科学计算中的量子算法：量子数值线性代数基础

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

大纲

- 量子数值线性代数概览
- 向量的量子表示
- 矩阵的量子表示
- 构造

量子数值线性代数概览

数值线性代数:

- 基本运算：矩阵/向量运算
- 任务：矩阵分解、线性方程组、微分方程、特征值问题等

量子数值线性代数:

- 期待的加速：$\mathcal{O}(\text{poly}\log N)$ vs $\mathcal{O}(\text{poly}N)$
- 运算受限：归一化、酉变换、不可复制定理、输入输出问题等

向量的量子表示：量子态

n 个量子比特：$|i_0 i_1 \cdots i_{n-1}\rangle = |i_0\rangle \otimes |i_1\rangle \otimes \cdots \otimes |i_{n-1}\rangle \in \mathbb{C}^{2^n}, i_j \in \{0,1\}$

记

$$|k\rangle = |(k)_2\rangle \in \mathbb{C}^{2^n}, \quad 0 \le k \le 2^n - 1$$

$$|\psi\rangle = \sum_{k=0}^{2^n-1} \alpha_k |k\rangle \in \mathbb{C}^{2^n} = (\alpha_0, \cdots, \alpha_{2^n-1})^T, \quad \| |\psi\rangle \| = 1.$$

- $\{|k\rangle\}_{k=0}^{2^n-1}$ 表示一组正交基（计算基）
- 测量：以概率 $|\alpha_k|^2$ 得到 k

向量的量子表示：量子态

态制备 oracle：

$$O_\psi : |0\rangle \mapsto |\psi\rangle = \sum_{k=0}^{2^n-1} \alpha_k |k\rangle$$

- 构造 O_ψ 的复杂度：
  - 最坏情况复杂度：$\Omega(2^n)$
  - 某些情况下可以达到 $\mathcal{O}(\text{poly}(n))$
- 在后面的很多算法中，我们会视 O_ψ 为黑盒，并计算访问 O_ψ 的次数（query complexity）

态制备：Grover-Rudolph

目标：制备 $|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{2^n-1} \sqrt{p_i}\,|i\rangle$，其中 $\{p_i\}$ 是可积的离散概率分布

思路：二分法

$$
\begin{aligned}
|0\rangle &\to \sqrt{p_{<2^{n-1}}}\,|0\rangle + \sqrt{p_{\geq 2^{n-1}}}\,|1\rangle \\
&\to \sqrt{p_{<2^{n-1}}}\,|0\rangle \left(\sqrt{\frac{p_{<2^{n-2}}}{p_{<2^{n-1}}}}\,|0\rangle + \sqrt{\frac{p_{\geq 2^{n-2},<2^{n-1}}}{p_{<2^{n-1}}}}\,|1\rangle \right) \\
&\qquad + \sqrt{p_{\geq 2^{n-1}}}\,|1\rangle \left(\sqrt{\frac{p_{\geq 2^{n-1},<1.5\times 2^{n-1}}}{p_{\geq 2^{n-1}}}}\,|0\rangle + \sqrt{\frac{p_{\geq 1.5\times 2^{n-1}}}{p_{\geq 2^{n-1}}}}\,|1\rangle \right) \\
&= \sqrt{p_{<2^{n-2}}}\,|00\rangle + \sqrt{p_{\geq 2^{n-2},<2^{n-1}}}\,|01\rangle + \sqrt{p_{\geq 2^{n-1},<1.5\times 2^{n-1}}}\,|10\rangle + \sqrt{p_{\geq 1.5\times 2^{n-1}}}\,|11\rangle \\
&\cdots\cdots
\end{aligned}
$$

复杂度：$\mathcal{O}(n)$

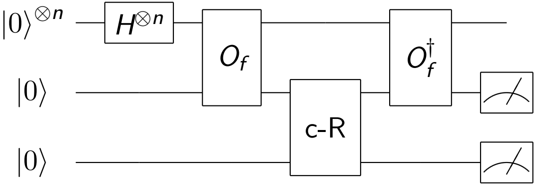
态制备：已知函数

目标：制备 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum |f(i)|^2}} \sum_{i=0}^{2^n-1} f(i) |i\rangle$，其中 $f(i)$ 是一个已知的函数

Oracle：

$$O_f : |i\rangle |0\rangle \mapsto |i\rangle |f(i)\rangle$$

态制备：已知函数



$$O_f : |i\rangle\,|0\rangle \mapsto |i\rangle\,|f(i)\rangle$$

$$\text{c-R} : |\theta\rangle\,|0\rangle \mapsto |\theta\rangle \left(\theta\,|0\rangle + \sqrt{1-|\theta|^2}\,|1\rangle\right)$$

矩阵的量子表示：块编码（block-encoding）

直观：用一个更大的酉矩阵 U_A 的子块表示任意矩阵 A

$$U_A \approx \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha}A & * \\ * & * \end{pmatrix}.$$

- α 被称为块编码系数（block-encoding factor），应满足 $\alpha \geq \|A\|$

矩阵的量子表示：块编码（block-encoding）

Definition (Block-encoding)

设 A 是一个 2^n 乘 2^n 的矩阵. 定义 A 的 (α, a, ϵ)-block-encoding 为一个 2^{n+a} 乘 2^{n+a} 的酉矩阵 U_A，使得

$$\left\| A - \alpha \left(\langle 0|^{\otimes a} \otimes I \right) U_A \left(|0\rangle^{\otimes a} \otimes I \right) \right\| \leq \epsilon.$$

- 构造 U_A 的复杂度通常也很高
- 在后面的很多算法中，我们会视 U_A 为黑盒，并计算访问 U_A 的次数（query complexity）

矩阵向量乘

Input:

Block-encoding of A:

$$A \approx \alpha \left(\langle 0| \otimes I \right) U_A \left(|0\rangle \otimes I \right)$$

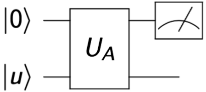
$$U_A \approx \begin{array}{cc} \begin{array}{cc} \langle 0| & \langle 1| \end{array} & \\ \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha}A & * \\ * & * \end{pmatrix} & \begin{array}{c} |0\rangle \\ |1\rangle \end{array} \end{array}$$

or $$U_A \approx |0\rangle \langle 0| \otimes \frac{A}{\alpha} + |0\rangle \langle 1| \otimes * + |1\rangle \langle 0| \otimes * + |1\rangle \langle 1| \otimes *$$

Quantum state:

$$|u\rangle = \sum_{j=0}^{2^n-1} u_j \, |j\rangle$$

'Algorithm': applying block-encoding



or $$U_A |0\rangle |u\rangle \approx \frac{1}{\alpha} |0\rangle A |u\rangle + c |1\rangle |*\rangle$$

or $$\begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha}A & * \\ * & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha}Au \\ * \end{pmatrix}$$

Need to measure the first ancilla qubit

Success probability: $\left(\| A |u\rangle \| / \alpha \right)^2$

Number of repeats (after amplitude amplification): $\mathcal{O}\left(\alpha / \| A |u\rangle \| \right)$

稀疏矩阵的量子表示

设 A 是一个 2^n 乘 2^n 的稀疏矩阵，稀疏度为 s，每个矩阵元素 $|A_{ij}| \leq 1$. 其稀疏 oracle 为

$$
\begin{aligned}
O_r &: |i\rangle\,|l\rangle \mapsto |i\rangle\,|r(i,l)\rangle \\
O_c &: |l\rangle\,|j\rangle \mapsto |c(j,l)\rangle\,|j\rangle \\
O_A &: |i\rangle\,|j\rangle\,|0\rangle \mapsto |i\rangle\,|j\rangle\,|A_{ij}\rangle
\end{aligned}
$$

其中 $r(i,l)$ 或 $c(j,l)$ 分别为第 i 行或第 j 列的第 l 个非 0 元的指标

块编码：酉矩阵

酉矩阵 U 是它自己的 $(1,0,0)$-block-encoding

块编码：Gram 矩阵

$$A = (A_{ij}), \quad A_{ij} = \langle \psi_i | \phi_j \rangle , \quad i, j \in [2^n]$$

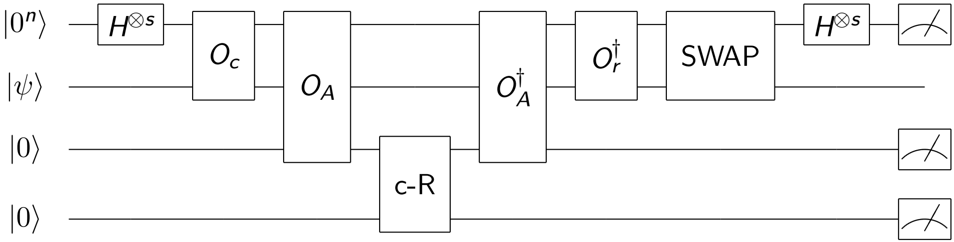
其中 $|\psi_i\rangle , |\phi_j\rangle$ 是两组 $(n + a)$ 比特量子态

设

$$U_L : |0\rangle |i\rangle \mapsto |\psi_i\rangle , \quad U_R : |0\rangle |j\rangle \mapsto |\phi_j\rangle ,$$

则 $U = U_L^\dagger U_R$ 是 A 的一个 $(1, a, 0)$-block-encoding

块编码：稀疏矩阵



$$O_r : |i\rangle\,|l\rangle \mapsto |i\rangle\,|r(i,l)\rangle$$
$$O_c : |l\rangle\,|j\rangle \mapsto |c(j,l)\rangle\,|j\rangle$$
$$O_A : |i\rangle\,|j\rangle\,|0\rangle \mapsto |i\rangle\,|j\rangle\,|A_{ij}\rangle$$
$$\text{c-R} : |\theta\rangle\,|0\rangle \mapsto |\theta\rangle\left(\theta\,|0\rangle + \sqrt{1-|\theta|^2}\,|1\rangle\right)$$

- $(s, n+1, 0)$-block-encoding

阅读

阅读：

- LL: Chapter 6