

科学计算中的量子算法

安冬

北京大学北京国际数学研究中心 (BICMR)

andong@bicmr.pku.edu.cn

25-26 学年第 2 学期

课程基本信息

- ▶ 课程主页: <https://dong-an.github.io/QASC/>
- ▶ 先修课程: 高等代数, 概率论
- ▶ 上课时间地点: 二教 106, 每周周二 7-8 节, 单周周四 5-6 节
- ▶ 任课教师: 安冬 (andong@bicmr.pku.edu.cn)

课程参考资料

- ▶ Lin Lin, Lecture Notes on Quantum Algorithms for Scientific Computation. [arXiv:2201.08309](https://arxiv.org/abs/2201.08309)
- ▶ Michael Nielsen, Issac Chuang, Quantum computation and quantum information. 10th anniversary edition, ISBN-13: 978-1107002173
- ▶ Andrew Childs, Lecture Notes on Quantum Algorithms. <https://www.cs.umd.edu/~amchilds/qa/qa.pdf>
- ▶ Quantum algorithm zoo: <https://quantumalgorithmzoo.org/>
- ▶ Online platforms: Qiskit, Cirq, Classiq
- ▶ 会议: QIP, TQC
- ▶ SciRate: <https://scirate.com/>

课程评估

作业 60% (3 次, 每次 20%) + 期末课程项目 40%

作业:

- ▶ 独立完成, 考察对课程内容的理解与思考, 不看重正确率
- ▶ 截止日期: 周二 23 点 59 分 59 秒
 - ▶ 作业 1: 第 6 周周二 (4 月 7 日)
 - ▶ 作业 2: 第 11 周周二 (5 月 12 日)
 - ▶ 作业 3: 第 15 周周二 (6 月 9 日)
- ▶ 迟交、补交: 每迟一天减 2 分, 最低至 12 分

课程评估

期末课程项目：课程论文（30%）+ 展示视频（10%）

- ▶ 选取与课程相关的一篇论文进行阅读学习，并提交课程论文 + 展示视频
 - ▶ 文章参考列表将于第 8 周左右发布
- ▶ 独立或 2 人小组为单位
- ▶ 截止时间：第 16 周周日（6 月 21 日）23 点 59 分 59 秒，不接受迟交

课程评估

- ▶ 课程论文内容要求：
 - ▶ 基本要求 (20%)：正确完整地概括文章的核心内容，正确地重现核心结果的推导思路、关键步骤及重要数值试验，清晰的论文写作，符合一般的学术道德与学术规范等
 - ▶ 额外内容 (10%)：原创性结果与思考，包括但不限于对已有理论结果进行新的数值验证与探索，改进已有结果或推广其应用场景，对可能的研究方向探索等
- ▶ 课程论文格式要求：英文写作，长度不作严格要求，但不宜过短或过长（建议10-15页）
- ▶ 展示视频：展示介绍课程论文的内容，不超过12分钟
 - ▶ 不要求制作幻灯片
 - ▶ 若为2人小组，要求都参与展示

AI 使用

- ▶ 作业：不允许使用 AI
- ▶ 课程项目：
 - ▶ 允许使用 AI 协助理解文章、代码调试、语言润色等
 - ▶ 严禁将 AI 生成内容直接作为论文主体
 - ▶ 需要注明所用 AI 模型名称及具体用途，检查 AI 生成内容的真实性

量子计算

“If you want to make a simulation of nature, you’ d better make it quantum mechanical, and by golly it’ s a wonderful problem, because it doesn’ t look so easy.” [Feynman (1982)]

什么是量子计算？

- ▶ 基于量子力学的原理进行计算的新型计算模式

历史:

- ▶ 物理学：理解量子力学、兴趣驱使、更加自然的方法
- ▶ 计算机科学：硬件摩尔定律、算法效率
- ▶ 密码学：破解经典密码、量子密码

目标：突破经典计算机的算力极限

量子计算

现状：

- ▶ 硬件（实验）方面
- ▶ 算法方面

量子计算：硬件（实验）方面

从含噪声中尺度量子（Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ)）时代迈向早期全容错（Early fault-tolerant）时代

- ▶ 量子霸权（Quantum supremacy）
- ▶ 量子错误纠正（Quantum error correction）

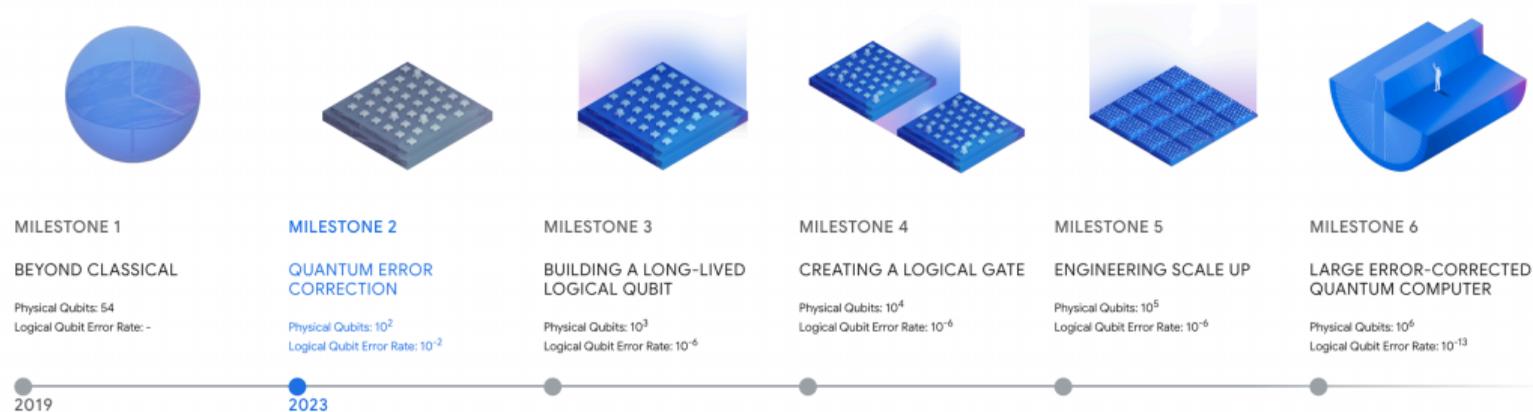
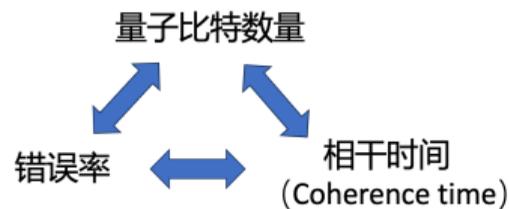
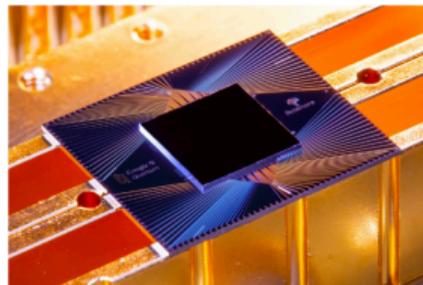


Figure: Credit: Google Quantum AI

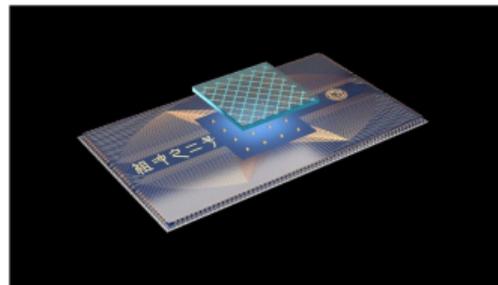
量子霸权



Google Sycamore



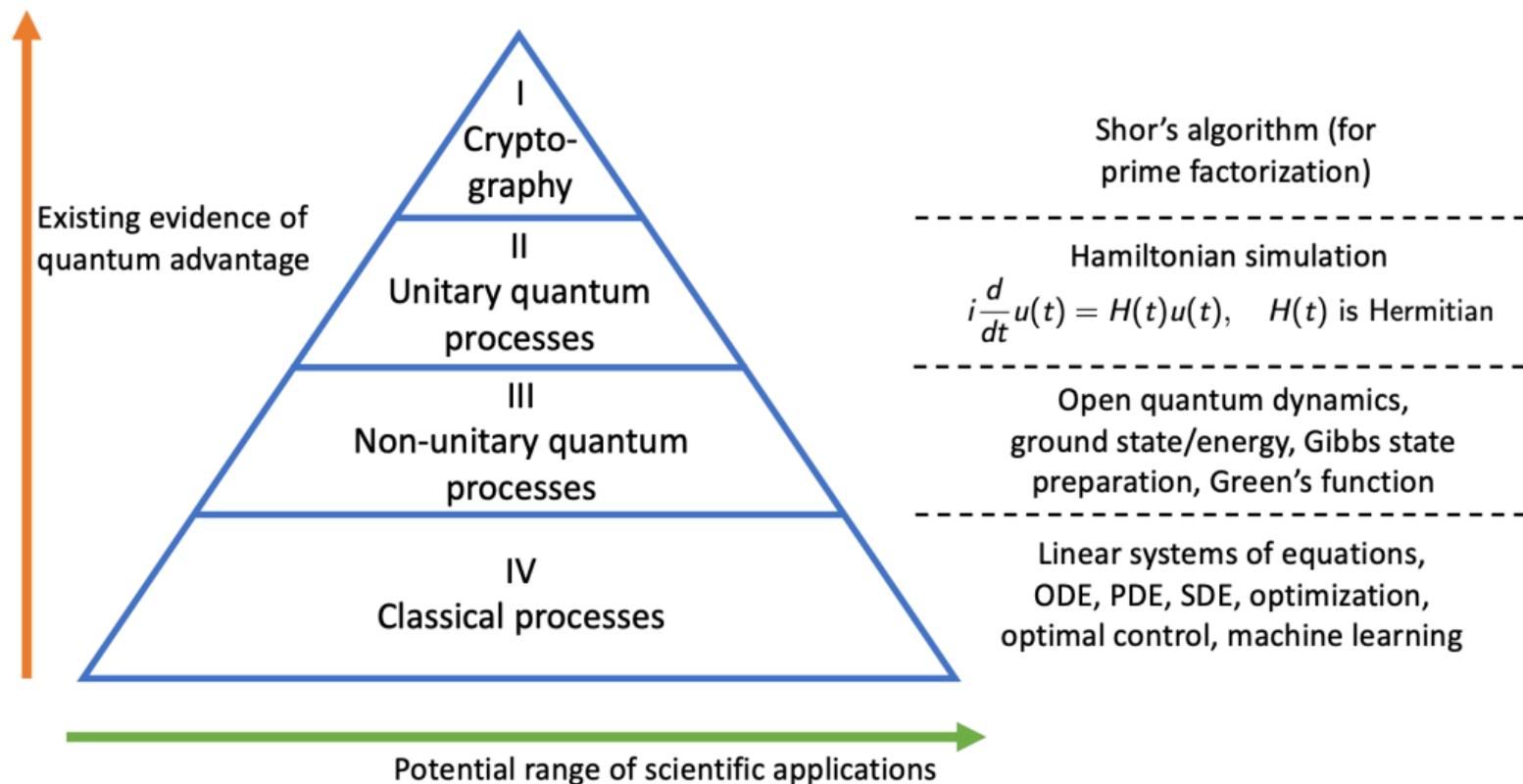
IBM System One



USTC Zuchongzhi

量子霸权: 量子计算机能够有效地完成某一个经典计算机所不能完成的计算任务, 无论该任务是否在实际中有意义

量子计算：算法方面



量子计算：算法方面

量子优势：寻找有实际意义的计算任务，满足量子计算机能够有效完成，但经典计算机不能

- ▶ 期待：量子 $\text{poly} \log(N)$ vs 经典 $\text{poly}(N)$

课程主题

- ▶ 理论算法
- ▶ 仅考虑全容错、大规模、稳定的量子计算机
- ▶ 侧重数学方面：
 - ▶ 主要关心计算数学中的问题
 - ▶ 侧重数学思想

课程大纲

1. 量子力学与量子算法基础:

- ▶ 量子力学的基本原理和数学表达方法, 量子态、量子比特、门、变换、测量、量子电路等基本概念, 量子态不可复制定理, 通用量子门集合 *, 量子与经典计算电路的联系 *, Deutsch-Jozsa 算法等

2. 量子数值线性代数基础

- ▶ 基本对象: 高维向量的量子态表示, 高维矩阵的块编码 (block-encoding) 表示, 简单量子态的制备 (Grover-Rudolph 算法), 简单矩阵的块编码构造 *
- ▶ 基本算法: 计算向量内积的量子算法 (Hadamard test), 矩阵向量乘的量子算法, 向量或矩阵之间加法的量子算法 (LCU), 矩阵乘法的量子算法等

3. 矩阵函数的量子算法

- ▶ 量子化 (qubitization), 切比雪夫多项式的量子算法, 量子信号处理, 厄米矩阵函数的量子算法, 量子奇异值变换算法

课程大纲

4. 量子算法基元 (primitive)

- ▶ 量子傅立叶变换算法, 量子素因数分解算法 (Shor 算法) *, 量子搜索算法 (Grover 算法), 量子振幅估计与放大算法, 量子相位估计算法

5. 哈密顿量模拟的量子算法

- ▶ 不含时: 乘积公式, 泰勒展开, QSVT, 多乘积公式
- ▶ 含时: 乘积公式, Dyson 展开, Magnus 展开

6. 线性方程组的量子算法

- ▶ Harrow–Hassidim–Lloyd 算法, LCU, QSVT, 基于绝热量子计算 (AQC) 的算法

7. 微分方程的量子算法

- ▶ 线性: 基于线性方程组的量子微分方程算法 (欧拉法、多步法、泰勒展开法、谱方法等), LCU
- ▶ 非线性: Carleman 线性化方法

8. 特征值问题的量子算法

- ▶ 绝热量子计算, 离散绝热量子计算, 变分量子算法