科学计算中的量子算法：绝热量子计算和变分量子算法

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

- 绝热量子计算
- 应用：Grover、线性方程组
- 变分量子算法

特征值问题

假设：

- N 维厄米矩阵 H
- 最小特征值为单特征值（记为 λ_0），并且与其它特征值距离至少 $\Delta > 0$

问题：求 λ_0 和/或其对应的特征向量

注：如果没有任何额外的假设，很可能不存在高效的通用量子算法解决所有特征值问题

特征值问题：算法回顾

- 相位估计（QPE)：酉矩阵，已知特征向量，求特征值
- Filtering：已知特征向量的 $\Omega(1)$ 猜测，已知特征值，求特征向量

绝热量子计算（Adiabatic quantum computing，AQC）

$$
i\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} = H(t/T)\left|\psi(t)\right\rangle, \quad t \in [0, T]
$$

$$
H(s) = (1-s)H_0 + sH_f, \quad s \in [0,1]
$$

- H_f：目标矩阵，H_0：已知的初始矩阵

假设：

- T 非常大
- 存在 $H(s)$ 的一条特征值路径 $\lambda_0(s)$，满足
  - $\lambda_0(1) = \lambda_0$ 为目标特征值
  - 谱间隙条件：$\lambda_0(s)$ 与 $H(s)$ 的其它特征值有至少 $\Delta(s) > 0$ 的距离

绝热量子计算（Adiabatic quantum computing，AQC）

$$
\begin{aligned}
i\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} &= H(t/T)\left|\psi(t)\right\rangle, \quad t \in [0, T] \\
H(s) &= (1-s)H_0 + sH_f, \quad s \in [0,1]
\end{aligned}
$$

绝热演化：若初值 $|\psi(0)\rangle$ 为 H_0 的 $\lambda_0(0)$ 对应的特征向量，则 $|\psi(T)\rangle$ 近似为 H_f 的 $\lambda_0(1)$ 对应的特征向量

算法：制备对应的初始态 $|\psi(0)\rangle$，并应用含时哈密顿量模拟算法（例如乘积公式或截断 Dyson），特征值可用 Hadamard 测试估计

特征向量复杂度：$\mathcal{O}(T\log(T/\epsilon))$

- T 的选取进一步依赖误差和谱间隙

量子绝热定理

Theorem

记 $|\phi\rangle$ 为 H_f 对应 λ_0 的特征值，那么存在一个常数 $C > 0$ 使得

$$
\begin{aligned}
&\| |\psi(T)\rangle \langle\psi(T)| - |\phi\rangle \langle\phi| \| \\
&\leq C\left\{ \frac{\|H'(0)\|}{T\Delta^2(0)} + \frac{\|H'(1)\|}{T\Delta^2(1)} + \frac{1}{T}\int_0^1 \left(\frac{\|H''(\tau)\|}{\Delta^2(\tau)} + \frac{\|H'(\tau)\|^2}{\Delta^3(\tau)} \right) d\tau \right\}.
\end{aligned}
$$

- 记 $\Delta_* = \min_{s\in[0,1]} \Delta(s)$，需要取

$$
T \sim \frac{1}{\Delta_*^3 \epsilon}
$$

应用: 绝热 Grover

考虑函数 $f(x) : [N] \mapsto \{0, 1\}$，满足存在唯一的 $x_0 \in [2^n]$ 使得

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x = x_0, \\ 0, & x \neq x_0 \end{cases}$$

目标：找到 x_0

应用: 绝热 Grover

绝热 oracle：记 $|u\rangle = H^{\otimes n}|0^n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum |j\rangle$,

$$H_0 = I - |u\rangle\langle u|,$$
$$H_f = I - |x_0\rangle\langle x_0|$$

- H_f 的特征向量为目标 $|x_0\rangle$（0 特征值）
- H_0 的特征向量为已知的 $|u\rangle$（0 特征值）
- 存在特征路径，且谱间隙为

$$\Delta(s) = \sqrt{1 - 4\frac{N-1}{N}s(1-s)} \geq \frac{1}{\sqrt{N}} \quad \Longrightarrow \quad T \sim \frac{N^{3/2}}{\epsilon}$$

解决方案：改变插值方法

AQC：一般插值

$$
\begin{aligned}
i\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} &= H(t/T)\left|\psi(t)\right\rangle, \quad t\in[0,T] \\
H(s) &= (1-f(s))H_0 + f(s)H_f, \quad s\in[0,1]
\end{aligned}
$$

- $f(s)$ 是一个插值函数，满足 $f(0)=0$， $f(1)=1$

思路： 选取 $f(s)$ 使得 $f'(s)$ 与 $\Delta(f(s))$ 正相关

$$
\begin{aligned}
&\left\|\left|\psi(T)\right\rangle\left\langle\psi(T)\right| - \left|\phi\right\rangle\left\langle\phi\right|\right\| \\
&\le C\left\{\frac{\|H'(0)\|}{T\Delta^2(0)} + \frac{\|H'(1)\|}{T\Delta^2(1)} + \frac{1}{T}\int_0^1\left(\frac{\|H''(\tau)\|}{\Delta^2(f(\tau))} + \frac{\|H'(\tau)\|^2}{\Delta^3(f(\tau))}\right)d\tau\right\}.
\end{aligned}
$$

应用: 绝热 Grover

$$\Delta(f(s)) = \sqrt{1 - 4\frac{N-1}{N}f(s)(1-f(s))} \geq \frac{1}{\sqrt{N}}$$

选取 $f(s)$ 满足:

$$f'(s) = c\Delta(f(s))^2, \quad f(0) = 0, \quad c = \int_0^1 \Delta(u)^{-2} du$$

$$f(s) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{N-1}}\tan((2s-1)\arctan(\sqrt{N-1}))$$

$$\implies T \sim \frac{\sqrt{N}}{\epsilon}$$

总复杂度: $\mathcal{O}(\frac{\sqrt{N}}{\epsilon}\log(\frac{N}{\epsilon}))$

应用：线性方程组

线性方程组 $Ax = b$，$\|A\| = 1$，暂时先假设 A 厄米正定

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & Q_b \\ Q_b & 0 \end{pmatrix}, \quad H_f = \begin{pmatrix} 0 & AQ_b \\ Q_bA & 0 \end{pmatrix}$$

$$Q_b = I - |b\rangle\langle b|$$

$$H(s) = (1 - f(s))H_0 + f(s)H_f$$

- 0 特征值对应特征向量 $[b; 0]$ 和 $[x; 0]$
- $\Delta(f(s)) \geq 1 - f(s) + f(s)/\kappa$，线性插值会导致 $T \sim \kappa^3/\epsilon$

应用: 线性方程组

$$\Delta(f(s)) \geq 1 - f(s) + f(s)/\kappa$$

选取 $f(s)$ **满足：**

$$f'(s) = c\Delta(f(s))^p, \quad f(0) = 0, \quad c = \int_0^1 \Delta(u)^{-p} du, \quad 1 < p < 2$$

$$f(s) = \frac{\kappa}{\kappa - 1}\left[1 - \left(1 + s(\kappa^{p-1} - 1)^{\frac{1}{1-p}}\right)\right]$$

$$\implies T \sim \frac{\kappa}{\epsilon}$$

总复杂度： $\mathcal{O}(\frac{\kappa}{\epsilon}\log(\frac{\kappa}{\epsilon}))$

AQC: 高阶收敛

$$
\begin{aligned}
& \| |\psi(T)\rangle \langle \psi(T)| - |\phi\rangle \langle \phi| \| \\
\leq\ & C\Big\{ \frac{\|H'(0)\|}{T\Delta^2(0)} + \frac{\|H'(1)\|}{T\Delta^2(1)} + \frac{1}{T}\int_0^1 \left(\frac{\|H''(\tau)\|}{\Delta^2(f(\tau))} + \frac{\|H'(\tau)\|^2}{\Delta^3(f(\tau))} \right) d\tau \Big\}.
\end{aligned}
$$

边界取消条件（boundary cancellation）：对任意的 $k \geq 1$，都有 $H^{(k)}(0) = H^{(k)}(1) = 0$（或 $f^{(k)}(0) = f^{(k)}(1) = 0$）

$$
\text{边界取消条件} \Longrightarrow \text{绝热误差} \lesssim e^{-cT^{\alpha}}
$$

- 证明思路：多次分部积分

应用: 线性方程组

例子:

$$f(s) = \frac{1}{c}\int_0^s e^{-\frac{1}{s(1-s)}}\,ds, \quad c = \left(\int_0^1 e^{-\frac{1}{s(1-s)}}\,ds\right)^{-1}$$

对于线性方程组，该 $f(s)$ 恰好在 $\Delta(f(s))$ 最小时变化最慢，复杂度:

$$\mathcal{O}(\kappa \ \mathsf{poly}\log(\kappa/\epsilon))$$

变分量子算法（Variational quantum algorithm，VQA）

根据特征值定义，

$$\lambda_0 = \min_{|\psi\rangle} \langle \psi | H | \psi \rangle$$

参数化量子线路：

$$|\psi(\theta)\rangle = U_{p-1}(\theta_{p-1}) \cdots U_1(\theta_1) U_0(\theta_0) |\psi_0\rangle$$

考虑优化问题：

$$\min_{\theta} \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$$

变分量子算法：量子估值 + 经典优化

1. 量子线路（例如 Hadamard 测试等）估计 $f(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$
2. 经典优化算法寻找最优的参数 θ

例子：量子近似优化算法（QAOA）

$$\min_{\alpha,\beta} \langle \psi(\alpha,\beta)| H_1 |\psi(\alpha,\beta)\rangle$$

$$|\psi(\alpha,\beta)\rangle = e^{-i\beta_{p-1}H_1} e^{-i\alpha_{p-1}H_0} \cdots e^{-i\beta_1 H_1} e^{-i\alpha_1 H_0} e^{-i\beta_0 H_1} e^{-i\alpha_0 H_0} |\psi_0\rangle$$

- H_0 通常选取为一个简单的哈密顿量
- 可被视为 AQC+ 乘积公式的推广

变分量子算法

优点：

- 结构简单、灵活
- 可能适配近期量子设备

缺点：

- 优化问题较为困难（barren plateau）
- 缺少理论保证