科学计算中的量子算法：量子奇异值变换

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

- 矩阵函数
- 量子奇异值变换（QSVT）
- QSVT 应用

矩阵函数

厄米矩阵：$A = V\Lambda V^\dagger$

$$f(A) = Vf(\Lambda)V^\dagger$$

一般矩阵：

- 特征值变换：
  - 假设 $A = P\Lambda P^{-1}$

$$f(A) = Pf(\Lambda)P^{-1}$$

  - 围道积分：

$$f(A) = \frac{1}{2\pi i}\oint_C f(z)(zI - A)^{-1}dz$$

- 奇异值变换（与矩阵多项式定义不相容）

奇异值变换

$$A = W\Sigma V^\dagger, \quad Av_j = \sigma_j w_j, \quad A^\dagger w_j = \sigma_j v_j$$

定义：记 $f(\Sigma) = \mathrm{diag}(f(\sigma_0), f(\sigma_1), \cdots, f(\sigma_{N-1}))$,

$$f^\diamond(A) = Wf(\Sigma)V^\dagger$$
$$f^\triangleleft(A) = Wf(\Sigma)W^\dagger$$
$$f^\triangleright(A) = Vf(\Sigma)V^\dagger$$

$$f^{\mathrm{SVT}}(A) = \begin{cases} f^\diamond(A), & f\text{ 是奇函数} \\ f^\triangleright(A), & f\text{ 是偶函数} \end{cases}$$

量子比特化（Qubitization）

考虑 A 的一个 $(1, a, 0)$-block-encoding U_A：

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

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

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

- $\Pi |\perp_j\rangle = 0$

再作用一次 U_A：

$$|0\rangle |w_j\rangle = \sigma_j(\sigma_j |0\rangle |w_j\rangle + \sqrt{1-\sigma_j^2} |\perp_j'\rangle) + \sqrt{1-\sigma_j^2} U_A |\perp_j\rangle$$

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

量子比特化（Qubitization）

- U_A: $\mathcal{H}_j = \text{span}\{|0\rangle|v_j\rangle, |\perp_j\rangle\} \quad \mapsto \quad \mathcal{H}'_j = \text{span}\left\{|0\rangle|w_j\rangle, |\perp'_j\rangle\right\}$
- $U_A^\dagger$: $\mathcal{H}'_j \quad \mapsto \quad \mathcal{H}_j$

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

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

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

$$[U_A Z_\Pi]_{\mathcal{H}_j\to\mathcal{H}'_j} = [U_A^\dagger Z_\Pi]_{\mathcal{H}'_j\to\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \sigma_j & -\sqrt{1-\sigma_j^2} \\ \sqrt{1-\sigma_j^2} & \sigma_j \end{pmatrix}$$

量子奇异值变换（Quantum singular value transformation，QSVT）

考虑满足 QSP 条件的多项式 $P(x)$，根据 QSP+qubitization,

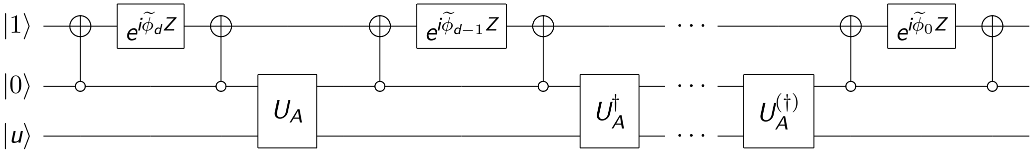
- d 为偶数：

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

- d 为奇数：

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

QSVT：量子线路



- 输出 $P^{\mathrm{SVT}}(A)$ 的 $(1, a+1, 0)$-block-encoding
- 访问复杂度：$d+1$
- 与厄米矩阵函数情形类似，可以考虑实系数多项式以及一般的不具备奇偶性的多项式的 SVT

QSVT 应用

- 哈密顿量模拟： e^{-iHT}
- 虚时演化： e^{-HT}
- 线性方程组问题： A^{-1}
- 特征向量问题
- 振幅放大
- ……

阅读

阅读：

- LL: Chapter 8.1-8.3