

科学计算中的量子算法：量子数值线性代数基础 1

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

- ▶ 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

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

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

- ▶ $\{|k\rangle\}_{k=0}^{2^n-1}$ 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

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

复杂度: $\mathcal{O}(n)$

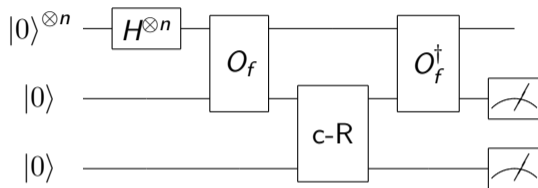
态制备：已知函数

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



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

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

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

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

- ▶ 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:

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

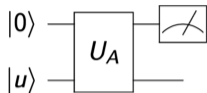
$$U_A \approx \begin{pmatrix} \langle 0| & \langle 1| \\ \frac{1}{\alpha} A & * \\ * & * \end{pmatrix} \begin{matrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{matrix}$$

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: $(\|A |u\rangle\|/\alpha)^2$

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

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

$$O_r : |i\rangle |l\rangle \mapsto |i\rangle |r(i, l)\rangle$$

$$O_c : |l\rangle |j\rangle \mapsto |c(j, l)\rangle |j\rangle$$

$$O_A : |i\rangle |j\rangle |0\rangle \mapsto |i\rangle |j\rangle |A_{ij}\rangle$$

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

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

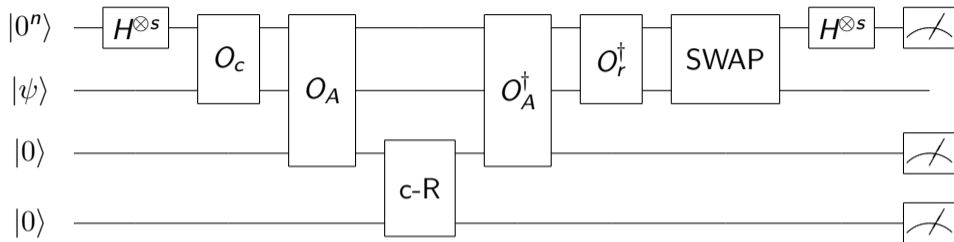
其中 $|\psi_i\rangle, |\phi_j\rangle$ 是两组 $(n + a)$ 比特量子态

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