科学计算中的量子算法：线性微分方程的量子算法 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

- 基于线性方程组的算法

量子线性微分方程问题

$$
\begin{aligned}
\frac{du(t)}{dt} &= Au(t) + b, \quad t \in [0, T], \\
u(0) &= |u_0\rangle
\end{aligned}
$$

输入：N 维方阵 A 的一个 $(\alpha, a, 0)$-block-encoding，N 维向量 b 的一个态制备 oracle

稳定性假设：

- A 的特征值的实部非正
- A 的实部的特征值非正

目标：制备一个量子态近似 $|u(T)\rangle = u(T)/\|u(T)\|$

参数：维数 N，误差 ϵ，时间 T

尝试：time-marching/time-stepping

考虑对于齐次方程的向前 Euler：

$$\frac{u_{k+1} - u_k}{h} = Au_k$$

- 时间步数 M，时间步长 $h = T/M$，$u_k \approx u(kh)$

$$u_{k+1} = (I + hA)u_k, \quad u_M = (I + hA)^M u_0$$

问题：$(I + hA)$ 的 block-encoding factor（如果用 LCU）至少是 $1 + h$，每步都会有概率失败，最终成功概率是指数小的

- 在哈密顿量模拟中遇到过类似的问题，当时的解决方案是 OAA，但 OAA 要求 e^{Ah} 是酉变换，一般 ODE 无法满足

基于线性方程组的算法

$$\frac{du(t)}{dt} = Au(t) + b, \quad t \in [0, T],$$
$$u(0) = |u_0\rangle$$

思路：

1. 时间离散，转化为扩大的线性方程组问题
2. 应用量子线性方程组算法
3. 后处理

量子向前 Euler 法

$$\frac{u_{k+1}-u_k}{h} = Au_k + b$$

- 时间步数 M，时间步长 $h = T/M$，$u_k \approx u(kh)$

线性方程组：

$$\begin{pmatrix} I & & & & \\ -(I+hA) & I & & & \\ & -(I+hA) & I & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -(I+hA) & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0 \\ hb \\ hb \\ \vdots \\ hb \end{pmatrix}$$

- 应用量子线性方程组算法（如 HHL 或 LCU），得到 $[u_0; u_1; \cdots; u_M] = \sum_{m=0}^{M} |m\rangle \, \|u_m\| \, |u_m\rangle$
- 测量 $|m\rangle$ 希望得到 M，但概率很小

量子向前 Euler 法

Padding：添加平凡方程以复制多份 u_M

$$\begin{pmatrix} I & & & & & & \\ -(I+hA) & I & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & \\ & & -(I+hA) & I & & & \\ & & & -I & I & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & -I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_M \\ u_M \\ \vdots \\ u_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0 \\ hb \\ \vdots \\ hb \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

- M 份复制，成功概率 $\sim (\|u_M\| / \max \|u_m\|)^2$

量子向前 Euler 法

扩展矩阵和向量的构造:

$$\mathcal{A} = \sum_{j=0}^{2M-1} |j\rangle\langle j| \otimes I - \sum_{j=0}^{M-1} |j+1\rangle\langle j| \otimes (I + hA) - \sum_{j=M}^{2M-2} |j+1\rangle\langle j| \otimes I$$

$$= (I - \mathrm{ADD}) \otimes I - h(\mathrm{ADD} \otimes I) \sum_{j=0}^{M-1} |j\rangle\langle j| \otimes A$$

- 仅需访问一次 A
- $\alpha_{\mathcal{A}} = 2 + \alpha h$

$$\mathbf{b} = \|u_0\| \, |0\rangle \otimes |u_0\rangle + h\|b\| \sum_{j=1}^{M} |j\rangle \otimes |b\rangle$$

量子向前 Euler 法：复杂度分析

$$
\begin{pmatrix}
I & & & & & & & \\
-(I+hA) & I & & & & & & \\
& \ddots & \ddots & & & & & \\
& & -(I+hA) & I & & & & \\
& & & -I & I & & & \\
& & & & \ddots & \ddots & & \\
& & & & & -I & I
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_M \\ u_M \\ \vdots \\ u_M \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} u_0 \\ hb \\ \vdots \\ hb \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}
$$

采用 LCU 求解线性方程组：访问复杂度 $\mathcal{O}(\kappa_{\mathcal{A}}^2 \operatorname{poly}\log(\kappa_{\mathcal{A}}/\epsilon_{\mathrm{QLSP}}))$

- 为了方便起见，我们假设线性方程组的求解没有误差（因为可以取 ϵ_{QLSP} 非常小而只带来 $\operatorname{poly}\log$ 级别的额外复杂度）
- 需要分析 $\kappa_{\mathcal{A}} = \|\mathcal{A}\|\|\mathcal{A}^{-1}\|$

量子向前 Euler 法：复杂度分析

Lemma

设 $\mathcal{C}$ 是一个分块矩阵

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} C_{00} & C_{01} & \cdots & C_{0,p-1} \\ C_{10} & C_{11} & \cdots & C_{1,p-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{p-1,0} & C_{p-1,1} & \cdots & C_{p-1,p-1} \end{pmatrix},$$

那么

$$\|\mathcal{C}\| \leq \sqrt{\left(\max_i \sum_{k=0}^{p-1} \|C_{i,k}\|\right)\left(\max_j \sum_{k=0}^{p-1} \|C_{k,j}\|\right)}$$

量子向前 Euler 法：复杂度分析

取 $h\alpha \le 1$：

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} I & & & & & & \\ -(I+hA) & I & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & \\ & & -(I+hA) & I & & & \\ & & & -I & I & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & -I & I \end{pmatrix}, \quad \|\mathcal{A}\| \le \mathcal{O}(1)$$

量子向前 Euler 法：复杂度分析

取 $h\alpha \le 1$，记 $B = I + hA$：

$$
\mathcal{A}^{-1} = \begin{pmatrix}
I & & & & & & & \\
B & I & & & & & & \\
B^2 & B & I & & & & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & & & \\
B^{M-1} & B^{M-2} & \cdots & B & I & & & \\
B^{M-1} & B^{M-2} & \cdots & B & I & I & & \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\
B^{M-1} & B^{M-2} & \cdots & B & I & \cdots & I & I
\end{pmatrix},
$$

$$
\|B^j\| = \|(I + hA)^j\| = \mathcal{O}(1 + \max_t \|e^{At}\|), \quad \|\mathcal{A}^{-1}\| \le \mathcal{O}(M(1 + \max_t \|e^{At}\|))
$$

- 稳定性假设下，有 $\|\mathcal{A}^{-1}\| \le \mathcal{O}(M)$

量子向前 Euler 法：复杂度分析

$$\|\mathcal{A}\| = \mathcal{O}(1), \quad \|\mathcal{A}^{-1}\| = \mathcal{O}(M)$$

稳定性假设下（同时 $h\alpha \le 1$**），全局误差** $\|u_M - u(T)\| \le \mathcal{O}(Mh^2 \max_t \|u^{(2)}(t)\|)$**，可取** $M = \mathcal{O}((\max_t \|u^{(2)}(t)\|/\|u(t)\|)\, T^2/\epsilon)$

$$\kappa_{\mathcal{A}} = \mathcal{O}\left(\frac{\max_t \|u^{(2)}(t)\|}{\|u(t)\|} \frac{T^2}{\epsilon}\right)$$

总访问复杂度：

$$\widetilde{\mathcal{O}}\left(\frac{\max_t \|u(t)\|}{\|u(T)\|} \frac{\max_t \|u^{(2)}(t)\|^2}{\|u(t)\|^2} \frac{T^4}{\epsilon^2}\right)$$

小结

$$\frac{du(t)}{dt} = Au(t) + b, \quad t \in [0, T],$$
$$u(0) = |u_0\rangle$$

算法：

1. 时间离散 +padding，转化为扩大的线性方程组问题
2. 应用量子线性方程组算法
3. 后处理

拓展：可以得到更好的访问复杂度，如果：

- 更好的数值离散 + 更好的量子线性方程组算法
- 更强的稳定性假设

阅读

阅读：

- LL： Chapter 4.5