科学计算中的量子算法：线性方程组的量子算法 1

安冬

北京大学北京国际数学研究中心（BICMR）

andong@bicmr.pku.edu.cn

24-25 学年第 2 学期

大纲

- HHL 算法
- 推广 HHL 算法

量子线性方程组问题

经典: 令 A 是一个 N 乘 N 的厄米矩阵，b 是一个 N 维向量，求

$$x = A^{-1}b$$

- 非厄米情况：考虑 $\begin{pmatrix} 0 & A \\ A^\dagger & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}$

量子: 制备一个量子态，以不超过 ϵ 的误差逼近

$$|x\rangle = \frac{A^{-1}|b\rangle}{\|A^{-1}|b\rangle\|}$$

- 假设 $\|A\| = 1$，并且我们已知 A 的 $(1, a, 0)$-block-encoding 和 b 的态制备 oracle

参数: 维数 N, 误差 ϵ, 条件数 $\kappa = \|A\|\|A^{-1}\|$

Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL)[1]

HHL: 首个量子线性方程组算法

核心思路: 记 A 的特征值和特征向量为 $(\lambda_j, |v_j\rangle)$, 右端项 $|b\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |v_j\rangle$

$$A^{-1}|b\rangle = \left(\sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j^{-1} |v_j\rangle \langle v_j|\right) \left(\sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |v_j\rangle\right) = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\beta_j}{\lambda_j} |v_j\rangle$$

核心步骤:

- “并行” 计算 λ_j 的信息
- “并行” 在 $|v_j\rangle$ 前乘以 λ_j^{-1}

[1] Harrow-Hassidim-Lloyd [arXiv:0811.3171]

HHL

核心步骤:

- “并行” 计算 λ_j 的信息
- “并行” 在 $|v_j\rangle$ 前乘以 λ_j^{-1}

子程序:

- 哈密顿量模拟： $U = e^{iA}$
- 量子相位估计 (QPE):

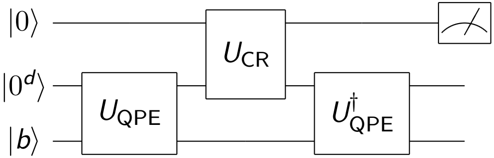
$$U_{\mathrm{QPE}}\,|0\rangle\,|v_j\rangle = |\lambda_j\rangle\,|v_j\rangle$$

（暂时假设 A 的特征值有 d 位二进制表示）

- 控制旋转:

$$U_{\mathrm{CR}}\,|0\rangle\,|\theta\rangle = \left(\frac{C}{\theta}\,|0\rangle + \sqrt{1 - |C/\theta|^2}\,|1\rangle\right)|\theta\rangle$$

HHL 算法



- **测量前输出**：

$$C\,|0\rangle\,|0^d\rangle\,A^{-1}\,|b\rangle + |\perp\rangle$$

- $C \sim 1/\kappa$

HHL 误差分析

误差来源：哈密顿量模拟，QPE

$$U_{\mathrm{QPE}}\left|0\right\rangle\left|v_j\right\rangle = |\widetilde{\lambda}_j\rangle\left|v_j\right\rangle, \quad |\widetilde{\lambda}_j - \lambda_j| \le \epsilon'|\lambda_j|$$

$$U_{\mathrm{HHL}}\left|0\right\rangle\left|b\right\rangle = \left|0\right\rangle \sum \frac{C\beta_j}{\widetilde{\lambda}_j}\left|v_j\right\rangle + \left|\perp\right\rangle$$

记 $\widetilde{x} := \sum \frac{C\beta_j}{\widetilde{\lambda}_j}\left|v_j\right\rangle, x := \sum \frac{C\beta_j}{\lambda_j}\left|v_j\right\rangle = CA^{-1}\left|b\right\rangle$，**并记误差** $\widetilde{\lambda}_j = \lambda_j(1+e_j)$，

$$\|\widetilde{x} - x\| = C\left\|\sum \beta_j\left(\frac{1}{\widetilde{\lambda}_j} - \frac{1}{\lambda_j}\right)\left|v_j\right\rangle\right\| = C\left\|\sum \frac{\beta_j}{\lambda_j}\frac{-e_j}{1+e_j}\left|v_j\right\rangle\right\| \le 2\epsilon'\|x\|$$

$$\|\,|\widetilde{x}\rangle - |x\rangle\,\| \le \frac{2\|\widetilde{x} - x\|}{\|x\|} \le 4\epsilon'$$

可以取 $\epsilon'\epsilon/4$，**但注意** ϵ' **是** QPE **中的相对误差，因此绝对误差可以取为** $\mathcal{O}(\epsilon/\kappa)$

HHL 复杂度分析

单次 HHL 运算：需要 QPE 达到 $\mathcal{O}(\epsilon/\kappa)$ 的精度

- QPE 中关于 $U = e^{iA}$ 的访问复杂度：$\mathcal{O}(\kappa/\epsilon)$
- 总的关于 A 的访问复杂度：$\mathcal{O}((\kappa/\epsilon)\log(\kappa/\epsilon)) = \widetilde{\mathcal{O}}(\kappa/\epsilon)$

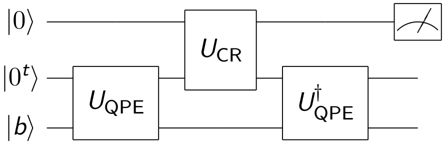
重复次数：注意到 $U_{\mathrm{HHL}}\left|0\right\rangle\left|b\right\rangle = \left|0\right\rangle \|\widetilde{x}\| \left|\widetilde{x}\right\rangle + \left|\perp\right\rangle$,

$$p_0 = \|\widetilde{x}\|^2 \geq (\|x\| - \|\widetilde{x} - x\|)^2 \geq \|x\|^2(1-2\epsilon')^2 \geq \frac{1}{4}C^2\|A^{-1}\left|b\right\rangle\|^2 \sim \frac{\|A^{-1}\left|b\right\rangle\|^2}{\kappa^2} \geq \frac{1}{\kappa^2}$$

总复杂度：

	A 的访问复杂度	$\left|b\right\rangle$ 的访问复杂度	线路深度
无振幅放大	$\widetilde{\mathcal{O}}(\kappa^3/\epsilon)$	$\mathcal{O}(\kappa^2)$	$\widetilde{\mathcal{O}}(\kappa/\epsilon)$
有振幅放大	$\widetilde{\mathcal{O}}(\kappa^2/\epsilon)$	$\mathcal{O}(\kappa)$	$\widetilde{\mathcal{O}}(\kappa^2/\epsilon)$

HHL 小结



总访问复杂度：$\widetilde{\mathcal{O}}(\kappa^2/\epsilon)$

- 实际复杂度与具体问题有关：$\widetilde{\mathcal{O}}(\kappa^2/(\epsilon\|A^{-1}|b\rangle\|))$
- 与经典算法的比较：多项式级别更差的 κ 依赖，指数级别更差的 ϵ 依赖，或许指数级别更好的 N 的依赖（取决于输入模型的构造）
- 输出仍为量子态
- 下界：关于 A 为 $\Omega(\kappa\log(1/\epsilon))$，关于 $|b\rangle$ 为 $\Omega(\kappa)$
- 通过修改控制旋转，可以求广义逆的问题

厄米矩阵的矩阵值函数

令 $f(x):[-1,1]\mapsto[-1,1]$，A 为一个厄米矩阵且具有谱分解 $A=V\Lambda V^\dagger$，其中 V 是特征向量基，$\Lambda=\mathrm{diag}\{\lambda_0,\cdots,\lambda_{N-1}\}$ 包含特征值

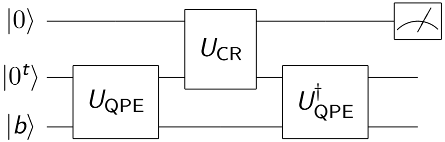
矩阵函数：通过特征值变换来定义

$$f(A):=Vf(\Lambda)V^\dagger$$

- 与矩阵多项式的线性代数定义相一致
- 线性方程组：$f(x)=C/x$, $|x|\in[1/\kappa,1]$

目标: 制备一个量子态，以不超过 ϵ 的误差逼近 $f(A)\left|b\right\rangle/\|f(A)\left|b\right\rangle\|$

推广 HHL 算法



控制旋转修改为:

$$U_{\mathsf{CR}} |0\rangle |\theta\rangle = \left(f(\theta) |0\rangle + \sqrt{1 - |f(\theta)|^2} |1\rangle \right) |\theta\rangle$$

线路输出（测量前）:

$$|0\rangle |0^d\rangle f(A) |b\rangle + |\perp\rangle$$

复杂度：取决于具体的 f，但关于 ϵ 仍为 $\mathcal{O}(1/\epsilon)$（原因：QPE）

阅读

阅读：

- LL: Chapter 4.3