科学计算中的量子算法：线性微分方程的量子算法 2

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

- 哈密顿量模拟的线性组合

量子线性微分方程问题

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

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 的特征值的实部非负
- A 的实部的特征值非负：

$$A = L + iH, \quad L = \frac{A + A^\dagger}{2}, \quad H = \frac{A - A^\dagger}{2i}, \quad L \succeq 0$$

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

Duhamel 原理

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

$$u(T) = e^{-AT}|u_0\rangle + \int_0^T e^{-A(T-s)} b \, ds$$

- 考虑构造 $e^{-AT} = e^{-(L+iH)T}$ 的 block-encoding

虚时演化

$$
\begin{aligned}
\frac{du(t)}{dt} &= -Lu(t), \quad t \in [0,T], \quad L^\dagger = L, \quad L \succeq 0,\\
u(0) &= |u_0\rangle
\end{aligned}
$$

- L 的特征值都是非负实数，只需考虑矩阵值函数 $g(Lt)$，其中 $g(x) = e^{-x}$ $(x \geq 0)$

Fourier：设 $g(x) \in L^1(\mathbb{R})$ 且 $g(x) = e^{-x}(x \geq 0)$（小于 0 的部分可任取），令 $\frac{f(k)}{1-ik}$ 是 $g(x)$ 的逆 Fourier 变换

$$
\begin{aligned}
g(x) &= \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik} e^{-ikx} dk,\\
e^{-Lt} &= \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik} e^{-ikLt} dk
\end{aligned}
$$

- 例子：$\frac{f(k)}{1-ik} = \frac{1}{\pi(1+k^2)}$
- 可用 LCU 实现

一般情况

考虑 $A = L + iH$:

$$e^{-Lt} = \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik} e^{-ikLt} dk, \quad e^{-iHt} = \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik} e^{-iHt} dk$$

$$\Longrightarrow \ e^{-(L+iH)t} \ ?$$

哈密顿量模拟的线性组合（LCHS）

Theorem

设 $A = L + iH$，$L \succeq 0$，那么

$$e^{-At} = \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1 - ik} e^{-i(kL+H)t} dk.$$

其中 $f(z)$（$z \in \mathbb{C}$）满足

1. （解析性）$f(z)$ 在下半平面 $\{z : Im(z) < 0\}$ 解析，在边界 $\{z : Im(z) \leq 0\}$ 连续，
2. （衰减性）存在 $\alpha > 0, C > 0$，使得当 $Im(z) \leq 0$ 时，有 $|z|^{\alpha}|f(z)| \leq C$，
3. （归一化）$\int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik} dk = 1$.

LCHS：证明

$$O_L(t) := e^{-(L+iH)t} = \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik} e^{-i(kL+H)t} dk =: O_R(t).$$

思路: 证明 O_L 和 O_R 满足同一个 ODE

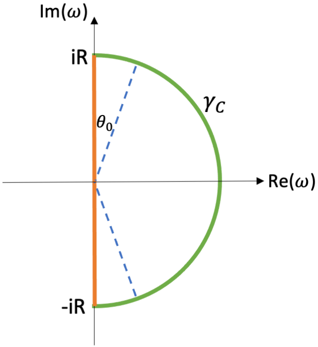
$$\begin{aligned} \frac{dO_L}{dt} &= -(L+iH)O_L(t), \\ \frac{dO_R}{dt} &= -(L+iH)O_R(t) + L\int_{\mathbb{R}} f(k)e^{-i(kL+H)t}dk. \end{aligned}$$

只需证明:

$$\int_{\mathbb{R}} f(k)e^{-i(kL+H)t}dk = 0.$$

LCHS：证明

$$
\begin{aligned}
&\int_{-R}^{R} f(k) e^{-i(kL+H)t} dk \\
&= -i \int_{-iR}^{iR} f(-i\omega) e^{-\omega Lt - iHt} d\omega \\
&= -i \int_{\gamma_C} f(-i\omega) e^{-\omega Lt - iHt} d\omega \\
&= -i \left(\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}+\theta_0} + \int_{\frac{\pi}{2}-\theta_0}^{\frac{\pi}{2}} + \int_{-\frac{\pi}{2}+\theta_0}^{\frac{\pi}{2}-\theta_0} \right) \cdots d\theta
\end{aligned}
$$



假设 $L \succ 0$，选取 $\theta_0 \sim 1/R^{c(\alpha)}$，从而每一项积分都会趋向于 0（$R \to \infty$）

对于 $L \succeq 0$，可以通过取极限来证明

LCHS：算法与复杂度

$$e^{-At} = \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik} e^{-i(kL+H)t} dk \approx \int_{-K}^{K} \frac{f(k)}{1-ik} e^{-i(kL+H)t} dk \approx \sum_j c_j e^{-i(k_j L+H)t}$$

算法：哈密顿量模拟 $+$LCU

访问复杂度：若用截断泰勒实现哈密顿量模拟：$\mathcal{O}(KT\log(KT/\epsilon))$

- 若 $\frac{f(k)}{1-ik} = \frac{1}{\pi(1+k^2)}$：$K = \mathcal{O}(1/\epsilon)$
- 若 $f(k) = \frac{1}{Ce^{(1+ik)^\beta}}$ $\big(\beta \in (0,1)\big)$：$K = \mathcal{O}(\log^{1/\beta}(1/\epsilon))$

$\Longrightarrow$ **访问复杂度**：$\mathcal{O}(T\,\mathrm{poly}\log(T/\epsilon))$

阅读

阅读：

- [arXiv:2312.03916]