rigetti的Forest

- 类型二采用量子模拟器制作的量子软件开发包

- 微软的Q#开发套件、Google的Cirq以及本源的QPanda

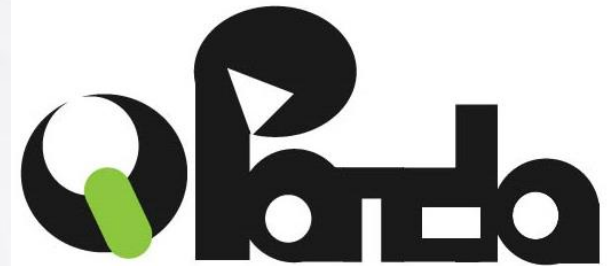


# Qiskit



## Cirq

An open source framework for programming quantum computers





- ❶ 量子态非常“挑剔”——它们需要在非常低的温度下储存，否则可能会受到干扰和破坏。
- ❷ 越来越多的量子计算公司、研究机构发布了各自的量子计算云平台，已知的包括IBM的Quantum Experience、Rigetti的 Forest、本源量子计算云平台等，主要的目的是在量子计算领域占得先机。



本源量子云计算平台

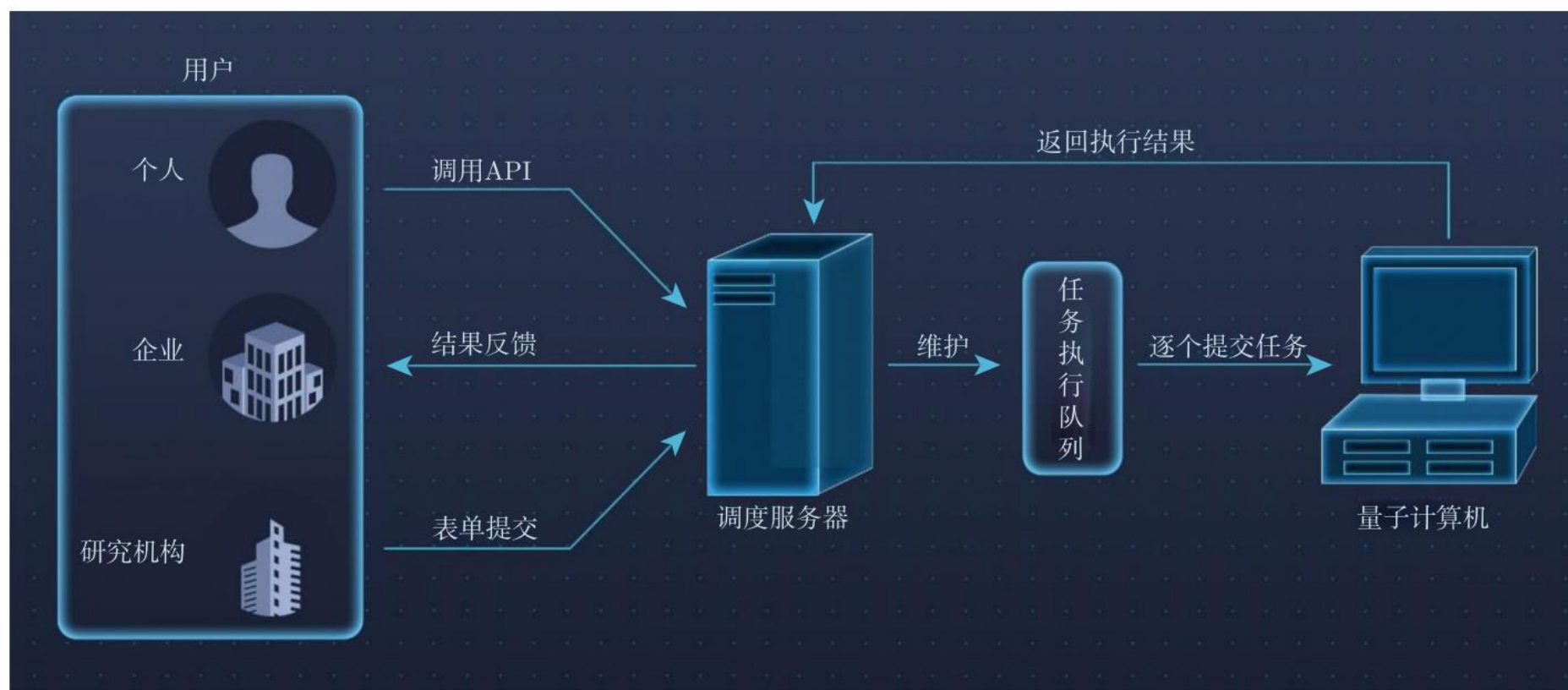




# 量子计算软件介绍—量子云平台



量子云平台，全称应该是量子云计算平台；一定程度上可以理解为用户与各家公司、研究机构的量子计算机之间的介质平台；用户通过量子云平台经由调度服务器和互联网向部署在远程的量子计算机提交任务，量子计算机在处理这些任务后再通过调度服务器和互联网将结果返回给用户。



量子云平台计算流程图



# 02

## 量子计算基础

- 量子力学基础理论
- 量子程序



## 量子力学基础理论

- 量子系统

- 观测量和计算基下的测量

## 量子程序

- 量子计算原理



## 量子化 Quantization与量子态 Quantum State

- 量子态就是一个微观粒子的状态。
- 描述一个粒子的状态时，总要找一些能够用来区分微观粒子的属性。在宏观世界中，假设一个人在一栋楼中活动，如果他在一层，就称处于“1态”；在二层，就称处于“2态”；在地下一层，就称处于“-1态”。微观粒子也有这样的属性，比如它的位置。
- 假设这个人正在上楼梯，进入到一个模糊的状态，这样就不太容易区分到底是在“1态”还是“2态”，此时就需要找一些客观存在的参数去描述这一方面的属性，比如所处的海拔。通常，在日常生活中，这些描述都是连续的，因为这些参数会被分割成更小的部分。





## 量子化 Quantization与量子态 Quantum State

- 无限分割下去，直到不得不靠“几个原子”这种单位去描述物体的长度时，量子效应就出场了。薛定谔方程告诉人们，一定会遇到不可分割的最小单位，这种最小单位，统称为量子；这种现象，被称为量子化。这是量子的第一个特性。
- 以一栋楼为例，在微观的世界里面，一栋楼的楼梯被拆掉了，这使得微观粒子要么在一楼，要么在二楼，仅存在于整数的楼层，但是，这不代表微观粒子就失去了上下楼的机会。这里就是量子的第二个特性——跃迁。





## 量子叠加性 Quantum Superposition

量子叠加性是量子的第三个特性。量子理论中，薛定谔的猫的故事是量子叠加性的一个典型示例，故事的末尾告诉我们：猫处于生与死的叠加态。

## 状态的演化 Evolution of State

状态的演化是指量子态随时间发生变化。对于一个两能级的量子系统，量子状态的演化类似于地球上的位置随时间变化一样，量子态可以想象成一个单位球面上的点，它随时间演化就同球面上点的位置随时间发生变化类似



薛定谔的猫





## 测量和坍缩 Measurement And Collapse

- 薛定谔宣称，不打开盒子，猫就处于生和死的“叠加态”，又称：“当我们打开盒子，经过了我们的观察，猫就会坍缩到一个确定的生、死状态上”。
- **量子的第四个特性**：对于一个叠加态而言，可以去测量它，测量的结果一定是这一组量子化之后的、确定的、分立的态中的一个。



薛定谔的猫



下面将用数学的方式将这些概念重新表述一遍。

## 1) 态矢 State Vector

量子态可用线性代数中的向量来描述，在物理学中，向量常称作矢量。在量子理论中，描述量子态的向量称为态矢，态矢分为左矢和右矢。

右矢 (ket) :

$$|\psi\rangle = [c_1, c_2, \dots, c_n]^T$$

左矢 (bra) :

$$\langle\psi| = [c_1^*, c_2^*, \dots, c_n^*]$$



## 2) 内积和外积

对于任意的两个量子态的矩阵（坐标）表示如下：

$$|\alpha\rangle = [a_1, a_2, \dots, a_n]^T$$

$$|\beta\rangle = [b_1, b_2, \dots, b_n]^T$$

其内积定义为：

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \sum_{i=1}^n a_i^* b_i$$

其外积定义为：

$$|\alpha\rangle\langle\beta| = [a_i b_j^*]_{n \times n}$$

表示一个  $n \times n$  矩阵。



## 3) 两能级系统 Two Level System

- 对于微观量子而言，有一个决定粒子性质的最直接参量——能量。粒子的能量只会在几个分立的能级上面取值，限制取值的可能性种类为两种，这就构成了两能级系统。
- 除了某些特殊的情况之外，这两个能级必定能找出来一个较低的，称之为基态(ground state)，记为  $|g\rangle$ ；另一个能量较高的，称之为激发态(excited state)，记为  $|e\rangle$ 。

$$|e\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, |g\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- 和经典的比特类比，常将  $|e\rangle$  记做  $|0\rangle$ ，将  $|g\rangle$  记做  $|1\rangle$ ，并称  $|1\rangle$  之为量子比特 (quantum bits)
- 任意叠加态 (superposition)  $|\psi\rangle$  可以写作  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  的线性组合

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$





## 4) 状态的演化 Evolution of State

- 量子态可以由态矢（或称向量）来表示，量子也可以有不同的状态，并且可以同时处于不同的状态，那么量子态是如何随时间演化呢？
- 假设：封闭的(closed)量子系统的演化（evolution）由酉变换（unitary transformation）来描述。具体地，在  $t_1$  时刻系统处于状态  $|\psi_1\rangle$ ，经过一个和时间  $t_1$  和  $t_2$  有关的酉变换  $U$ ，系统在  $t_2$  时刻的状态

$$|\psi_2\rangle = U |\psi_1\rangle$$

- 这里的酉变换  $U$  可以理解为是一个矩阵，并且满足

$$UU^\dagger = I$$



## 4) 状态的演化 Evolution of State

□量子计算中，各种形式的酉矩阵被称作量子门。例如Pauli矩阵也是一组酉矩阵，

$$\begin{aligned}\sigma_0 \equiv I &\equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} & \sigma_1 \equiv \sigma_x \equiv X &\equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma_2 \equiv \sigma_y \equiv Y &\equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} & \sigma_3 \equiv \sigma_z \equiv Z &\equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\end{aligned}$$

□以X门作用在量子态上为例，

$$X|0\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |1\rangle$$

$$X|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |0\rangle$$

$$X|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix}$$

□量子态的演化本质上可以看作是对量子态对应的矩阵做变换，即是做矩阵的乘法。





## 5) 叠加态和测量 Superposition State And Measurement

按照态矢的描述，这两个矢量可以构成一个二维空间的基。任何一个态都可以写为这两个基在复数空间上的线性组合，即

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta e^{i\theta}|1\rangle$$

其中  $e^{i\theta}$  表示模为1幅角为  $\theta$  的复数。

可以定义测量就是将量子态  $|\psi\rangle$  投影到另一个态  $|\alpha\rangle$  上。获得这个态的概率是它们内积的平方，即

$$P_\alpha = |\langle\psi | \alpha\rangle|^2$$

其它概率下会将量子态投影到它的正交态上去，即

$$P_{\alpha\perp} = 1 - P_\alpha$$

测量之后量子态就坍缩到测量到的态上。



## 6) 相位、纯态和混合态 Phase, Pure State and Mixed State

□如果将量子态初始化到某一个未知的叠加态上面，能否通过反复的测量得到它的表达式呢？看以下这两种情况：

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$
$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

- 发现在  $|0\rangle$  ,  $|1\rangle$  的方向上测量，它们的表现都是一半概率为0，一半概率为1，根本不能区分。从这个现象可以知道无法通过概率得到态的相位信息  $\theta$  ，实际上，量子态的相位是量子相干性的体现。
- 所以，定义纯态就是“纯粹的量子态”，它不仅具有概率，还具有相位（也就是量子相干性）。混合态是纯态的概率性叠加，它往往失去了（部分或全部的）相位信息。





- 量子比特 (qubit) 不同于经典的比特 (bit) , 一个量子比特  $|\psi\rangle$  可以同时处于  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  两个状态, 可用线性代数中的线性组合 (linear combination) 来表示为

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

- 在量子力学中常称量子比特  $|\psi\rangle$  处于  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  的叠加态 (superpositions) , 其中  $\alpha$ 、 $\beta$  都是复数 (complex number) , 两维复向量空间的一组标准正交基 (orthonormal basis) 组成  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  组计算基 (computational basis) 。
- 在量子力学中测量 (measure) 会导致坍塌, 即是说测量会影响到原来的量子状态, 因此量子状态的全部信息不可能通过一次测量得到。当对量子比特  $|\psi\rangle$  进行测量时, 仅能得到该量子比特概率  $|\alpha|^2$  处在  $|0\rangle$  态, 或概率  $|\beta|^2$  处在  $|1\rangle$  态。由于所有情况的概率和为 1 , 则有  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  。



## 当对量子进行测量时，会发生什么变化呢？

假设：量子测量是由测量算子（measurement operators）的集合  $\{M_i\}$  来描述，这些算子可以作用在待测量系统的状态空间（state space）上。指标（index） $i$  表示在实验上可能发生的结果。如果测量前的量子系统处在最新状态  $|\psi\rangle$ ，那么结果  $i$  发生的概率为

$$p(i) = \langle \psi | M_i^\dagger M_i | \psi \rangle$$

并且测量后的系统状态变为

$$\frac{M_i |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_i^\dagger M_i | \psi \rangle}}$$

由于所有可能情况的概率和为 1，即

$$1 = \sum_i p(i) = \sum_i \langle \psi | M_i^\dagger M_i | \psi \rangle$$

因此，测量算子需满足

$$\sum_i M_i^\dagger M_i = I$$

该方程被称为完备性方程（completeness equation）。





## 当对量子进行测量时，会发生什么变化呢？

设系统被测量时的状态是  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ，则测量结果为 0 的概率为

$$p(0) = \langle \psi | M_0^\dagger M_0 | \psi \rangle = \langle \psi | M_0 | \psi \rangle = |\alpha|^2$$

对应测量后的状态为

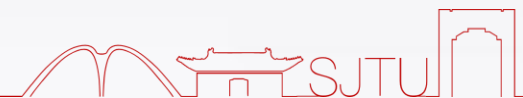
$$\frac{M_0|\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_0^\dagger M_0 | \psi \rangle}} = \frac{M_0|\psi\rangle}{|\alpha|} = \frac{\alpha}{|\alpha|} |0\rangle$$

测量结果为1的概率为

$$p(1) = \langle \psi | M_1^\dagger M_1 | \psi \rangle = \langle \psi | M_1 | \psi \rangle = |\beta|^2$$

测量后的状态为

$$\frac{M_1|\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | M_1^\dagger M_1 | \psi \rangle}} = \frac{M_1|\psi\rangle}{|\beta|} = \frac{\beta}{|\beta|} |1\rangle$$





经典计算中，最基本的单元是比特，而最基本的控制模式是逻辑门，可以通过逻辑门的组合来达到控制电路的目的。类似地，处理量子比特的方式就是量子逻辑门，使用量子逻辑门，有意识的使量子态发生演化，所以量子逻辑门是构成量子算法的基础。

## 1) 酉变换

酉变换是一种矩阵，也是一种操作，它作用在量子态上得到的是一个新的量子态。

一般酉变换在量子态上的作用是变换矩阵左乘以右矢进行计算的。例如一开始有一个量子态  $|\psi_0\rangle$ ，经过酉变换  $U$  之后得到  $|\psi\rangle = U|\psi_0\rangle$

或者也可以写为

$$\langle\psi| = \langle\psi_0|U^\dagger$$

由此可见，两个矢量的内积经过同一个酉变换之后保持不变。

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|U^\dagger U|\psi\rangle$$

类似地，也可以通过酉变换表示密度矩阵的演化；

$$\rho = U\rho_0U^\dagger$$

这样就连混合态的演化也包含在内了。



## 2) 矩阵的指数函数

一旦定义了矩阵乘法, 就可以利用函数的幂级数来定义矩阵的函数, 这其中就包含矩阵的指数函数。如果  $A$  是一个矩阵, 那么  $\exp(A) = 1 + A + A^2/2! + A^3/3! + \dots$  就为矩阵  $A$  的指数函数形式。

如果  $A$  是一个对角矩阵, 即  $A = \text{diag}(A_{11}, A_{22}, A_{33}, \dots)$ , 则由此验证

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

从而得到

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

如果  $A$  不是一个对角矩阵, 则利用酉变换可以将它对角化,  $D = UDU^\dagger$ , 从而有

$$A^n = U^\dagger D^n U$$

那么, 类似地

$$\exp(A) = U^\dagger \exp(D) U$$

必须要引起注意的是

$$\exp(A + B) \neq \exp(A) \exp(B) \neq \exp(B) \exp(A)$$



## 3) 单位矩阵

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

以单位矩阵为生成元，可以构建一种特殊的酉变换。

$$u(\theta) = \exp(-i\theta I) = \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{pmatrix} = \exp(-i\theta)I$$

它作用在态矢上面，相当于对于态矢整体（或者说每个分量同时）乘以一个系数。如果将这种态矢带入到密度矩阵的表达式中，会发现这一项系数会被消去。

这项系数称为量子态的整体相位。因为任何操作和测量都无法分辨两个相同的密度矩阵，所以量子态的整体相位一般情况下是不会对系统产生任何影响的。



## 4) 泡利矩阵

□泡利矩阵 (Pauli matrices) 有时也被称作自旋矩阵 (spin matrices)。有以下三种形式, 分别是

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

□三个泡利矩阵所表示的泡利算符代表着对量子态矢量最基本的操作。如将  $\sigma_x$  作用到  $|0\rangle$  态上, 经过矩阵运算, 得到的末态为  $|1\rangle$  态。泡利矩阵的线性组合是完备的二维酉变换生成元, 即所有满足  $UU^\dagger=I$  的  $U$  都能通过下面这种方式得到

$$U = e^{-i\theta(a\sigma_x+b\sigma_y+c\sigma_z)}$$



## 1) Hadamard (H) 门

□ Hadamard 门是一种可将基态变为叠加态的量子逻辑门，有时简称为H门。Hadamard 门作用在单比特上，它将基态  $|0\rangle$  变成  $(|0\rangle+|1\rangle)/2$ ，将基态  $|1\rangle$  变成  $(|0\rangle-|1\rangle)/2$ 。

Hadamard门矩阵形式为

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

其在线路上显示如图2.2.2所示：



图2.2.2 Hadamard 门

假设， $H$  门作用在任意量子态  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  上面，得到新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = H|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \alpha + \beta \\ \alpha - \beta \end{bmatrix} = \frac{\alpha + \beta}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{\alpha - \beta}{\sqrt{2}} |1\rangle$$







## 2) Pauli-X门

□ Pauli-X门作用在单量子比特上，它是经典计算机 NOT 门的量子等价，将量子态进行翻转，量子态变化方式为：

$$\begin{aligned} |0\rangle &\rightarrow |1\rangle \\ |1\rangle &\rightarrow |0\rangle \end{aligned}$$

Pauli-X门矩阵形式为泡利矩阵  $\sigma_x$ ，即：

$$X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

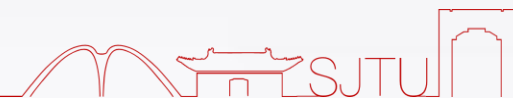
Pauli-X门矩阵又称 *NOT* 门；其在线路上显示如图2.2.3所示：



图2.2.3 Pauli-X门

假设，NOT门作用在任意量子态  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  上面，得到新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = X|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix} = \beta|0\rangle + \alpha|1\rangle$$





## 3) Pauli-Y门

□ Pauli-Y门作用在单量子比特上，作用效果为绕Bloch球 Y 轴旋转角度  $\pi$ ，Pauli-Y门的矩阵形式为泡利矩阵  $\sigma_y$ ，即：

$$Y = \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

其在线路上显示如图2.2.4所示：



图2.2.4 Pauli-Y门

假设，Pauli-Y门作用在任意量子态  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  上面，得到新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = Y|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i\beta \\ i\alpha \end{bmatrix} = -i\beta|0\rangle + i\alpha|1\rangle$$

## 4) Pauli-Z门

□ Pauli-Z 门作用在单量子比特上，作用效果是绕Bloch球 Z 轴旋转角度  $\pi$ ，Pauli-Z门矩阵形式为泡利矩阵  $\sigma_z$ ，即：

$$Z = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

其在线路上显示如图2.2.5所示：



图2.2.5 Pauli-Z 门

假设，Pauli-Z门作用在任意量子态  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  上面，得到新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = Z|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ -\beta \end{bmatrix} = \alpha|0\rangle - \beta|1\rangle$$



## 5) 旋转门 (rotation operators)

- 分别用不同的泡利矩阵作为生成元是构成  $RX$ ,  $RY$ ,  $RZ$  的方法。
- $RX(\theta)$  门由Pauli-X矩阵作为生成元生成, 其矩阵形式为

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

其在线路上显示如图2.2.6所示:



图2.2.6  $RX(\theta)$  门

假设,  $RX(\pi/2)$  门作用在任意量子态  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  上面, 得到新的量子态为:

$$|\psi'\rangle = RX(\pi/2)|\psi\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} \alpha - i\beta \\ \beta - i\alpha \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{2}(\alpha - i\beta)}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{2}(\beta - i\alpha)}{2}|1\rangle$$





## 6) 多量子比特逻辑门

- 不论是在经典计算还是量子计算中，两量子比特门无疑是建立量子比特之间联系的最重要桥梁。不同于经典计算中的与或非门及它们的组合，量子逻辑门要求所有的逻辑操作必须是酉变换，所以输入和输出的比特数量是相等的。
- 对于一个  $n$  量子比特  $|x_{n-1}\dots x_0\rangle$ ， $n$  量子比特系统的计算基就有  $2^n$  单位正交矢量组成，借助于经典比特的进位方式对量子比特进行标记，从左到右依次是二进制中的从高位到低位，也就是说  $|x_{n-1}\dots x_0\rangle$  中  $x_{n-1}$  为高位， $x_0$  为低位。

比如对于一个2量子比特的系统，其计算基分别记做

$$\begin{aligned} |00\rangle &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, & |01\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \\ |10\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, & |11\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

在基态  $|01\rangle$  中，左侧的0对应的位为高位，1对应的位为低位。

在介绍2比特量子逻辑门时，会使用如图2.2.9的图标：

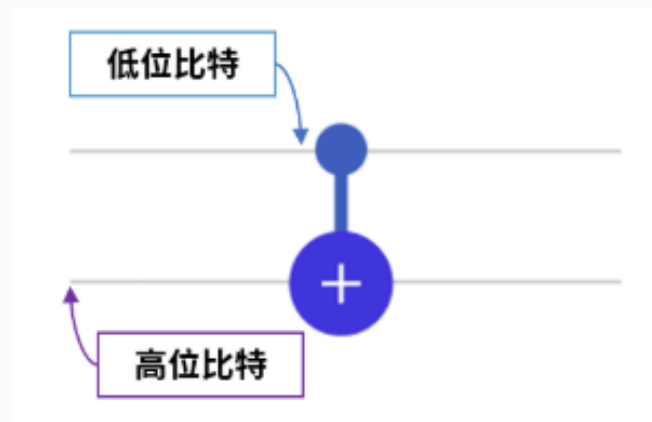


图2.2.9 2比特量子逻辑门

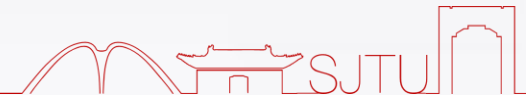
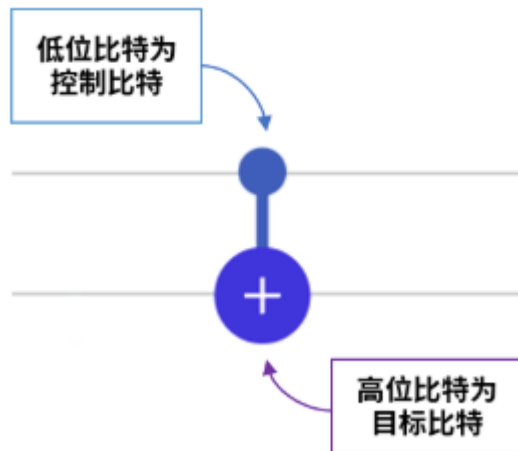


## 6) 多量子比特逻辑门--CNOT 门

- 控制非门(Control-NOT), 通常用 CNOT 进行表示, 是一种普遍使用的两量子比特门。
- 若低位为控制比特, 那么它具有如下的矩阵形式:

$$CNOT = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- 对应的 CNOT 门在线路中显示如图, 含实点的路线对应的量子比特称为控制比特 (control qubit), 含+号的路线对应的量子比特为目标比特 (target qubit)。





## 6) 多量子比特逻辑门--CNOT 门

□假设， CNOT 门作用分别作用在基态  $|\psi\rangle=|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$  上面, 得到新的量子态为:

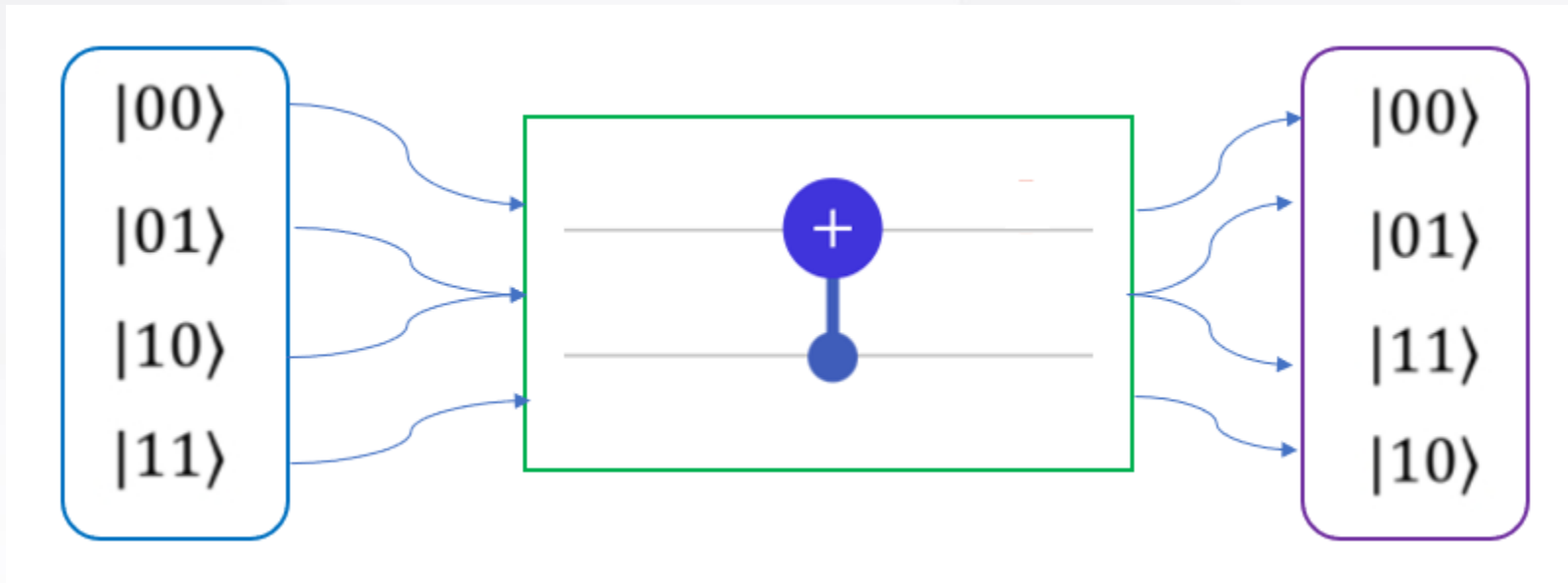
$$\begin{aligned} |\psi'\rangle = \text{CNOT}|00\rangle &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |00\rangle \\ |\psi'\rangle = \text{CNOT}|01\rangle &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |11\rangle \\ |\psi'\rangle = \text{CNOT}|10\rangle &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |10\rangle \\ |\psi'\rangle = \text{CNOT}|11\rangle &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |01\rangle \end{aligned}$$

□由于低位比特为控制比特，高位比特为目标比特，所以当低位比特位置对应为1时，高位比特就会被取反；当低位比特位置为0时，不对高位比特做任何操作。



## 6) 多量子比特逻辑门--CNOT 门

□假设，高位为控制比特，CNOT 门分别作用在基态  $|\psi\rangle=|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$  上，那么，可以计算四个两量子比特的计算基经 CNOT 门的演化结果如图所示：



□从上例可以看出 CNOT 门的含义是当控制比特为  $|0\rangle$  态时，目标比特不发生改变；当控制比特为  $|1\rangle$  态时，对目标比特执行 X 门(量子非门)操作。要注意的是控制比特和目标比特的地位是不能交换的。



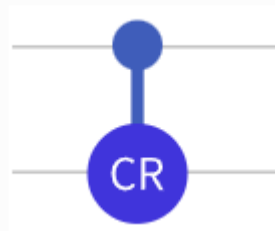


## 6) 多量子比特逻辑门--CR 门

□控制相位门（Controlled phase gate）和控制非门类似，通常记为 CR (CPhase)，其矩阵形式如下：

$$CR(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix}$$

□CR 门在线路中显示如图



□在 CR 门的图标中，含实点的路线对应的量子比特称为控制比特（control qubit），含CR字母的路线对应量子比特为目标比特（target qubit）。

□当控制比特为  $|0\rangle$  态时，目标比特不发生改变；当控制比特为  $|1\rangle$  态时，对目标比特执行相转变门（phase-shift gate），其特殊的是，控制相位门里交换控制比特和目标比特的角色，矩阵形式不会发生任何改变。



## 6) 多量子比特逻辑门--iSWAP 门

□ iSWAP 门的主要作用是交换两个比特的状态，并且赋予其  $\pi/2$  相位；经典电路中也有 SWAP 门，但是 iSWAP 是量子计算中特有的。iSWAP 门在某些体系中是较容易实现的两比特逻辑门，它是由  $\sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_y \otimes \sigma_y$  作为生成元生成，需要将矩阵  $\sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_y \otimes \sigma_y$  对角化，iSWAP 门的矩阵表示如下：

$$i\text{SWAP}(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) & -i \sin(\theta) & 0 \\ 0 & -i \sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

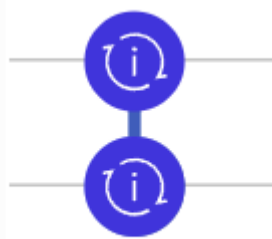


图2.2.14 iSWAP门

□ 通常会用一个完整的翻转，即  $\theta = \pi/2$  的情况来指代 iSWAP。当角度为 iSWAP 的一半时，即  $\theta = \pi/4$ ，称之为 iSWAP。对于 iSWAP 门而言，两个比特之间地位是对等的，不存在控制和受控的关系。



## 7) 量子线路与测量操作

□量子线路是由代表量子比特演化的路线和作用在量子比特上的量子逻辑门组成的。量子线路产生的效果，等同于每一个量子逻辑门依次作用在量子比特上。在真实的量子计算机上，最后要对量子系统末态进行测量操作，才能得到末态的信息，因此也把测量操作作为量子线路的一部分，测量操作有时也称为测量门。测量背后的原理就是之前讲到的投影测量。



图2.2.15 测量操作



## 示例 (1)



初始态为  $|0\rangle$ , 首先经过一个 H 门, 演化得到末态

$$|\psi'\rangle = H|0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} |0\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} |1\rangle$$



## 示例 (1)

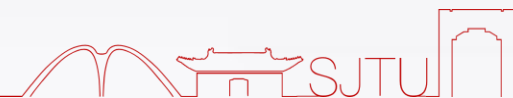


接着就对其进行测量操作，得到投影到计算基  $|0\rangle$  下的概率为

$$\begin{aligned}
 P(0) &= \langle \psi' | M_0^\dagger M_0 | \psi' \rangle \\
 &= \langle \psi' | M_0 | \psi' \rangle \\
 &= [\sqrt{2}/2 \quad \sqrt{2}/2] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \\
 &= \frac{1}{2}
 \end{aligned}$$

根据测量假设，测量过后末态  $|\psi'\rangle$  变为新的量子态

$$|\psi''\rangle = \frac{M_0 |\psi'\rangle}{\sqrt{P(0)}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |0\rangle$$





## 示例 (1)

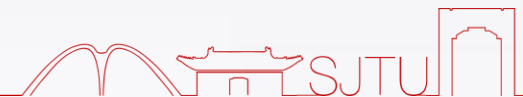


投影到计算基  $|1\rangle$  下的概率为

$$\begin{aligned}
 P(1) &= \langle \psi' | M_1^\dagger M_1 | \psi' \rangle. \\
 &= \langle \psi' | M_1 | \psi' \rangle \\
 &= [\sqrt{2}/2 \quad \sqrt{2}/2] \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \\
 &= \frac{1}{2}.
 \end{aligned}$$

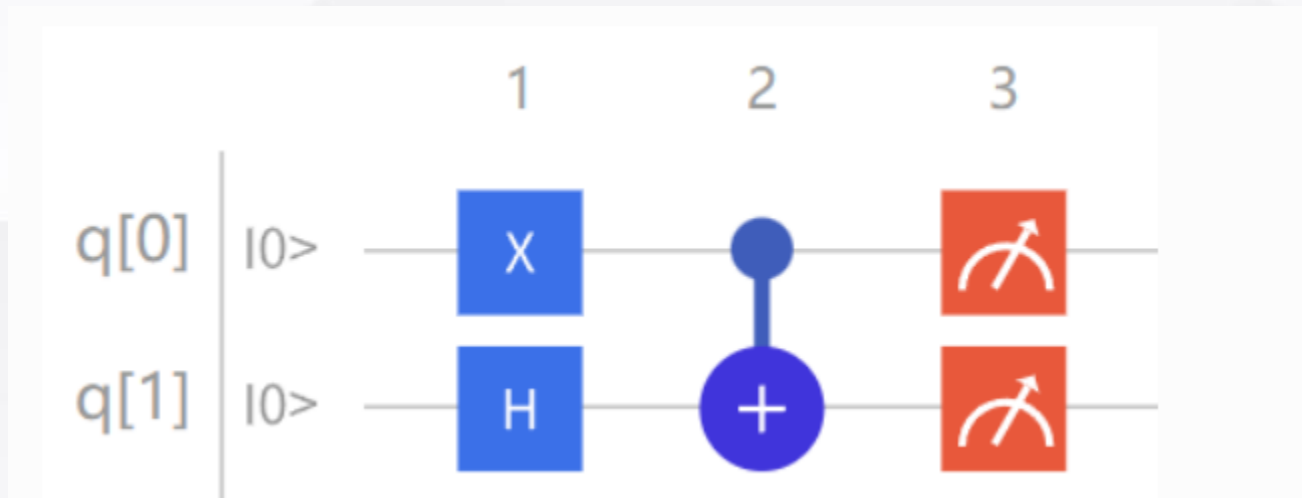
测量过后末态  $|\psi'\rangle$  变为新的量子态

$$|\psi''\rangle = \frac{M_1 |\psi'\rangle}{\sqrt{P(1)}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |1\rangle$$





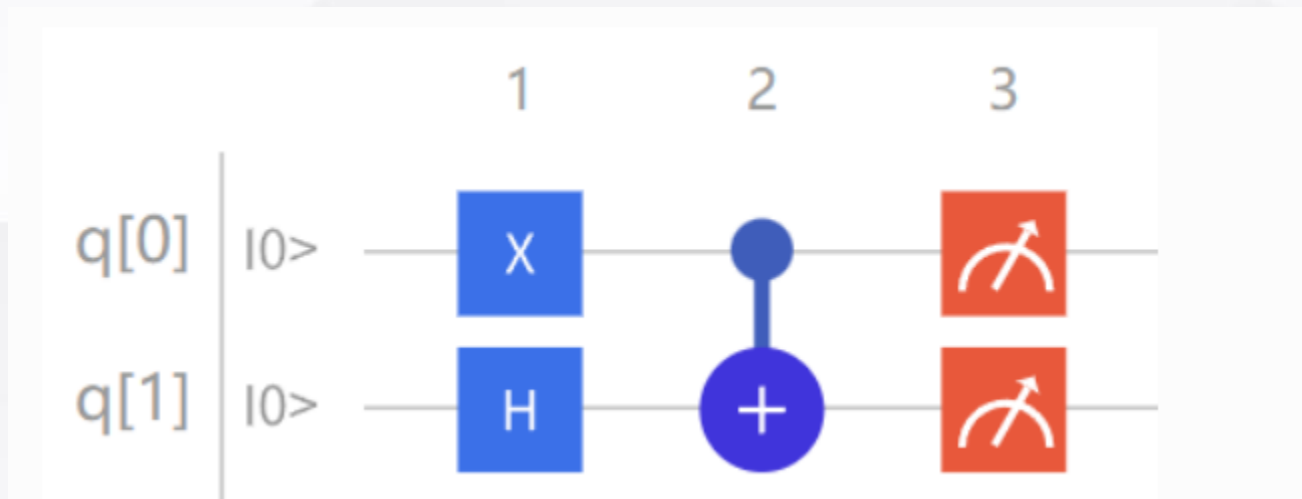
## 示例 (2)



在该量子线路中，初始态 $q[1]$ 、 $q[0]$ 代表量子比特的初始态均为  $|0\rangle$ ，因此该系统的复合量子态为  $|00\rangle$ ，这里复合量子态  $|00\rangle$  的从左到右依次对应高位比特到低位比特。首先该复合的量子比特在时刻 1 同时经过 H 门和 X 门，接着在时刻 2 经过 CNOT 门，最后在时刻 3 进行整体测量操作。



## 示例 (2)



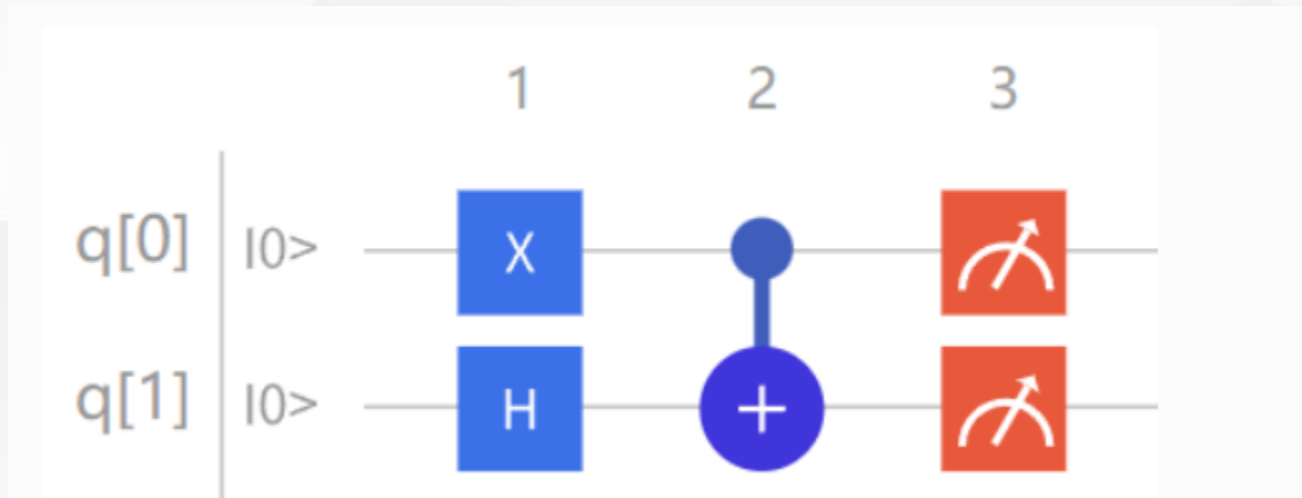
在初始时刻系统处在初始态  $|\psi_0\rangle = |00\rangle$ ，其中左边的 0 为高位 q[1]，右边的 0 为低位 q[0]，经过时刻 1 的门以后量子态变为

$$|\psi_1\rangle = [H \otimes X]|00\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} X & X \\ X & -X \end{bmatrix} |00\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$





## 示例 (2)

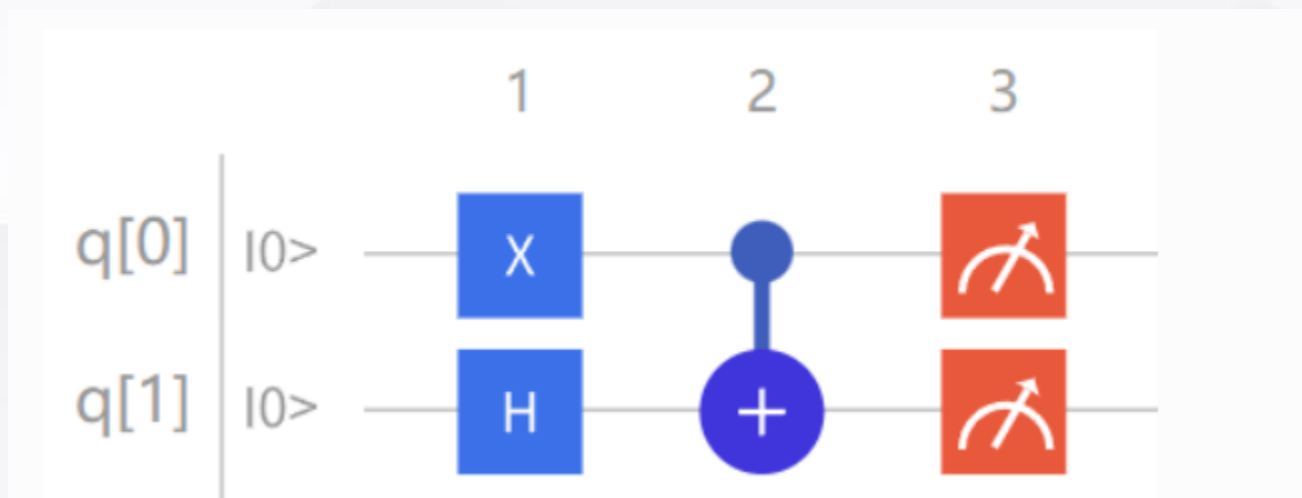


接着在时刻 2 经历 CNOT 门后, 演化为

$$|\psi_2\rangle = \text{CNOT} |\psi_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \sqrt{2}/2 \\ 0 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \sqrt{2}/2 \\ 0 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2} |01\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} |11\rangle$$



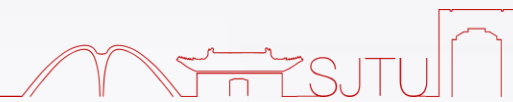
## 示例 (2)



最后，到时刻 3 进行测量操作，若用测量操作  $M_{00} \equiv |00\rangle\langle 00|$ ，则得到投影到计算基  $|00\rangle$  下的概率为

$$\begin{aligned}
 P(00) &= \langle \psi_2 | M_{00}^\dagger M_{00} | \psi_2 \rangle \\
 &= \langle \psi_2 | M_{00} | \psi_2 \rangle \\
 &= \langle \psi_2 | [|00\rangle\langle 00|] | \psi_2 \rangle \\
 &= \begin{bmatrix} 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \sqrt{2}/2 \\ 0 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix} \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

根据测量假设，由于  $P(00)=0$ ，因此测量过后，量子态  $|\psi_2\rangle$  不可能坍缩在基态  $|00\rangle$  上面。





## 示例 (2)

若用测量操作  $M_{10} \equiv |10\rangle\langle 10|$ ，则得到投影到计算基  $|10\rangle$  下的概率为

$$P(10) = \langle \psi_2 | M_{10}^\dagger M_{10} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | M_{10} | \psi_2 \rangle = 0$$

所以测量过后, 量子态  $|\psi_2\rangle$  不可能坍缩在基态  $|10\rangle$  上面。

若用测量操作  $M_{11} \equiv |11\rangle\langle 11|$ ，则得到投影到计算基  $|11\rangle$  下的概率为

$$P(11) = \langle \psi_2 | M_{11}^\dagger M_{11} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | M_{11} | \psi_2 \rangle = \frac{1}{2}$$

对量子态  $|\psi_2\rangle$  测量后, 得到新的量子态为

$$|\psi_3\rangle = \frac{M_{11} |\psi_2\rangle}{\sqrt{P(11)}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |11\rangle$$

03

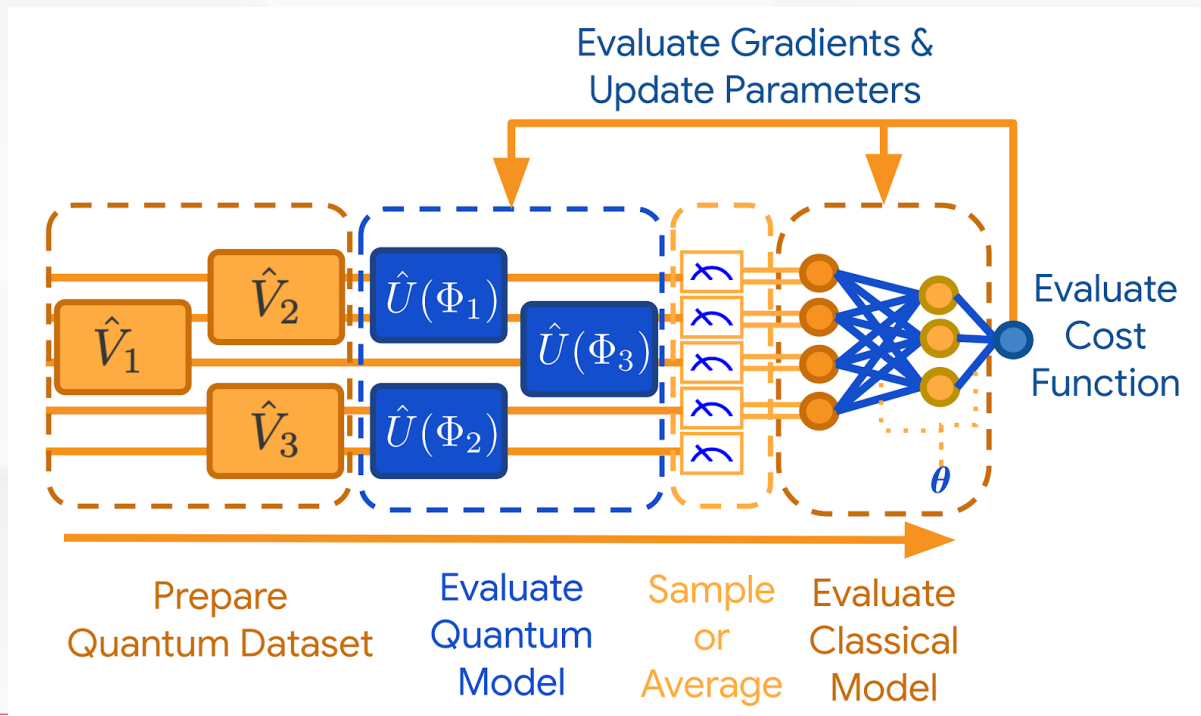
案例分析：量子机器学习



# TensorFlow Quantum



- TensorFlow Quantum (TFQ) 是一个量子机器学习库，可用于快速设计量子-经典机器学习混合模型的原型。在研究量子算法和应用时，可以利用 Google 的量子计算框架，所有这些框架都可以在 TensorFlow 中找到。
- TensorFlow Quantum 侧重于量子数据和构建量子-经典混合模型。它集成了在 Cirq 中设计的量子计算算法和逻辑，并提供与现有 TensorFlow API 兼容的量子计算基元，还提供高性能量子电路模拟器。





TensorFlow Quantum 实现了将 TensorFlow 与量子计算硬件集成所需的组件。为此，TensorFlow Quantum 引入了两个数据类型基元：

- 量子电路：表示 TensorFlow 中 Cirq 定义的量子电路。创建大小不同的电路批次，类似于不同的实值数据点的批次。
- Pauli 和：表示 Cirq 中定义的 Pauli 算子张量积的线性组合。像电路一样，创建大小不同的算子批次。

利用这些基元来表示量子电路，TensorFlow Quantum 提供以下运算：

- 从电路批次的输出分布中采样。
- 基于电路批次计算 Pauli 和批次的期望值。TFQ 实现了与反向传播兼容的梯度计算。
- 模拟电路和状态批次。虽然在现实世界中直接检查整个量子电路的所有量子态振幅的效率极低，但状态模拟可以帮助研究员了解量子电路如何将状态映射到接近精确的精度水平。



## 使用TFQ进行MNIST数据集分类

□ <https://www.tensorflow.org/quantum/tutorials/mnist>

## 量子卷积神经网络

□ <https://www.tensorflow.org/quantum/tutorials/qcnn>

## 量子强化学习

□ [https://www.tensorflow.org/quantum/tutorials/quantum\\_reinforcement\\_learning](https://www.tensorflow.org/quantum/tutorials/quantum_reinforcement_learning)



谢谢!

饮水思源 爱国荣校