Κβαντικοί Υπολογιστές και Αλγόριθμοι

Διάλεξη 3η

Θωμάς Καμαλάκης

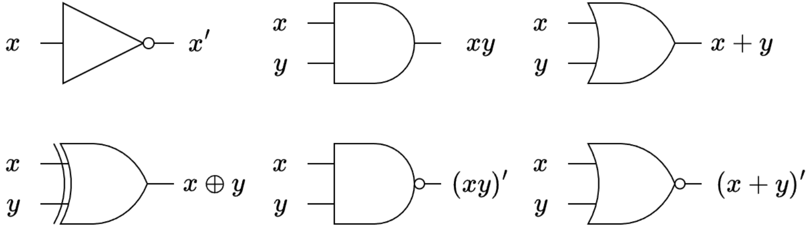
Χαροκόπειο Πανεπιστήμιο Αθηνών

2025

Περιεχόμενα

Κλασικές Πύλες

- Στα κλασικά ψηφιακά κυκλώματα οι πύλες περιγράφουν στοιχειώδεις επεξεργασίες που μπορούμε να κάνουμε στα bit.
- Παραδείγματα αποτελούν οι πύλες NOT, AND και OR.



Κβαντικές πύλες ενός qubit

- Οι πιθανές κλασικές πύλες ενός bit είναι δύο:
- Η πύλη NOT που αντιστρέφει το bit, $0 \to 1$ και $1 \to 0$.
- Η ταυτοτική, η οποία απλά το διατηρεί, $0 \to 0$ και $1 \to 1$.
- Οι κβαντικές πύλες ενός qubit περιγράφονται από όλους τους πιθανούς μοναδιαίους πίνακες U που έχουν 2×2 διαστάση.
- Παράδειγμα είναι η κβαντική πύλη NOT που περιγράφεται από τον πίνακα:

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

- Υπάρχουν άπειροι τέτοιοι πίνακες και επομένως άπειρες κβαντικές πύλες ενός qubit!

Παραδείγματα κβαντικών πυλών ενός qubit

- Η πύλη X (NOT):

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

- Η πύλη Y, $a_0 \left|0\right\rangle + a_1 \left|1\right\rangle \xrightarrow{Y} -ja_1 \left|0\right\rangle + ja_0 \left|1\right\rangle$ με πίνακα:

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

- Η πύλη Z, $a_0 \left|0\right\rangle + a_1 \left|1\right\rangle \xrightarrow{Z} a_0 \left|0\right\rangle - a_1 \left|1\right\rangle$ με πίνακα:

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

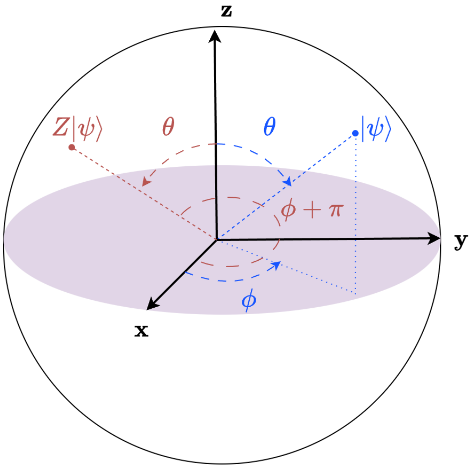
Οι πύλες X, Y, Z και η σφαίρα του Bloch

- Έχει ένα ενδιαφέρον να δούμε πως μεταφράζεται η δράση των διαφόρων πυλών στην σφαίρα του Bloch.
- Ας ξεκινήσουμε από την πύλη Z.

$$\begin{aligned}\cos\left(\tfrac{\theta}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\tfrac{\theta}{2}\right)e^{j\phi}|1\rangle &\xrightarrow{Z} \cos\left(\tfrac{\theta}{2}\right)|0\rangle - \sin\left(\tfrac{\theta}{2}\right)e^{j\phi}|1\rangle \\ &= \cos\left(\tfrac{\theta}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\tfrac{\theta}{2}\right)e^{j\phi+j\pi}|1\rangle\end{aligned}$$

- Άρα η πύλη Z αντιστοιχεί στο να κάνουμε τον μετασχηματισμό $(\theta,\phi)\rightarrow(\theta,\phi+\pi)$
- Στην ουσία πρόκειται για μία περιστροφή γύρω από τον άξονα των z δεξιόστροφα κατά π (επόμενη διαφάνεια).

Οι πύλες X, Y, Z και η σφαίρα του Bloch



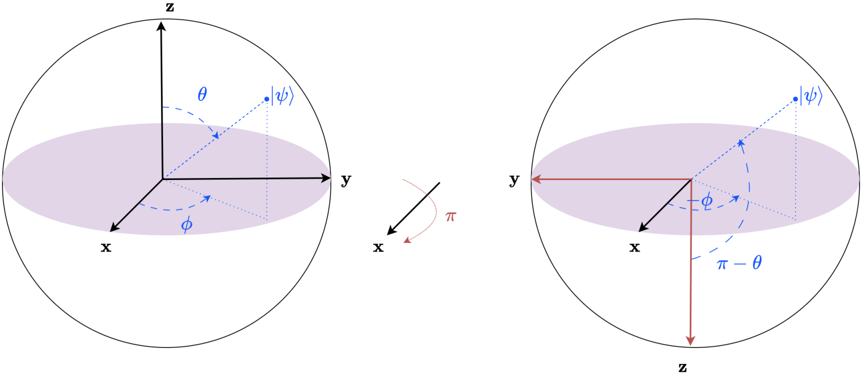
Η πύλη X και η σφαίρα του Bloch

- Ας δούμε τώρα την πύλη X.

$$\begin{aligned}\cos\left(\tfrac{\theta}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\tfrac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{j\phi}|1\rangle &\xrightarrow{X} \sin\left(\tfrac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{j\phi}|0\rangle + \cos\left(\tfrac{\theta}{2}\right)|1\rangle \\ &= \mathrm{e}^{j\phi}\left(\sin\left(\tfrac{\theta}{2}\right)|0\rangle + \cos\left(\tfrac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-j\phi}|1\rangle\right)\end{aligned}$$

- Η αρχική φάση $\mathrm{e}^{j\phi}$ είδαμε ότι δεν παίζει κάποιο ρόλο στην αναπαράσταση στην σφαίρα Bloch.
- Άρα η πύλη X αντιστοιχεί στο να κάνουμε τον μετασχηματισμό $(\theta, \phi) \to (\pi - \theta, -\phi)$.
- Όπως φαίνεται στην επόμενη διαφάνεια αυτό αντιστοιχεί σε μία στροφή του άξονα x δεξιόστροφα κατα π.

Η πύλη X και η σφαίρα του Bloch



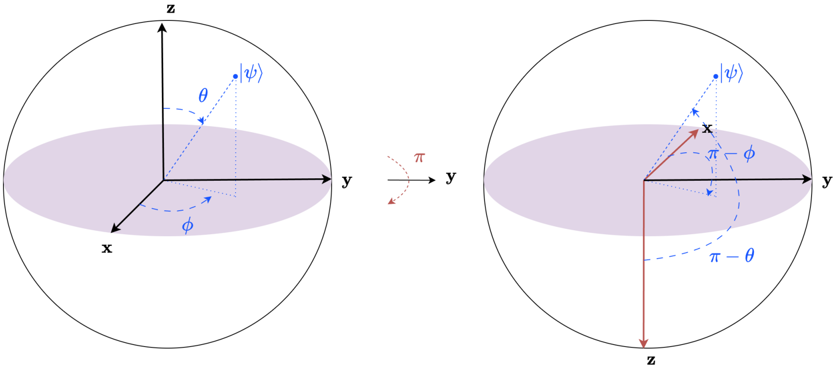
Η πύλη Y και η σφαίρα του Bloch

- Ας δούμε τώρα την πύλη Y.

$$\begin{aligned}
\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{j\phi}|1\rangle \xrightarrow{Y} -j\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{j\phi}|0\rangle + j\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle \\
= -je^{j\phi}\left(\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle - e^{-j\phi}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle\right) \\
= -je^{j\phi}\left(\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{j(\pi-\phi)}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle\right)
\end{aligned}$$

- Άρα η πύλη Y αντιστοιχεί στο να κάνουμε τον μετασχηματισμό $(\theta, \phi) \rightarrow (\pi - \theta, \pi - \phi)$.
- Όπως φαίνεται στην επόμενη διαφάνεια αυτό αντιστοιχεί σε μία στροφή του άξονα ys δεξιόστροφα κατα π.

Η πύλη Y και η σφαίρα του Bloch



θ

Ιδιότητες των X, Y, Z

- Οι πίνακες που αντιστοιχούν στα X, Y και Z ονομάζονται πίνακες Pauli.
- Οι πίνακες αυτοί είδαμε ότι περιγράφουν περιστροφές γύρω από τους αντίστοιχους άξονες με γωνία π.
- Οι πίνακες Pauli αντιστρέφονται από τον εαυτό τους:

$$X^2 = XX = I_2\,, Y^2 = YY = I_2\,, Z^2 = ZZ = I_2$$

- Για δύο πίνακες A και B ορίζουμε τον μεταθέτη πίνακα τους $[A, B] = AB - BA$.
- Μπορούμε εύκολα να δείξουμε ότι:

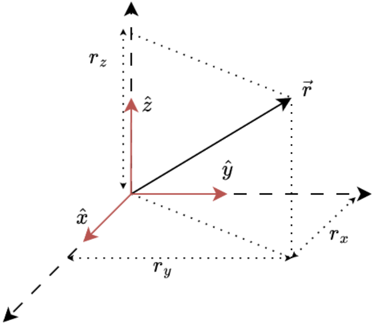
$$[X, Y] = 2jZ\,, [Y, Z] = 2jX\,, [Z, X] = 2jY$$

Γενικότερες στροφές

- Δεν χρειάζεται να περιοριζόμαστε μόνο σε συγκεκριμένες γωνίες στροφής γύρω από τους άξονες.
- Για να καταλάβουμε λίγο καλύτερα τι συμβαίνει οταν περιστρέφουμε έναν άξονα με αυθαίρετη γωνία ας θυμηθούμε πως γράφουμε τα διανύσματα στον τρισδιάστατο χώρο.
- Ένα διάνυσμα $\vec{r}$ έχει τρεις συντεταγμένες τις r_x, r_y και r_z.
- Συχνά γράφουμε:

$$\vec{r} = \begin{bmatrix} r_x \\ r_y \\ r_z \end{bmatrix}$$

Διανύσματα στις τρεις διαστάσεις



- Ορίζουμε τα τρία μοναδιαία διανύσματα:

$$\hat{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \hat{y} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \hat{z} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- Θα έχουμε:

$$\vec{r} = \begin{bmatrix} r_x \\ r_y \\ r_z \end{bmatrix} = r_x\hat{x} + r_y\hat{y} + r_z\hat{z}$$

Συντεταγμένες και εσωτερικό γινόμενο

- Πολλές φορές για να γλιτώνουμε χώρο, γράφουμε τα διανύσματα με παρενθέσεις σε μία γραμμή.
- Για παράδειγμα $\vec{r} = (r_x, r_y, r_z)$.
- Επίσης πάλι χρησιμοποιούμε το εσωτερικό γινόμενο.
- Για δύο διανύσματα $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$ και $\vec{b} = (b_x, b_y, b_z)$ το εσωτερικό γινόμενο $\vec{a} \cdot \vec{b}$ είναι απλά:

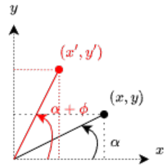
$$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z$$

- Μπορούμε εύκολα να δείξουμε ότι οι συντεταγμένες του $\vec{r}$ υπολογίζονται μέσω των εσωτερικών γινομένων:

$$r_x = \vec{r} \cdot \hat{x}\,, r_y = \vec{r} \cdot \hat{y}\,, r_z = \vec{r} \cdot \hat{z}$$

Στροφή στο επίπεδο

- Ίσως η πιο απλή περίπτωση για να καταλάβουμε τις περιστροφές είναι οι δύο διαστάσεις όπως αυτή που φαίνεται παρακάτω.
- Πρόκειται για μία περιστροφή του επιπέδου xy δεξιόστροφα (δηλαδή ανάποδα από τους δείκτες του ωρολογιού) κατά γωνία ϕ.



- Εύκολα βλέπουμε ότι εάν $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ τότε:

$$x = r\cos\alpha$$

$$y = r\sin\alpha$$

$$x' = r\cos(\alpha + \phi)$$

$$y' = r\sin(\alpha + \phi)$$

Στροφή στο επίπεδο

- Αν παίξουμε λίγο με τις τριγωνομετρικές ταυτότητες:

$$x' = \rho\cos(a+\phi) = \rho\cos a\cos\phi - \rho\sin a\sin\phi = x\cos\phi - y\sin\phi$$

$$y' = \rho\sin(a+\phi) = \rho\cos a\sin\phi + \rho\sin a\cos\phi = x\sin\phi + y\cos\phi$$

- Επομένως σε μορφή πίνακα:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

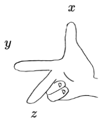
- Ο πίνακας $R_{2\mathrm{D}}$ ο οποίος ορίζεται από την:

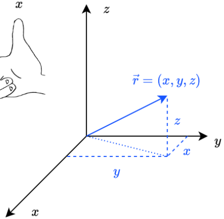
$$R_{2\mathrm{D}}(\phi) = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}$$

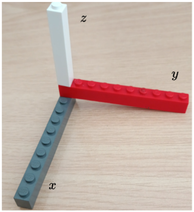
- περιγράφει την στροφή του επιπέδου xy δεξιόστροφα κατά ϕ.

Στροφές στις 3 διαστάσεις

- Στις τρεις διαστάσεις τα πράγματα είναι λίγο πιο πολύπλοκα.
- Για αυτό το λόγο έχω φτιάξει ένα lego που με βοηθάει για τους 3 άξονες.

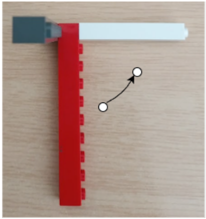


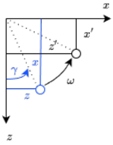




Στροφή γύρω από τον άξονα z

- Η πρώτη περίπτωση είναι να κάνουμε στροφή του επιπέδου xy γύρω από τον άξονα z δεξιόστροφα κατά μία γωνία ω.





- Στην περίπτωση αυτή η συνιστώσα z δεν αλλάζει ενώ αλλάζουν οι συντεταγμένες x, y όπως δείχνουμε παραπάνω.
- Εφόσον $x' = R\cos(a + \omega)$ και $y' = R\sin(a + \omega)$ είναι εύκολο να δείξουμε ότι ισχύει πάλι ο ίδιος τύπος για τις συντεταγμένες x και y:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\omega & -\sin\omega \\ \sin\omega & \cos\omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

Στροφή γύρω από τον άξονα z

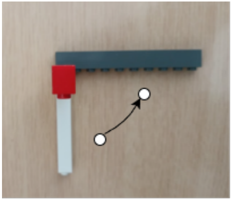
- Μποορούμε να συμπεριλάβουμε και τις τρεις διαστάσεις γράφοντας την εξίσωση:

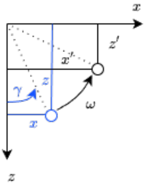
$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\omega & -\sin\omega & 0 \\ \sin\omega & \cos\omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

- Επομένως ο πίνακας $R_z(\omega)$ περιγράφει την περιστροφή του επιπέδου xy γύρω από τον άξονα z δεξιόστροφα κατά γωνία ω:

$$R_z(\omega) = \begin{bmatrix} \cos\omega & -\sin\omega & 0 \\ \sin\omega & \cos\omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Στροφή γύρω από τον άξονα y





- Στην περίπτωση όπου κάνουμε στροφή του επιπέδου xz ως προς τον άξονα y δεξιόστροφα κατά γωνία ω προκύπτει ότι $z = R\cos\gamma$, $x = R\sin\gamma$, $z' = R\cos(\gamma+\omega)$, $x' = R\sin(\gamma+\omega)$.
- Οπότε τώρα θα έχουμε:

$$\begin{bmatrix} z' \\ x' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\omega & -\sin\omega \\ \sin\omega & \cos\omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z \\ x \end{bmatrix}$$

Στροφή γύρω από τον άξονα y

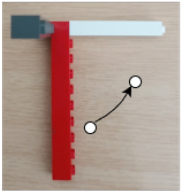
- Συμπεριλαμβάνοντας το ότι $y = y'$ θα έχουμε:

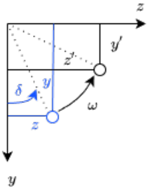
$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\omega & 0 & \sin\omega \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\omega & 0 & \cos\omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

- Επομένως ο πίνακας $R_y(\omega)$ περιγράφει την περιστροφή του επιπέδου xz γύρω από τον άξονα y δεξιόστροφα κατά γωνία ω:

$$R_y(\omega) = \begin{bmatrix} \cos\omega & 0 & \sin\omega \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\omega & 0 & \cos\omega \end{bmatrix}$$

Στροφή γύρω από τον άξονα x





- Στην περίπτωση όπου κάνουμε στροφή του επιπέδου yz ως προς τον άξονα x δεξιόστροφα κατά γωνία ω προκύπτει ότι $y = R\cos\delta$, $z = R\sin\delta$, $x' = R\cos(\delta+\omega)$, $z' = R\sin(\gamma+\omega)$.
- Με τον ίδιο τρόπο προκύπτει ότι ο πίνακας περιστορφής είναι τώρα:

$$R_x(\omega) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\omega & -\sin\omega \\ 0 & \sin\omega & \cos\omega \end{bmatrix}$$

Περιστροφές και qubit

- Έχει ένα ενδιαφέρον να δούμε πως μεταφράζονται οι περιστροφές στη σφαίρα Bloch στα πλάτη των qubit.
- Ας πάρουμε για παράδειγμα την περιστροφή γύρω από τον άξονα των y που περιγράφεται από τον πίνακα $R_y(\omega)$.
- Ένα qubit με συντελεστές $|\psi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle$ αναπαρίσταται στην σφαίρα Bloch ως εξής:

$$r = \begin{bmatrix} r_x \\ r_y \\ r_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2a\Re b \\ 2a\Im b \\ a^2 - |b|^2 \end{bmatrix}$$

Περιστροφές και qubit

- Όπως δείχνουμε στο συνοδευτικό υλικό, ο τελεστής που δρα πάνω σε ένα qubit και περιγράφεται από τον πίνακα:

$$\mathcal{R}_y(\omega) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\omega}{2} & \sin\frac{\omega}{2} \\ -\sin\frac{\omega}{2} & \cos\frac{\omega}{2} \end{bmatrix} = I_2 \cos\frac{\omega}{2} - jY \sin\frac{\omega}{2}$$

- αντιστοιχεί σε μία στροφή γύρω από τον άξονα των y που περιγράφεται στο σύστημα συντεταγμένων της σφαίρας Bloch από τον πίνακα:

$$R_y(\omega) = \begin{bmatrix} \cos\omega & 0 & -\sin\omega \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\omega & 0 & \cos\omega \end{bmatrix}$$

Περιστροφές και qubit

- Με τον ίδιο τρόπο οι πίνακες $\mathcal{R}_x(\omega)$ και $\mathcal{R}_z(\omega)$ που ορίζονται:

$$\mathcal{R}_x(\omega) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\omega}{2} & -j\sin\frac{\omega}{2} \\ -j\sin\frac{\omega}{2} & \cos\frac{\omega}{2} \end{bmatrix} = I_2\cos\frac{\omega}{2} - jX\sin\frac{\omega}{2}$$

$$\mathcal{R}_z(\omega) = \begin{bmatrix} e^{-j\omega/2} & 0 \\ 0 & e^{j\omega/2} \end{bmatrix} = I_2\cos\frac{\omega}{2} - jZ\sin\frac{\omega}{2}$$

- αντιστοιχεί σε στροφή γύρω από τον άξονα των x και z αντίστοιχα στο σύστημα συντεταγμένων της σφαίρας Bloch.

Ιδιοδιανύσματα και ιδιοτιμές

- Στην κβαντική υπολογιστική παίζουν ιδιαίτερα σημαντικό ρόλο τα ιδιοδιανύσματα και οι ιδιοτιμές των πινάκων.
- Έστω A ένας τετραγωνικός πίνακας $N \times N$.
- Το *ιδιοδιάνυσμα* $|\psi\rangle$ που αντιστοιχεί στην *ιδιοτιμή* λ του πίνακα A, πληρούν την σχέση:

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

- Συχνά μας ενδιαφέρει να βρούμε όλες τις ιδιοτιμές και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα ενός τελεστή ή του αντίστοιχου πίνακα του A.
- Οι ιδιοτιμές βρίσκονται λύνοντας την παρακάτω εξίσωση

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

- Όπου με det συμβολίζουμε την ορίζουσα και με I τον ταυτοτικό πίνακα $N \times N$, δηλαδή τον διαγώνιο πίνακα που έχει όλα τα στοιχεία της διαγωνίου του ίσα με 1.

Παράδειγμα: ο τελεστής NOT

- Όπως είδαμε ο τελεστής NOT περιγράφεται από τον πίνακα X

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

- Για να υπολογίσουμε τις ιδιοτιμές βλέπουμε ότι

$$\det(X - \lambda I) = \begin{vmatrix} \lambda & 1 \\ 1 & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1$$

- Οπότε οι ιδιοτιμές του X προκύπτουν από την εξίσωση $\lambda^2 - 1 = 0$ οπότε θα έχουμε $\lambda = \pm 1$.

Παράδειγμα: ο τελεστής NOT

- Για να βρούμε τα ιδιοδιανύσματα θα πρέπει να λύσουμε την εξίσωση:

$$X|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

- Αν θεωρήσουμε ότι $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ τότε για $\lambda = 1$ θα έχουμε:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

- Το παραπάνω σύστημα είναι ισοδύναμο με την εξίσωση $a = b$. Οπότε για παράδειγμα η λύση $a = b = 1$ είναι ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $\lambda = 1$.
- Συνήθως θέλουμε να κανονικοποιήσουμε το ιδιοδιάνυσμα έτσι ώστε $|a|^2 + |b|^2 = 1$ οπότε επιλέγουμε $a = b = \frac{1}{\sqrt{2}}$:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$$

Παράδειγμα: ο τελεστής NOT

- Για $\lambda = -1$ θα έχουμε:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

- Το παραπάνω σύστημα είναι ισοδύναμο με την εξίσωση $a = -b$.
- Εφόσον θέλουμε $|a|^2 + |b|^2 = 1$, επιλέγουμε $a = -b = \frac{1}{\sqrt{2}}$:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle - |1\rangle\right)$$

Ιδιότητες των ιδιοδιανυσμάτων της NOT

- Έστω $|\psi_{-1}\rangle$ και $|\psi_1\rangle$ τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $\lambda = -1$ και $\lambda = 1$.

$$|\psi_{-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

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

- Παρατηρούμε ότι:

$$\langle\psi_{-1}|\psi_{-1}\rangle = \langle\psi_1|\psi_1\rangle = 1$$

$$\langle\psi_1|\psi_{-1}\rangle = \langle\psi_{-1}|\psi_1\rangle = 0$$

- Είχαμε πει ότι η ποσότητα $\langle\psi|\psi\rangle$ είναι το τετράγωνο του μέτρου του $|\psi\rangle$, $\|\psi\|^2$.
- Επομένως οι $|\psi_{-1}\rangle$ και $|\psi_1\rangle$ έχουν μέτρο 1 και μεταξύ τους είναι "κάθετες", δηλαδή έχουν εσωτερικό γινόμενο μηδέν.
- Δύο ή περισσότερες καταστάσεις που έχουν αυτή την ιδιότητα ονομάζονται *ορθοκανονικές*.

Ιδιότητες των ιδιοδιανυσμάτων της NOT

- Μπορούμε να δείξουμε ότι τα $|\psi_{-1}\rangle$ και $|\psi_1\rangle$ είναι *γραμμικά ανεξάρτητα*.
- Η γραμμική ανεξαρτησία είναι μία σημαντική ιδιότητα και έχει να κάνει με το πόσο ένα διάνυσμα ή κατάσταση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να αναπαραστήσει ένα άλλο.
- Στην περίπτωση δύο καταστάσεων, π.χ. των $|\phi\rangle$ και $|\psi\rangle$, αυτές θα είναι γραμμικά ανεξάρτητες εάν ο μόνος τρόπος για να έχουμε $p\,|\psi\rangle + q\,|\phi\rangle = 0$ είναι να ισχύει $p = q = 0$.
- Στο παράδειγμα μας, εάν $p\,|\psi_1\rangle + q\,|\psi_{-1}\rangle = 0$ και πάρουμε το εσωτερικό γινόμενο με το $|\psi_1\rangle$ θα έχουμε:

$$0 = \langle\psi_1|\,(p\,|\psi_1\rangle + q\,|\psi_{-1}\rangle) = p\,\langle\psi_1|\psi_1\rangle + q\,\langle\psi_1|\psi_{-1}\rangle = p$$

- Με παρόμοιο τρόπο μπορούμε να βρούμε και $q = 0$. Άρα εφόσον $p = q = 0$ θα έχουμε ότι τα $|\psi_{-1}\rangle$ και $|\psi_1\rangle$ θα είναι γραμμικά ανεξάρτητα.

Αλλαγή βάσης

- Τα $|\psi_{-1}\rangle$ και $|\psi_1\rangle$ έχουν μία ακόμα χρήσιμη ιδιότητα.
- Μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να έχουμε μία εναλλακτική έκφραση για οποιοδήποτε qubit $|\psi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle$.
- Από τις σχέσεις:

$$|\psi_{-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - |1\rangle\right)$$

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

- προκύπτει ότι:

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

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle - |\psi_{-1}\rangle\right)$$

- Επομένως:

$$|\psi\rangle = \frac{a+b}{\sqrt{2}}\,|\psi_1\rangle + \frac{a-b}{\sqrt{2}}\,|\psi_{-1}\rangle$$

Αλλαγή βάσης

- Από τα προηγούμενα συνάγεται ότι οποιαδήποτε κατάσταση $|\psi\rangle$ ενός qubit μπορεί να γραφτεί με τον γραμμικό συνδυασμό των $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_{-1}\rangle$.
- Δηλαδή για οποιαδήποτε a, b όπου $|\psi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle$ μπορούμε πάντα να βρίσκουμε c, d για τα οποία

$$|\psi\rangle = c\,|\psi_1\rangle + d\,|\psi_{-1}\rangle$$

  όπου $c = (a+b)/\sqrt{2}$ και $d = (a-b)/\sqrt{2}$
- Επομένως μπορούμε να εκφράζουμε τα qubit μας βάσει των ορθοκανονικών καταστάσεων $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_{-1}\rangle$ αντί των $|0\rangle$ και $|1\rangle$.
- Λέμε ότι τα $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_{-1}\rangle$ αποτελούν μία ορθοκανονική βάση. Εύκολα δείχνουμε ότι και τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$ είναι μία ορθοκανονική βάση.
- Οπότε κάνουμε *αλλαγή βάσης* από τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$ στα $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_{-1}\rangle$

Αλλαγή βάσης

- Με την βοήθεια του εσωτερικού γινομένου μπορούμε να πάμε από την μία βάση στην άλλη.
- Ξεκινάμε από το ότι:

$$|\psi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle = c\,|\psi_1\rangle + d\,|\psi_{-1}\rangle$$

- Παίρνοντας το εσωτερικό γινόμενο με τα $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_{-1}\rangle$ θα έχουμε:

$$c = a\,\langle\psi_1|0\rangle + b\,\langle\psi_1|1\rangle$$

$$d = a\,\langle\psi_{-1}|0\rangle + b\,\langle\psi_{-1}|1\rangle$$

- Σε μορφή πίνακα:

$$\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle\psi_1|0\rangle & \langle\psi_1|1\rangle \\ \langle\psi_{-1}|0\rangle & \langle\psi_{-1}|1\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

Αλλαγή βάσης

- Οποτε αν ορίσουμε τον πίνακα:

$$H = \begin{bmatrix} \langle \psi_1 | 0 \rangle & \langle \psi_1 | 1 \rangle \\ \langle \psi_{-1} | 0 \rangle & \langle \psi_{-1} | 1 \rangle \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

- και τα 2×1 διανύσματα που παριστάνουν την κατάσταση στις δύο εναλλακτικές βάσεις:

$$\vec{r}_1 = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}, \vec{r}_2 = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}$$

- τότε ο πίνακας H μας βοηθάει να περάσουμε από την μία αναπαράσταση στην άλλη:

$$\vec{r}_2 = H \vec{r}_1$$

- Ο πίνακας αυτός ονομάζεται πίνακας Hadamard 2×2.

Η πύλη Hadamard

- Η πύλη που αντιστοιχεί στον πίνακα Hadamard ονομάζεται *πύλη Hadamard*.
- Χρησιμοποιείται πολύ συχνά στην υλοποίηση κβαντικών κυκλωμάτων.
- Όπως και η NOT αντιστρέφεται από τον εαυτό της:

$$HH = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I_2$$

- Επομένως:

$$HH\left|\psi\right\rangle = I_2\left|\psi\right\rangle = \left|\psi\right\rangle$$

Η πύλη Hadamard

- Οι ιδιοτιμές του πίνακα Hadamard υπολογίζονται από την σχέση $\det(H - \lambda I_2) = 0$

$$\det(H - \lambda I_2) = \det\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\lambda & 0\\ 0 & \lambda\end{bmatrix}\right) =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\det\left(\begin{bmatrix}1-\lambda\sqrt{2} & 1\\ 1 & -1-\lambda\sqrt{2}\end{bmatrix}\right) = (\lambda\sqrt{2}-1)(\lambda\sqrt{2}+1) - 1 =$$

$$2\lambda^2 - 1$$

- Επομένως οι ιδιοτιμές του πίνακα δίνονται από την σχέση $2\lambda^2 - 1 = 0$ οπότε είναι οι $\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}$ και $\lambda = -\frac{1}{\sqrt{2}}$

Η πύλη Hadamard

- Για να βρούμε τα ιδιοδιανύσματα θα πρέπει για $\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}$ και $\lambda = -\frac{1}{\sqrt{2}}$να λύσουμε την εξίσωση:

$$H\left|\psi\right\rangle = \lambda\left|\psi\right\rangle$$

η οποία γράφεται εάν $\left|\psi\right\rangle = a\left|0\right\rangle + b\left|1\right\rangle$ θα έχουμε:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix} = \lambda\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix}$$

- Η παραπάνω εξίσωση γράφεται:

$$a + b = \sqrt{2}\lambda a$$

$$a - b = \sqrt{2}\lambda b$$

- Για $\lambda = 1/\sqrt{2}$ η πρώτη εξίσωση δίνει $b = 0$. Οπότε για να είναι κανονικοποιημένο η κατάσταση (θυμηθείτε $|a|^2 + |b|^2 = 1$) μπορούμε να επιλέξουμε $a = 1$.

Η πύλη Hadamard

- Αυτό σημαίνει ότι το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $\lambda = 1/\sqrt{2}$ είναι το $a\,|0\rangle + b\,|1\rangle = |0\rangle$.
- Με τον ίδιο τρόπο θα βρούμε ότι εάν $\lambda = -1/\sqrt{2}$ θα έχουμε $a = 0$ και $b = 1$.
- Επομένως το $a\,|0\rangle + b\,|1\rangle = |1\rangle$ είναι ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή αυτή.
- Είναι προφανές ότι πάλι τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$ είναι ορθοκανονικά και φτιάχνουν μία βάση που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να εκφράσει οποιαδήποτε κατάσταση ενός qubit.

Μερικές χρήσιμες ιδιότητες πινάκων

- Οι πίνακες H και X που είδαμε στις προηγούμενη ενότητα έχουν την ιδιότητα τα ιδιοδιανύσματα τους να φτιάχνουν μία βάση με την οποία μπορούμε να αναπαραστήσουμε κάθε δυνατή κατάσταση ενός qubit $|\psi\rangle$.
- Πρόκειται για ειδικές περιπτώσεις μίας γενικής κατηγορίας πινάκων που λέγονται *κανονικοί* πίνακες.
- Για να ορίσουμε τους κανονικούς πίνακες, αρχικά ορίζουμε τον ερμιτιανό συζηγή A^{T} ενός $N \times N$ πίνακα A.
- Τα στοιχεία β_{pq} του A^{T} σχετίζονται με τα στοιχεία a_{pq} του A βάσει της σχέσης:

$$\beta_{pq} = a^*_{qp}$$

- Δηλαδή οι στήλες γίνονται γραμμές και οι γραμμές στήλες και παίρνουμε το μιγαδικό συζυγές.

Ερμιτιανός συζυγής γινομένου

- Ας υποθέσουμε ότι ο C είναι το γινόμενο δύο $N \times N$ πινάκων A και B με στοιχεία a_{pq} και β_{pq} αντίστοιχα.
- Τότε ξέρουμε ότι τα στοιχεία c_{pq} του C δίνονται από την σχέση:

$$c_{pq} = \sum_{k=1}^{N} a_{pk}\beta_{kq}$$

- αν πάρουμε το μιγαδικό συζυγές και ανταλλάξουμε το p με το q βρίσκουμε:

$$c^*_{qp} = \sum_{k=1}^{N} \beta^*_{kp} a^*_{qk}$$

- Ας συμβολίσουμε με $\bar{c}_{pq} = c^*_{qp}$ του ερμιτιανού συζυγούς του C^{T} και ας ακολουθήσουμε τον ίδιο συμβολισμό για τα στοιχεία του A^{T} και του B^{T}. Θα έχουμε:

$$\bar{c}_{pq} = \sum_{k=1}^{N} \bar{\beta}_{pk}\bar{a}_{kq}$$

- από τα παραπάνω προκύπτει ότι: $C^{\mathrm{T}} = (AB)^{\mathrm{T}}$

Ερμιτιανός συζυγής γινομένου

- Ας συμβολίσουμε με $\bar{c}_{pq} = c^*_{qp}$ του ερμιτιανού συζυγούς του C^{T} και ας ακολουθήσουμε τον ίδιο συμβολισμό για τα στοιχεία του A^{T} και του B^{T}. Θα έχουμε:

$$\bar{c}_{pq} = \sum_{k=1}^{N} \bar{\beta}_{pk} \bar{a}_{kq}$$

- από τα παραπάνω προκύπτει ότι ο πίνακας ο ερμιτιανός συζυγής του πίνακα $C = AB$ είναι το γινόμενο του $B^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}}$, δηλαδή:

$$(AB)^{\mathrm{T}} = B^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}}$$

- Οπότε ο ερμιτιανός συζυγής σχηματίζεται παίρνοντας το γινόμενο των επιμέρους συζυγών *στην αντίστροφη σειρά*.

Παράδειγμα

- Έστω:

$$A = \begin{bmatrix} 1+j & 2+j \\ 1-2j & 3+j \end{bmatrix}$$

- τότε:

$$A^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1-j & 1+2j \\ 2-j & 3-j \end{bmatrix}$$

- Επίσης ας θεωρήσουμε τον πίνακα $\mathcal{R}_x(\omega)$ που όπως είδαμε δίνεται από την

$$\mathcal{R}_x(\omega) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\omega}{2} & -j\sin\frac{\omega}{2} \\ -j\sin\frac{\omega}{2} & \cos\frac{\omega}{2} \end{bmatrix}$$

- Θα έχουμε:

$$\mathcal{R}_x^{\mathrm{T}}(\omega) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\omega}{2} & j\sin\frac{\omega}{2} \\ j\sin\frac{\omega}{2} & \cos\frac{\omega}{2} \end{bmatrix} = \mathcal{R}_x(-\omega)$$

Κανονικοί πίνακες

- Ένας τετραγωνικός $N \times N$ πίνακας A λέγεται *κανονικός* όταν ισχύει:

$$AA^{\mathrm{T}} = A^{\mathrm{T}}A$$

- Δηλαδή ο A είναι κανονικός όταν αντιμετατίθεται με τον ερμιτιανό συζυγή του.
- Όσο και αν φαίνεται περίεργο αυτό δεν συμβαίνει πάντα. Ας πάρουμε για παράδειγμα τον A που ορίσαμε προηγουμένως:

$$AA^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1+j & 2+j \\ 1-2j & 3+j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1-j & 1+2j \\ 2-j & 3-j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 & 6+4j \\ 6-4j & 15 \end{bmatrix}$$

$$A^{\mathrm{T}}A = \begin{bmatrix} 1-j & 1+2j \\ 2-j & 3-j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1+j & 2+j \\ 1-2j & 3+j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 & 4+6j \\ 4-6j & 15 \end{bmatrix}$$

- Επομένως $AA^{\mathrm{T}} \neq A^{\mathrm{T}}A$

Ερμιτιανοί πίνακες

- οι πίνακες X, Y και Z που είδαμε μέχρι τώρα έχουν την ιδιότητα:

$$X^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = X$$

$$Y^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{bmatrix} = Y$$

$$Z^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = Z$$

- δηλαδή είναι ίσοι με τον ερμιτιανό συζυγή τους, οπότε εύκολα προκύπτει ότι είναι κανονικοί, π.χ. $XX^{\mathrm{T}} = X^2 = X^{\mathrm{T}}X$
- Όταν ένας πίνακας M είναι ίσος με τον ερμιτιανό συζυγή του ονομάζεται *ερμιτιανός*.

Μοναδιαιοι πίνακες

- Στα προηγούμενα είδαμε ότι οι μετασχηματισμοί που μπορούμε να κάνουμε πάνω στα qubits περιγράφονται από μοναδιαίους πίνακες.
- Ένας μοναδιαίος πίνακας αντιστρέφεται από τον εαυτό του, δηλαδή:

$$UU^{\mathrm{T}} = U^{\mathrm{T}}U = I_2$$

- Οπότε και οι μοναδιαίοι πίνακες είναι κανονικοί πίνακες.
- Για παράδειγμα για τον πίνακα $\mathcal{R}_x(\omega)$ θα έχουμε:

$$\mathcal{R}_x(\omega)\mathcal{R}_x^{\mathrm{T}}(\omega) = \begin{bmatrix} \cos\frac{\omega}{2} & -j\sin\frac{\omega}{2} \\ -j\sin\frac{\omega}{2} & \cos\frac{\omega}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\frac{\omega}{2} & j\sin\frac{\omega}{2} \\ j\sin\frac{\omega}{2} & \cos\frac{\omega}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathcal{R}_x^{\mathrm{T}}(\omega)\mathcal{R}_x(\omega)$$

Κανονικοί πίνακες και βάσεις

- Μία πολύ σημαντική ιδιότητα των κανονικών πινάκων είναι ότι πάντα μπορούμε να φτιάξουμε μία ορθοκανονική βάση από τα ιδιοδιανύσματα ενός κανονικού πίνακα A.
- Πιο συγκεκριμένα εάν ο πίνακας A έχει διαστάσεις $N \times N$ τότε μπορούμε να φτιάξουμε μία ορθοκανονική βάση από τα ιδιοδιανύσματα του $|v_i\rangle$ έτσι ώστε κάθε διάνυσμα $|v\rangle$ με διαστάσεις $N \times 1$, να γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός των v_i, δηλαδή:

$$|v\rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i \, |v_i\rangle$$

- Εφόσον η βάση είναι ορθοκανονική θα έχουμε:

$$\langle v_p | v_p \rangle = \| |v_p\rangle \|^2 = 1 \qquad\qquad \langle v_p | v_q \rangle = 0 \text{ εάν } p \neq q$$

Παράδειγμα

- Ας πάρουμε τον πίνακα:

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

- Ο πίνακας αυτός είναι Ερμιτιανός αφού $A^{\mathrm{T}} = A$ και επομένως και κανονικός.
- Αν υπολογίσουμε το $\det(A - \lambda I)$ θα έχουμε:

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} =$$

$$(1-\lambda)\left((1-\lambda)^2 - 1\right) = (1-\lambda)\lambda(\lambda - 2)$$

- οπότε βλέπουμε ότι ο πίνακας έχει ιδιοτιμές $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0$ και $\lambda_3 = 2$.

Παράδειγμα

- Για να βρούμε τα ιδιοδιανύσματα $|v_i\rangle$ θα πρέπει να λύσουμε την εξίσωση $(A - \lambda_i I)|v_i\rangle = 0$. Ας θέσουμε

$$|v_i\rangle = \begin{bmatrix} v_{i1} \\ v_{i2} \\ v_{i3} \end{bmatrix}$$

- Για $i = 1$, $\lambda_1 = 1$ οπότε:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{12} \\ v_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Δηλαδή το v_{11} μπορεί να έχει όποια τιμή θέλουμε και θα πρέπει να επιλέξουμε τα v_{12} και v_{13} έτσι ώστε:

$$v_{12} + v_{13} = 0$$

Μία προφανής λύση είναι να θέσουμε $v_{11} = 1$ και $v_{12} = v_{13} = 0$.

Παράδειγμα

- Επομένως το μοναδιαίο διάνυσμα

$$|v_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- είναι το ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $\lambda_1 = 1$.
- Για την ιδιοτιμή $\lambda_2 = 0$ το σύστημα γράφεται:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{21} \\ v_{22} \\ v_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Οπότε $v_{21} = 0$ και $v_{22} + v_{23} = 0$. Αν επιλέξουμε $v_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ και $v_{23} = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ θα έχουμε $v_{21}^2 + v_{22}^2 + v_{23}^2 = 1$, οπότε το διάνυσμα θα είναι μοναδιαίο.

Παράδειγμα

- Το διάνυσμα $|v_2\rangle$ που αντιστοιχεί στην $\lambda_2 = 0$ δίνεται από την σχέση:

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

- Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε ότι στην ιδιοτιμή $\lambda_3 = 2$ αντιστοιχεί το ιδιοδιάνυσμα

$$|v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- Είναι εύκολο να δούμε ότι:

$$\langle v_p | v_p \rangle = \left\| |v_p\rangle \right\|^2 = 1 \qquad \langle v_p | v_q \rangle = 0 \text{ εάν } p \neq q$$

Παράδειγμα

- Κάθε διάνυσμα $|r\rangle$ που είναι 3×1 μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός των $|v_i\rangle$.
- Είναι εύκολο να δείξουμε ότι:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|v_2\rangle + |v_3\rangle) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}(|v_2\rangle - |v_3\rangle) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- Οπότε δείχνουμε και ότι το $|r\rangle$ είναι γραμμικός συνδυασμός των $|v_i\rangle$.

$$r = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{bmatrix} = r_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + r_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + r_3 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} =$$

$$r_1 |v_1\rangle + \frac{r_2 + r_3}{\sqrt{2}} |v_2\rangle + \frac{r_2 - r_3}{\sqrt{2}} |v_3\rangle$$

Διαγωνιοποίηση

- Υπάρχει μία πολύ χρήσιμη ιδιότητα που ισχύει για τους κανονικούς πίνακες.
- Είδαμε ότι μπορούμε να φτιάχνουμε μία ορθοκανονική βάση από τα ιδιοδιανύσματα ενός κανονικού πίνακα A.
- Ας υποθέσουμε ότι τα ιδιοδιανύσματα του A που φτιάχνουν ορθοκανονική βάση είναι τα $|v_i\rangle$.
- Το ιδιοδιάνυσμα $|v_i\rangle$ αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή λ_i.
- Εάν v_{iq} είναι οι συντεταγμένες του $|v_i\rangle$, δηλαδή:

$$|v_i\rangle = \begin{bmatrix} v_{i1} \\ \cdots \\ v_{iN} \end{bmatrix}$$

Διαγωνιοποίηση

- Το εσωτερικό γινόμενο δύο ιδιοδιανυσμάτων γράφεται:

$$\langle v_q | v_p \rangle = \begin{bmatrix} v_{q1}^* & \cdots & v_{qN}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{p1} \\ \cdots \\ v_{pN} \end{bmatrix} = \sum_{k=1}^{N} v_{qk}^* v_{pk} = \delta_{qp}$$

- Στην παραπάνω σχέση το δ_{qp} είναι 1 όταν $p = q$ και 0 όταν $p \neq q$.
- Ας φτιάξουμε τώρα έναν πίνακα V που έχει ως στήλες τα ιδιοδιανύσματα του A

$$V = \begin{bmatrix} v_{11} & \cdots & v_{N1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ v_{1N} & \cdots & v_{NN} \end{bmatrix}$$

Διαγωνιοποίηση

- Ο πίνακας V^{T} προκύπτει κάνοντας της στήλες του V γραμμές και παίρνοντας το μιγαδικό συζυγές:

$$V^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} v_{11}^* & \cdots & v_{1N}^* \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ v_{N1}^* & \cdots & v_{NN}^* \end{bmatrix}$$

- Ας υπολογίσουμε το γινόμενο $V^{\mathrm{T}}V$ το οποίο θα έχει στοιχεία γ_{pq} που θα δίνονται από την σχέση:

$$\gamma_{qp} = \sum_{k=1}^{N} v_{qk}^* v_{kp}$$

- Όμως όπως είδαμε προηγουμένως το άθροισμα αυτό ισούνται με δ_{qp} και επομένως

$$V^{\mathrm{T}}V = I$$

- δηλαδή το V είναι μοναδιαίος πίνακας.

Διαγωνιοποίηση

- Εφόσον το $|v_i\rangle$ είναι ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή λ_i θα έχουμε:

$$A|v_i\rangle = \lambda_i |v_i\rangle \to \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1N} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{N1} & \cdots & a_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{i1} \\ \vdots \\ v_{iN} \end{bmatrix} = \lambda_i \begin{bmatrix} v_{i1} \\ \vdots \\ v_{iN} \end{bmatrix}$$

- Από την παραπάνω εξίσωση προκύπτει ότι:

$$\sum_{k=1}^{N} a_{pk} v_{ik} = v_{ip} \lambda_i$$

- Στο δεύτερο μέρος έχουμε ακριβώς την εξίσωση που θα πέρναμε εάν φτιάχναμε έναν διαγώνιο $N \times N$ πίνακα Λ με τα στοιχεία της διαγωνίου να ισούται με τις ιδιοτιμές του A και πολλαπλασιάζαμε το V με το Λ.

Διαγωνιοποίηση

- ο πίνακας Λ γράφεται:

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N \end{bmatrix}$$

- ενώ η εξίσωση ιδιοτιμών γράφεται:

$$AV = V\Lambda \rightarrow A = V\Lambda V^{\mathrm{T}}$$

- Η παραπάνω σχέση μας λέει ότι ο κανονικός πίνακας A γράφεται ως γινόμενο ενός μοναδιαίου πίνακα V(που περιέχει ως στήλες τα ιδιοδιαδιανύσματα του A), ενός διαγώνιου πίνακα Λ που έχει ως στοιχεία της διαγωνίου του τις ιδιοτιμές του A και του ερμιτιανιού συζυγούς του V. Αυτό ονομάζεται *διαγωνιοποιήση του* A.

Παράδειγμα

- Ας διαγωνιοποιήσουμε τον A που δίνεται από την σχέση:

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

- στα προηγούμενα είδαμε ότι ο πίνακας αυτός έχει ιδιοτιμές $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0$ και $\lambda_3 = 2$ με τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα:

$$|v_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} \qquad |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- Οπότε:

$$V = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \qquad \Lambda = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$