

科学计算中的量子算法：厄米矩阵函数

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

- ▶ Chebyshev 多项式
- ▶ 量子比特化 (Qubitization)
- ▶ 量子信号处理 (QSP)

厄米矩阵函数

$$A = A^\dagger, \quad A = V\Lambda V^\dagger = \sum \lambda_j |v_j\rangle \langle v_j|$$

厄米矩阵函数通过特征值变换来定义：

$$A = V \operatorname{diag}(\lambda_j) V^\dagger \quad \rightarrow \quad f(A) = V \operatorname{diag}(f(\lambda_j)) V^\dagger$$

例子：

- ▶ Chebyshev 多项式
- ▶ 线性方程组: $f(x) = \frac{1}{x}$
- ▶ 哈密顿量模拟: $f(x) = e^{-ixt}$
- ▶

厄米矩阵函数：主要结果

Theorem

设 A 是一个厄米矩阵，满足 $\|A\| \leq 1$ ， U_A 是 A 的一个 $(1, a, 0)$ -block-encoding, $p(x)$ 是一个实系数多项式，满足

1. $\deg(p(x)) = d$,
2. $|p(x)| \leq 1, \quad \forall x \in [-1, 1]$.

那么，存在一个量子算法，可以构造矩阵函数 $p(A)$ 的一个 $(1, a + 1, 0)$ -block-encoding, 同时该算法关于 U_A 的访问复杂度为

$$\mathcal{O}(d).$$

Toy example: 一维 Chebyshev 多项式

Chebyshev 多项式:

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x),$$

$$T_k(\cos \theta) = \cos(k\theta)$$

- ▶ 正交性 (带 $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 权重)
- ▶ 近似最优的 minimax 逼近

Toy example: 一维 Chebyshev 多项式

考虑二维酉矩阵 (记 $\theta = \arccos \lambda$)

$$O = \begin{pmatrix} \lambda & -\sqrt{1-\lambda^2} \\ \sqrt{1-\lambda^2} & \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

$$O^k = \begin{pmatrix} \cos(k\theta) & -\sin(k\theta) \\ \sin(k\theta) & \cos(k\theta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_k(\lambda) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

► $T_k(\lambda)$ 的一个 $(1, 1, 0)$ -block-encoding

矩阵情形 $T_k(A)$: 对于每一个特征值, 找到对应的二维不变子空间

量子比特化 (Qubitization)

假设 U_A 是厄米矩阵 A 的厄米 block-encoding ($U_A = U_A^\dagger$).

$$U_A |0\rangle |v_j\rangle = |0\rangle A |v_j\rangle + * = \lambda_j |0\rangle |v_j\rangle + \sqrt{1 - \lambda_j^2} |\perp_j\rangle$$

► $\Pi |\perp_j\rangle = 0$, $\Pi = |0\rangle \langle 0| \otimes I$

再作用一次 U_A :

$$U_A^2 |0\rangle |v_j\rangle = \lambda_j(\lambda_j |0\rangle |v_j\rangle + \sqrt{1 - \lambda_j^2} |\perp_j\rangle) + U_A \sqrt{1 - \lambda_j^2} |\perp_j\rangle$$

$$U_A |\perp_j\rangle = \sqrt{1 - \lambda_j^2} |0\rangle |v_j\rangle - \lambda_j |\perp_j\rangle.$$

不变子空间: $\mathcal{H}_j = \text{span} \{ |0\rangle |v_j\rangle, |\perp_j\rangle \}$.

$$[U_A]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1 - \lambda_j^2} \\ \sqrt{1 - \lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}, \quad [\Pi]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

量子比特化 (Qubitization)

$$[U_A]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1 - \lambda_j^2} \\ \sqrt{1 - \lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}, \quad [\Pi]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

记

$$Z_{\Pi} = 2\Pi - 1, \quad [Z_{\Pi}]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

考虑

$$O = U_A Z_{\Pi}, \quad [O]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & -\sqrt{1 - \lambda_j^2} \\ \sqrt{1 - \lambda_j^2} & \lambda_j \end{pmatrix},$$

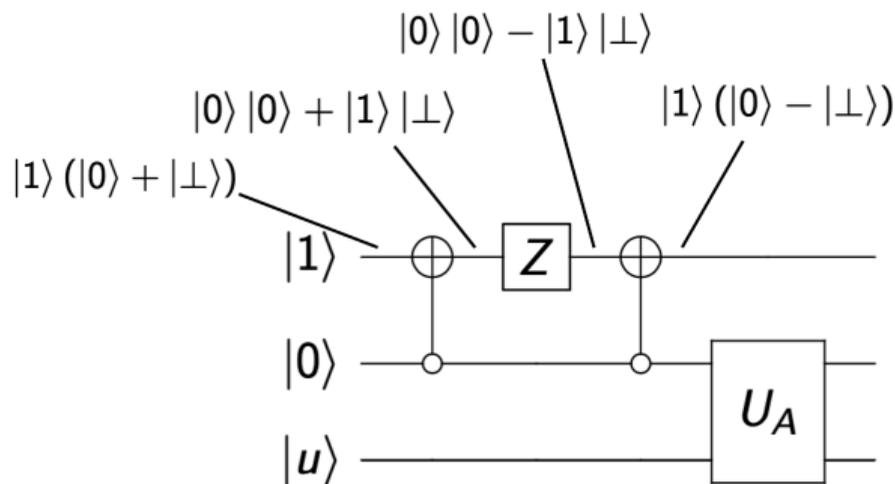
那么

$$[O^k]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} T_k(\lambda_j) & * \\ * & * \end{pmatrix}, \quad O^k = \begin{pmatrix} T_k(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

量子比特化 (Qubitization): 量子线路

$$U_A = \begin{pmatrix} A & * \\ * & * \end{pmatrix}, \quad U_A = U_A^\dagger, \quad \Pi = |0\rangle\langle 0| \otimes I, \quad Z_\Pi = 2\Pi - 1$$

$$(U_A Z_\Pi)^k = \begin{pmatrix} T_k(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$



量子比特化 (Qubitization)

现在考虑一般的非厄米 U_A (但 A 仍是厄米)

$$U_A |0\rangle |v_j\rangle = \lambda_j |0\rangle |v_j\rangle + \sqrt{1 - \lambda_j^2} |\perp_j'\rangle$$

► $\Pi |\perp_j'\rangle = 0$, $\Pi = |0\rangle\langle 0| \otimes I$.

注意到 A 是厄米的:

$$U_A^\dagger = \begin{pmatrix} A & * \\ * & * \end{pmatrix}, \quad U_A^\dagger |0\rangle |v_j\rangle = \lambda_j |0\rangle |v_j\rangle + \sqrt{1 - \lambda_j^2} |\perp_j\rangle$$

► $\Pi |\perp_j\rangle = 0$

再作用一次 U_A :

$$\begin{aligned} |0\rangle |v_j\rangle &= \lambda_j(\lambda_j |0\rangle |v_j\rangle + \sqrt{1 - \lambda_j^2} |\perp_j'\rangle) + \sqrt{1 - \lambda_j^2} U_A |\perp_j\rangle \\ U_A |\perp_j\rangle &= \sqrt{1 - \lambda_j^2} |0\rangle |v_j\rangle - \lambda_j |\perp_j'\rangle \end{aligned}$$

量子比特化 (Qubitization)

$$U_A |0\rangle |v_j\rangle = \lambda_j |0\rangle |v_j\rangle + \sqrt{1 - \lambda_j^2} |\perp_j'\rangle$$

$$U_A |\perp_j\rangle = \sqrt{1 - \lambda_j^2} |0\rangle |v_j\rangle - \lambda_j |\perp_j'\rangle$$

▶ $U_A: \mathcal{H}_j = \text{span} \{ |0\rangle |v_j\rangle, |\perp_j\rangle \} \mapsto \mathcal{H}'_j = \text{span} \{ |0\rangle |v_j\rangle, |\perp_j'\rangle \}$

▶ $U_A^\dagger: \mathcal{H}'_j \mapsto \mathcal{H}_j$

$$[U_A]_{\mathcal{H}_j \rightarrow \mathcal{H}'_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1 - \lambda_j^2} \\ \sqrt{1 - \lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}, \quad [U_A^\dagger]_{\mathcal{H}'_j \rightarrow \mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1 - \lambda_j^2} \\ \sqrt{1 - \lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}$$

对于投影矩阵 $\Pi = |0\rangle \langle 0| \otimes I$, $Z_\Pi = 2\Pi - 1$,

$$[Z_\Pi]_{\mathcal{H}_j} = [Z_\Pi]_{\mathcal{H}'_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

量子比特化 (Qubitization)

$$\mathcal{H}_j = \text{span} \{ |0\rangle |v_j\rangle, |\perp_j\rangle \}, \quad \mathcal{H}'_j = \text{span} \{ |0\rangle |v'_j\rangle, |\perp'_j\rangle \},$$

$$[U_A]_{\mathcal{H}_j \rightarrow \mathcal{H}'_j} = [U_A^\dagger]_{\mathcal{H}'_j \rightarrow \mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1 - \lambda_j^2} \\ \sqrt{1 - \lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}, \quad [Z_\Pi]_{\mathcal{H}_j} = [Z_\Pi]_{\mathcal{H}'_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

考虑两步运算的复合，交替作用 U_A 和 U_A^\dagger ：

$$[U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & -\sqrt{1 - \lambda_j^2} \\ \sqrt{1 - \lambda_j^2} & \lambda_j \end{pmatrix}^2, \quad [(U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi)^k]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} T_{2k}(\lambda_j) & * \\ * & * \end{pmatrix}.$$

结论： $(U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi)^k$ 给出了 $T_{2k}(A)$ 的一个 $(1, a + 1, 0)$ -block-encoding

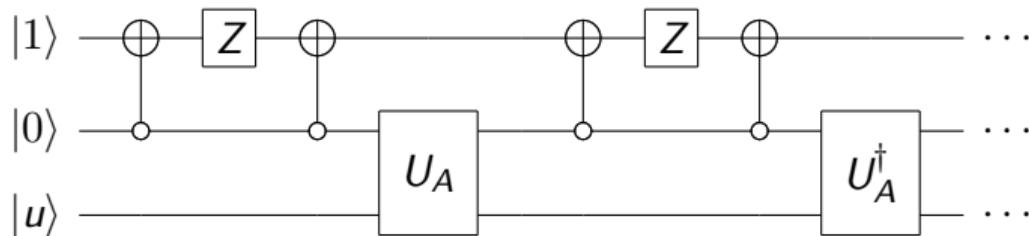
量子比特化 (Qubitization)

对于奇次 Chebyshev 多项式, 注意到 \mathcal{H}_j 和 \mathcal{H}'_j 中都包含 $|0\rangle |v_j\rangle$:

$$[U_A Z_\Pi (U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi)^k]_{\mathcal{H}_j \rightarrow \mathcal{H}'_j} = \begin{pmatrix} T_{2k+1}(\lambda_j) & * \\ * & * \end{pmatrix},$$
$$U_A Z_\Pi (U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi)^k = \begin{pmatrix} T_{2k+1}(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

量子比特化 (Qubitization): 量子线路

$$(U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi)^k$$



基于 Chebyshev 和 LCU 的矩阵函数算法

对于一般的函数

$$f(A) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j T_j(A)$$

算法:

- ▶ 每个 $T_j(A)$: qubitization
- ▶ 线性组合: LCU

缺点: 额外的辅助量子比特 $\mathcal{O}(\log J)$ 和复杂控制操作

量子信号处理 (Quantum signal processing, QSP)

回到二维矩阵的情形:

$$U(x) = \begin{pmatrix} x & \sqrt{1-x^2} \\ \sqrt{1-x^2} & -x \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad O(x) = U(x)Z$$

我们已经证明了

$$O(x)^k = \begin{pmatrix} T_k(x) & * \\ * & * \end{pmatrix}.$$

考虑

$$U_{\Phi}(x) = e^{i\phi_0 Z} O(x) e^{i\phi_1 Z} O(x) e^{i\phi_2 Z} \dots O(x) e^{i\phi_{d-1} Z} O(x) e^{i\phi_d Z} = e^{i\phi_0 Z} \prod_{j=1}^d \left[O(x) e^{i\phi_j Z} \right]$$

其中 $\Phi = (\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_d) \in \mathbb{R}^{d+1}$ (称为相位参数, phase factors)

量子信号处理 (QSP): 复系数多项式

Theorem (QSP)

记

$$O(x) = \begin{pmatrix} x & -\sqrt{1-x^2} \\ \sqrt{1-x^2} & x \end{pmatrix}.$$

那么, 存在一组相位参数 $(\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_d) \in \mathbb{R}^{d+1}$ 使得

$$U_{\Phi}(x) = e^{i\phi_0 Z} \prod_{j=1}^d \left[O(x) e^{i\phi_j Z} \right] = \begin{pmatrix} P(x) & -Q(x)\sqrt{1-x^2} \\ Q^*(x)\sqrt{1-x^2} & P^*(x) \end{pmatrix}$$

当且仅当 $P(x), Q(x)$ 是两个满足以下条件的复系数多项式:

1. $\deg(P) \leq d, \deg(Q) \leq d-1$, (约定 $\deg(Q) = -1$ 即指 $Q = 0$)
2. P 有 $d \bmod 2$ parity, Q 有 $d-1 \bmod 2$ parity,
3. $|P(x)|^2 + (1-x^2)|Q(x)|^2 = 1, \forall x \in [-1, 1]$.

量子信号处理 (QSP): 复系数多项式

$$U_{\Phi}(x) = e^{i\phi_0 Z} \prod_{j=1}^d \left[U(x) Z e^{i\phi_j Z} \right] = \begin{pmatrix} P(x) & -Q(x)\sqrt{1-x^2} \\ Q^*(x)\sqrt{1-x^2} & P^*(x) \end{pmatrix}$$

利用 $Z e^{i\phi Z} = (-i) e^{i(\phi+\pi/2)Z} = i e^{i(\phi-\pi/2)Z}$, 可通过修改相位来合并 Z_{Π} 和 $e^{i\phi Z_{\Pi}}$

- ▶ d 为偶数, 则 $\tilde{\phi}_j = \phi_j + (-1)^j \pi/2, j \neq 0, \tilde{\phi}_0 = \phi_0$
- ▶ d 为奇数, 则 $\tilde{\phi}_j = \phi_j + (-1)^j \pi/2, j \neq 0$, 会多出一个 Z , 但不影响输出的左上角

$$e^{i\tilde{\phi}_0 Z} \prod_{j=1}^d \left[U(x) e^{i\tilde{\phi}_j Z} \right] = \begin{pmatrix} P(x) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

复系数多项式：Qubitization

考虑厄米矩阵 A 和满足条件的多项式 $P(x)$ ，根据 qubitization,

▶ d 为偶数:

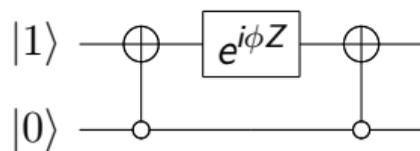
$$e^{i\tilde{\phi}_0 Z_{\Pi}} \prod_{j=1}^{d/2} \left[U_A^{\dagger} e^{i\tilde{\phi}_{2j-1} Z_{\Pi}} U_A e^{i\tilde{\phi}_{2j} Z_{\Pi}} \right] = \begin{pmatrix} P(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

▶ d 为奇数:

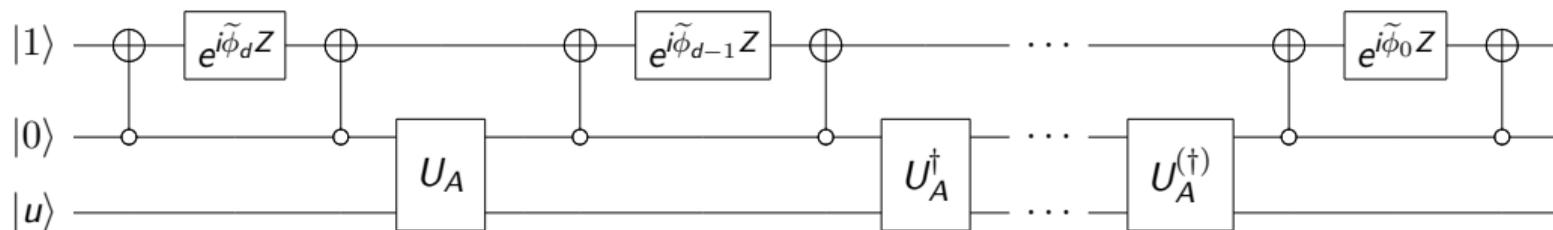
$$e^{i\tilde{\phi}_0 Z_{\Pi}} U_A e^{i\tilde{\phi}_1 Z_{\Pi}} \prod_{j=1}^{(d-1)/2} \left[U_A^{\dagger} e^{i\tilde{\phi}_{2j} Z_{\Pi}} U_A e^{i\tilde{\phi}_{2j+1} Z_{\Pi}} \right] = \begin{pmatrix} P(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

复系数多项式：量子线路

$e^{i\phi Z_{\Pi}}$ 的实现: $\Pi = |0\rangle\langle 0| \otimes I$, $Z_{\Pi} = 2\Pi - I$



算法:



- ▶ 输出 $P(A)$ 的 $(1, a + 1, 0)$ -block-encoding
- ▶ 访问复杂度: $d + 1$

复系数多项式

两个限制:

- ▶ 需要存在多项式 Q 使得 $|P|^2 + (1 - x^2)|Q|^2 = 1$
- ▶ 需要满足 parity (奇偶性) 假设

量子信号处理 (QSP): 实系数多项式

Theorem (实系数多项式 QSP)

记

$$O(x) = \begin{pmatrix} x & -\sqrt{1-x^2} \\ \sqrt{1-x^2} & x \end{pmatrix}.$$

给定一个实系数多项式 $p(x)$, 满足

1. $\deg(p) = d$,
2. p 有 $d \bmod 2$ parity,
3. $|p(x)| \leq 1, \forall x \in [-1, 1]$.

那么, 存在两个复系数多项式 $P(x), Q(x)$ 和相位参数 $(\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_d) \in \mathbb{R}^{d+1}$, 使得

$$U_{\Phi}(x) = e^{i\phi_0 Z} \prod_{j=1}^d \left[O(x) e^{i\phi_j Z} \right] = \begin{pmatrix} P(x) & -Q(x)\sqrt{1-x^2} \\ Q^*(x)\sqrt{1-x^2} & P^*(x) \end{pmatrix}$$

且 $\operatorname{Re}(P(x)) = p(x)$.

实系数多项式

考虑厄米矩阵 A 和 d 次实系数多项式 $p(x)$, 根据 qubitization (简单起见这里我们仅讨论 d 为偶数):

$$e^{i\tilde{\phi}_0 Z_{\Pi}} \prod_{j=1}^{d/2} \left[U_A^{\dagger} e^{i\tilde{\phi}_{2j-1} Z_{\Pi}} U_A e^{i\tilde{\phi}_{2j} Z_{\Pi}} \right] = \begin{pmatrix} P(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

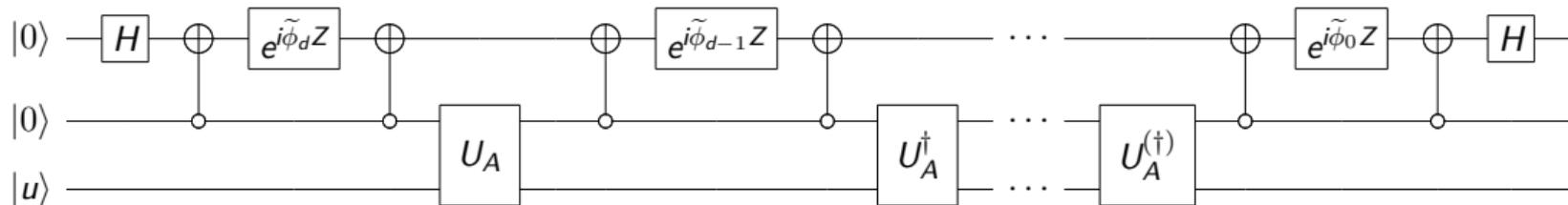
$$e^{-i\tilde{\phi}_0 Z_{\Pi}} \prod_{j=1}^{d/2} \left[U_A^{\dagger} e^{-i\tilde{\phi}_{2j-1} Z_{\Pi}} U_A e^{-i\tilde{\phi}_{2j} Z_{\Pi}} \right] = \begin{pmatrix} P^*(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

实系数多项式：量子线路

$e^{\pm i\phi Z_{\Pi}}$ 的实现: $\Pi = |0\rangle\langle 0| \otimes I$, $Z_{\Pi} = 2\Pi - I$



算法:



- ▶ 输出 $p(A)$ 的 $(1, a+1, 0)$ -block-encoding
- ▶ 访问复杂度: $d+1$

矩阵函数的量子算法

对于一般的 d 次复系数多项式 $f(x)$ (只要求 $|f(x)| \leq 1$):

1. 将其分解为实部和虚部: $f(x) = f_{\text{real}}(x) + f_{\text{imag}}(x)$
2. 将实部和虚部进一步按奇偶性分解:

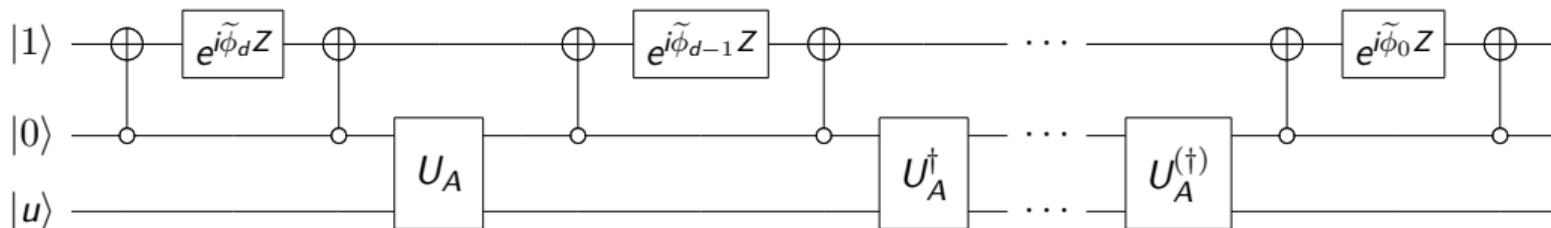
$$f(x) = f_{\text{real,even}}(x) + f_{\text{real,odd}}(x) + f_{\text{imag,even}}(x) + f_{\text{imag,odd}}(x)$$

3. 用实系数多项式版本的 QSP+qubitization 分别实现 $f_{\text{real,even}}$, $f_{\text{real,odd}}$, $f_{\text{imag,even}}$, $f_{\text{imag,odd}}$
4. 用 LCU 组合起来, 实现 $f(x)$ 的 $(1, a+3, 0)$ -block-encoding

对于一般的函数 $f(x)$: 先构造多项式逼近

小结

d 次矩阵多项式可由 QSP+qubitization 实现，访问复杂度为 $\mathcal{O}(d)$



拓展:

- ▶ 相位参数的求解
- ▶ 其他形式的“类 QSP”

阅读

阅读:

- ▶ LL: Chapter 7