科学计算中的量子算法：QSVT 应用

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

- 振幅放大
- 微分方程
- 哈密顿量模拟
- 线性方程组
- 虚时演化
- 特征向量问题

Grover/振幅放大

OAA: 两个酉矩阵 V, W,

$$V|0\rangle|\psi\rangle = \sin(\theta/2)|0\rangle W|\psi\rangle + |\perp\rangle$$

$$\Pi = |0\rangle\langle 0| \otimes I, \quad -R = Z_\Pi = 2\Pi - I$$

OAA 算法:

$$(-1)^k (V Z_\Pi V^\dagger Z_\Pi)^k V|0\rangle|\psi\rangle = \sin((2k+1)\theta/2)|0\rangle W|\psi\rangle + |\perp\rangle$$

Grover/振幅放大

QSVT 角度：

- V 是 $\sin(\theta/2)W$ 的 block-encoding，奇异值都是 $\sin(\theta/2)$
- $VZ_\Pi(V^\dagger Z_\Pi VZ_\Pi)^k$ 是 $T_{2k+1}(\sin(\theta/2)W)$ 的 block-encoding（注意 $T_{2k+1}(\sin(\theta/2)W)$ 通过奇异值变换定义）

$$T_{2k+1}(\sin(\theta/2)W) = T_{2k+1}(\sin(\theta/2))W = (-1)^k \sin((2k+1)\theta/2)W$$

OAA 等价于 QSVT 实现 Chebyshev 多项式：

$$\begin{aligned}(-1)^k(VZ_\Pi V^\dagger Z_\Pi)^k V|0\rangle|\psi\rangle &= (-1)^k(VZ_\Pi V^\dagger Z_\Pi)^k VZ_\Pi|0\rangle|\psi\rangle \\ &= (-1)^k VZ_\Pi(V^\dagger Z_\Pi VZ_\Pi)^k|0\rangle|\psi\rangle \\ &= \sin((2k+1)\theta/2)|0\rangle W|\psi\rangle + |\perp\rangle\end{aligned}$$

- OAA 仍有 undercook/overcook 问题，并且要求 W 是酉矩阵

不动点振幅放大（Fixed-point amplitude amplification，FPAA）

$$U_A |\psi_0\rangle = a|\psi\rangle + |\perp\rangle, \quad (a > 0)$$

- 只知道 a 的一个下界，目标：把 $|\psi\rangle$ 的振幅放大到 $\mathcal{O}(1)$

QSP 角度:

$$\mathcal{H} = \{|\psi_0\rangle, |v_1\rangle, \cdots, |v_{N-1}\rangle\}, \quad \mathcal{H}' = \{|\psi\rangle, |w_1\rangle, \cdots, |w_{N-1}\rangle\}$$

$$[U_A]_{\mathcal{H}\mapsto\mathcal{H}'} = \begin{pmatrix} a & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

算法：利用 QSP 实现多项式 $p(x)$，满足 $|p(x) - 1| \leq \epsilon, \forall x \in [a, 1]$

不动点振幅放大（Fixed-point amplitude amplification，FPAA）

Lemma (符号函数的多项式逼近)

对于任意的 $a \in (0,1)$, $\epsilon \in (0,1/2)$，存在一个次数为 $d = \mathcal{O}((1/a)\log(1/\epsilon))$ 的奇实多项式 $p(x)$，满足

$$\sup_{x\in[a,1]} |p(x) - 1| \le \epsilon, \qquad \sup_{x\in[-1,1]} |p(x)| \le 1.$$

FPAA 复杂度： $\mathcal{O}((1/a)\log(1/\epsilon))$，且不会有 overcook 的问题

一致奇异值放大（Uniform singular value amplification，USVA）

设 A 是一个方阵，$\|A\| \leq 1$，U_A 是 A 的一个 $(1/a, *, 0)$-block-encoding（$a \in (0,1)$）：

$$U_A |0\rangle |\psi\rangle = a |0\rangle A |\psi\rangle + |\perp\rangle$$

目标：构造 A 的一个 $(c, *, \epsilon)$-block-encoding，使得 c 尽可能接近于 1

- 特例：若 A 为酉矩阵，可用 OAA

方法：通过 QSVT 实现 $f(aA)$（通过奇异值变换定义），其中 f 是一个奇函数，且满足

$$f(x) = x/a, \quad x \in [0, a].$$

- 不能直接用线性函数 x/a，因为它在 $[-1, 1]$ 上绝对值并不总小于等于 1

一致奇异值放大（Uniform singular value amplification，USVA）

Lemma (局部线性函数的多项式近似)

对于任意的 $a \in (0,1)$,$\delta \in (0,1]$，$\epsilon \in (0, a/2)$，存在一个次数为 $d = \mathcal{O}(\frac{1}{a\delta}\log(\frac{1}{a\epsilon}))$ 的奇实多项式 $p(x)$，满足

$$\sup_{x\in[0,a]} |(1+\delta)p(x) - x/a| \leq \epsilon.$$

根据 QSVT，可以实现 $p(aA) \approx \frac{1}{1+\delta}A$

- A 的 $(\frac{1}{1+\delta}, *, \epsilon)$-block-encoding
- 访问复杂度：$\mathcal{O}(\frac{1}{a\delta}\log(\frac{1}{a\epsilon}))$

USVA 应用：ODE 的时间推进算法（time-marching）

$$\frac{du(t)}{dt} = A(t)u(t), \quad u(0) = u_0$$

算法：

1. $[0, T]$ 划分为 M 个时间步，$h = T/M$
2. 单步逼近： 用截断 Dyson 逼近 $\mathcal{T} e^{\int_{jh}^{(j+1)h} A(s)ds}$（可用 LCU 实现）
3. 应用 USVA 放大单步数值格式，将所有的单步演化乘在一起

访问复杂度： $\widetilde{\mathcal{O}}(T^2 \operatorname{poly}\log(1/\epsilon))$

- 额外的 T 的依赖来源于 USVA 中 δ 的累积

USVA vs OAA

$$U_A |0\rangle |\psi\rangle = a |0\rangle A |\psi\rangle + |\perp\rangle \quad \to \quad \widetilde{U}_A |0\rangle |\psi\rangle = \frac{1}{1+\delta} |0\rangle A |\psi\rangle + |\perp\rangle$$

	A	δ	QSVT 实现的函数
OAA	酉矩阵	可以使 $\delta = 0$	Chebyshev 多项式
USVA	$\|A\| \leq 1$ 的任意矩阵	必须 $\delta > 0$	分段线性函数

哈密顿量模拟

$$i\frac{du}{dt} = Hu, \quad u(t) = e^{-iHt}\left|u_0\right\rangle, \quad \|H\| \le 1$$

$$e^{-iHt} = \cos(Ht) - i\sin(Ht)$$

Taylor 展开：

$$\cos(tx) = \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{t^{2k}}{(2k)!}x^{2k}, \quad \sin(tx) = \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{t^{2k+1}}{(2k+1)!}x^{2k+1}$$

Jacobi-Anger 展开：

$$\cos(tx) = J_0(t) + 2\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k J_{2k}(t)\,T_{2k}(x), \quad \sin(tx) = 2\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k J_{2k+1}(t)\,T_{2k+1}(x)$$

- J_α : 第一类 Bessel 函数，$J_\alpha(x) = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-1)^m}{m!\Gamma(m+\alpha+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{2m+\alpha}$

哈密顿量模拟

Lemma (三角函数的多项式近似)

对于任意的 $t \in \mathbb{R}$，$\epsilon \in (0, e^{-1})$，存在次数为 $d = \mathcal{O}(t + \frac{\log(1/\epsilon)}{\log(e+\log(1/\epsilon)/t)})$ 的偶实多项式 $p_0(x)$ 和奇实多项式 $p_1(x)$，满足

$$\sup_{x\in[-1,1]} |\cos(tx) - p_0(x)| \le \epsilon$$

$$\sup_{x\in[-1,1]} |\sin(tx) - p_1(x)| \le \epsilon$$

算法:

1. 利用 QSVT 实现 $\frac{1}{1+\epsilon}p_0(H)$ 和 $\frac{1}{1+\epsilon}p_1(H)$ 的 block-encoding
2. 利用 LCU 实现 $\frac{1}{2(1+\epsilon)}(p_0(H) + ip_1(H))$ 的 block-encoding，即为 e^{-iHt} 的 $(2(1+\epsilon), a+2, \epsilon)$-block-encoding

访问复杂度：$\mathcal{O}(T + \frac{\log(1/\epsilon)}{\log\log(1/\epsilon)})$，最优访问复杂度

线性方程组

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

SVD：

$$A = W\Sigma V^\dagger, \quad A^{-1} = V\Sigma^{-1}W^\dagger = f^\diamond(A^\dagger)$$

$$f(x) = \frac{1}{x}, \quad x \in [1/\kappa, 1]$$

方法：寻找一个奇实多项式 $p(x)$ 逼近 $f(x)/(2\kappa)$，用 QSVT 实现 $p(A^\dagger)$

线性方程组

Lemma (反比例函数的多项式近似)
对于任意的 $\epsilon \in (0,1)$，存在次数为 $d = \mathcal{O}(\kappa \log(\kappa/\epsilon))$ 的奇实多项式 $p(x)$，满足

$$\sup_{x\in[1/\kappa,1]} |p(x) - 1/x| \le \epsilon, \qquad \sup_{x\in[-1,1]} |p(x)| \le \mathcal{O}(\kappa)$$

QSVT 可以实现 A^{-1} 的 $(\kappa, a+1, \epsilon)$-block-encoding，还需把它作用在 $|0\rangle\,|b\rangle$ 上并测量

- 最终访问复杂度（有振幅放大）：关于 A：$\mathcal{O}(\kappa^2 \log(\kappa/\epsilon))$; 关于 b：$\mathcal{O}(\kappa)$
- 无需扩大矩阵，相比 LCU 节省了量子比特

推广：矩阵幂函数

Lemma (负幂函数的多项式近似)

对于任意的 $\delta, \epsilon \in (0, 1/2]$，$c > 0$，存在次数为 $d = \mathcal{O}(\frac{\max\{1,c\}}{\delta}\log(1/\epsilon))$ 的奇或偶实多项式 $p(x)$，满足

$$\sup_{x\in[\delta,1]}\left|p(x)-\frac{\delta^c}{2}x^{-c}\right|\le\epsilon,\qquad\sup_{x\in[-1,1]}|p(x)|\le 1$$

推广：矩阵幂函数

Lemma (正幂函数的多项式近似)

对于任意的正整数 s 和 d，存在一个 d 次实多项式 $p(x)$，满足

$$\sup_{x\in[-1,1]} |p(x) - x^s| \leq 2e^{-d^2/(2s)}$$

- s 次单项式可以由 $\mathcal{O}(\sqrt{s\log(1/\epsilon)})$ 次实多项式逼近

虚时演化

设 H 是一个半正定厄米矩阵，考虑 ODE

$$\frac{du(t)}{dt} = -Hu(t), \quad u(t) = e^{-Ht}u(0)$$

Gibbs 态

$$\sigma_\beta = \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta H}, \quad Z_\beta = \mathrm{Tr}(e^{-\beta H})$$

纯化 Gibbs 态：

$$|\sigma_\beta\rangle = \sqrt{\frac{N}{Z_\beta}} (I \otimes e^{-\beta H/2}) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} |j\rangle\, |j\rangle \right)$$

用 QSVT 实现 $e^{-\beta H}$ 有困难：$e^{-\beta x}$ 在 $x = -1$ 处指数大

虚时演化

假设我们知道 $1-H$ 的 $(1,a,0)$-block-encoding，

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta(I-(I-H))}$$

Lemma (指数函数的多项式近似)

对于任意的 $\beta > 0, \epsilon \in (0,1/2)$，存在一个次数为 $d = \mathcal{O}(\sqrt{\beta}\log(1/\epsilon))$ 的实多项式 $p(x)$，满足

$$\sup_{x\in[-1,1]} \left| p(x) - e^{-\beta(1-x)} \right| \le \epsilon$$

QSVT 复杂度：$\mathcal{O}(\sqrt{\beta}\log(1/\epsilon))$

虚时演化

假设我们知道 $\sqrt{H}$ 的 $(1, a, 0)$-block-encoding，

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta(\sqrt{H})^2}$$

Lemma (指数函数的多项式近似)

对于任意的 $\beta > 0, \epsilon \in (0, 1/2)$，存在一个次数为 $d = \mathcal{O}(\sqrt{\beta}\log(1/\epsilon))$ 的偶实多项式 $p(x)$，满足

$$\sup_{x\in[-1,1]} \left| p(x) - e^{-\beta x^2} \right| \leq \epsilon$$

QSVT 复杂度：$\mathcal{O}(\sqrt{\beta}\log(1/\epsilon))$

特征向量问题

设 H 是一个厄米矩阵，满足

1. $\|H\| \leq 1$
2. 有一个单特征值为 0，其对应的特征向量记为 $|\psi_0\rangle$
3. 所有非 0 特征值的绝对值至少为 $\Delta > 0$（被称为谱间隙）
4. 我们知道一个输入的量子态 $|\psi\rangle$ 满足 $|\langle\psi_0|\psi\rangle| = p_0 > 0$

目标: 求 $|\psi_0\rangle$

特征向量问题

考虑一个偶函数 $f(x)$，满足

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x \in [-\Delta/2, \Delta/2], \\ 0, & x \in [-1, -\Delta] \cup [\Delta, 1] \end{cases}$$

$$f(H) |\psi\rangle = p_0 e^{i\theta} |\psi_0\rangle$$

算法:

1. 用 QSVT 实现 $f(H)$ 的 block-encoding
2. 将 $f(H)$ 作用在 $|\psi\rangle$ 上，并测量（结合振幅放大）

特征向量问题

Lemma

对于任意的 $\Delta, \epsilon \in (0, 1/2)$，存在一个次数为 $d = \mathcal{O}(\frac{1}{\Delta}\log(1/\epsilon))$ 的偶实多项式 $p(x)$，满足

$$\sup_{x\in[0,\Delta/2]} |p(x) - 1| \leq \epsilon, \quad \sup_{x\in[\Delta,1]} |p(x)| \leq \epsilon$$

QSVT 复杂度：$\mathcal{O}(\frac{1}{p_0\Delta}\log(1/\epsilon))$，实现了最优复杂度

阅读

阅读：

- LL: Chapter 8.1-8.3