科学计算中的量子算法：微分方程的量子算法

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

大纲

- 线性微分方程：线性方程组法，LCHS
- 非线性微分方程：Carleman 线性化

量子线性微分方程问题

$$\begin{aligned}\frac{du(t)}{dt} &= Au(t) + b, \quad t \in [0, T], \\ u(0) &= |u_0\rangle\end{aligned}$$

输入：N 维方阵 A 的一个 $(\alpha, a, 0)$-block-encoding，N 维向量 b 的一个态制备 oracle

稳定性假设：

- A 的特征值的实部非正
- A 的实部的特征值非正

目标：制备一个量子态近似 $|u(T)\rangle = u(T)/\|u(T)\|$

参数：维数 N，误差 ϵ，时间 T

尝试：time-marching/time-stepping

考虑对于齐次方程的向前 Euler：

$$\frac{u_{k+1} - u_k}{h} = A u_k$$

- 时间步数 M，时间步长 $h = T/M$，$u_k \approx u(kh)$

$$u_{k+1} = (I + hA)u_k, \quad u_M = (I + hA)^M u_0$$

问题：$(I + hA)$ 的 block-encoding factor（如果用 LCU）至少是 $1 + h$，每步都会有概率失败，最终成功概率是指数小的

基于线性方程组的算法

$$
\begin{aligned}
\frac{du(t)}{dt} &= Au(t) + b, \quad t \in [0, T], \\
u(0) &= |u_0\rangle
\end{aligned}
$$

思路:

1. 时间离散，转化为扩大的线性方程组问题
2. 应用量子线性方程组算法
3. 后处理

量子向前 Euler 法

$$\frac{u_{k+1} - u_k}{h} = Au_k + b$$

- 时间步数 M，时间步长 $h = T/M$，$u_k \approx u(kh)$

线性方程组：

$$\begin{pmatrix} I & & & & \\ -(I+hA) & I & & & \\ & -(I+hA) & I & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -(I+hA) & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0 \\ hb \\ hb \\ \vdots \\ hb \end{pmatrix}$$

- 应用量子线性方程组算法（如 LCU 或 QSVT），得到 $[u_0; u_1; \cdots; u_M] = \sum_{m=0}^{M} |m\rangle \, \|u_m\| \, |u_m\rangle$
- 测量 $|m\rangle$ 希望得到 M，但概率很小

量子向前 Euler 法

Padding：添加平凡方程以复制多份 u_M

$$\begin{pmatrix} I & & & & & & & \\ -(I+hA) & I & & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & -(I+hA) & I & & & & \\ & & & -I & I & & & \\ & & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & -I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_M \\ u_M \\ \vdots \\ u_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0 \\ hb \\ \vdots \\ hb \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

- M 份复制，成功概率 $\sim (\|u_M\| / \max \|u_m\|)^2$

量子向前 Euler 法

扩展矩阵和向量的构造:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{A} &= \sum_{j=0}^{2M-1} |j\rangle\langle j| \otimes I - \sum_{j=0}^{M-1} |j+1\rangle\langle j| \otimes (I + hA) - \sum_{j=M}^{2M-2} |j+1\rangle\langle j| \otimes I \\
&= (I - \mathrm{ADD}) \otimes I - h(\mathrm{ADD} \otimes I) \sum_{j=0}^{M-1} |j\rangle\langle j| \otimes A
\end{aligned}
$$

- 仅需访问一次 A
- $\alpha_{\mathcal{A}} = 2 + \alpha h$

$$
\mathbf{b} = \|u_0\| \, |0\rangle \otimes |u_0\rangle + h\|b\| \sum_{j=1}^{M} |j\rangle \otimes |b\rangle
$$

量子向前 Euler 法：复杂度分析

$$\begin{pmatrix} I & & & & & & \\ -(I+hA) & I & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & \\ & & -(I+hA) & I & & & \\ & & & -I & I & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & -I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_M \\ u_M \\ \vdots \\ u_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0 \\ hb \\ \vdots \\ hb \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

采用 LCU 求解线性方程组：访问复杂度 $\mathcal{O}(\kappa_{\mathcal{A}}^2 \operatorname{poly}\log(\kappa_{\mathcal{A}}/\epsilon_{\mathsf{QLSP}}))$

- 为了方便起见，我们假设线性方程组的求解没有误差（因为可以取 ϵ_{QLSP} 非常小而只带来 poly $\log$ 级别的额外复杂度）
- 需要分析 $\kappa_{\mathcal{A}} = \|\mathcal{A}\|\|\mathcal{A}^{-1}\|$

量子向前 Euler 法：复杂度分析

Lemma

设 $\mathcal{C}$ 是一个分块矩阵

$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} C_{00} & C_{01} & \cdots & C_{0,p-1} \\ C_{10} & C_{11} & \cdots & C_{1,p-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{p-1,0} & C_{p-1,1} & \cdots & C_{p-1,p-1} \end{pmatrix},$$

那么

$$\|\mathcal{C}\| \leq \sqrt{\left(\max_i \sum_{k=0}^{p-1} \|C_{i,k}\|\right)\left(\max_j \sum_{k=0}^{p-1} \|C_{k,j}\|\right)}$$

量子向前 Euler 法：复杂度分析

取 $h\alpha \leq 1$：

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} I & & & & & & \\ -(I+hA) & I & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & \\ & & -(I+hA) & I & & & \\ & & & -I & I & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & -I & I \end{pmatrix}, \quad \|\mathcal{A}\| \leq \mathcal{O}(1)$$

量子向前 Euler 法：复杂度分析

取 $h\alpha \le 1$，记 $B = I + hA$：

$$
\mathcal{A}^{-1} = \begin{pmatrix}
I & & & & & & & \\
B & I & & & & & & \\
B^2 & B & I & & & & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & & & \\
B^{M-1} & B^{M-2} & \cdots & B & I & & & \\
B^{M-1} & B^{M-2} & \cdots & B & I & I & & \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\
B^{M-1} & B^{M-2} & \cdots & B & I & \cdots & I & I
\end{pmatrix},
$$

$$
\|B^j\| = \|(I + hA)^j\| = \mathcal{O}(1 + \max_t \|e^{At}\|), \quad \|\mathcal{A}^{-1}\| \le \mathcal{O}(M(1 + \max_t \|e^{At}\|))
$$

- 稳定性假设下，有 $\|\mathcal{A}^{-1}\| \le \mathcal{O}(M)$

量子向前 Euler 法：复杂度分析

$$\|\mathcal{A}\| = \mathcal{O}(1), \quad \|\mathcal{A}^{-1}\| = \mathcal{O}(M)$$

稳定性假设下（同时 $h\alpha \le 1$），全局误差 $\|u_M - u(T)\| \le \mathcal{O}(Mh^2 \max_t \|u^{(2)}(t)\|)$，可取 $M = \mathcal{O}((\max_t \|u^{(2)}(t)\| / \|u(t)\|) T^2/\epsilon)$

$$\kappa_{\mathcal{A}} = \mathcal{O}\left(\frac{\max_t \|u^{(2)}(t)\|}{\|u(t)\|} \frac{T^2}{\epsilon} \right)$$

总访问复杂度：

$$\widetilde{\mathcal{O}}\left(\frac{\max_t \|u(t)\|}{\|u(T)\|} \frac{\max_t \|u^{(2)}(t)\|^2}{\|u(t)\|^2} \frac{T^4}{\epsilon^2} \right)$$

小结

$$\frac{du(t)}{dt} = Au(t) + b, \quad t \in [0, T],$$
$$u(0) = |u_0\rangle$$

算法：

1. 时间离散 +padding，转化为扩大的线性方程组问题
2. 应用量子线性方程组算法
3. 后处理

拓展：可以得到更好的访问复杂度，如果：

- 更好的数值离散 + 更好的量子线性方程组算法
- 更强的稳定性假设

量子线性微分方程问题

$$\frac{du(t)}{dt} = -Au(t) + b, \quad t \in [0, T],$$
$$u(0) = |u_0\rangle$$

输入：N 维方阵 A 的一个 $(\alpha, a, 0)$-block-encoding，N 维向量 b 的一个态制备 oracle

稳定性假设：

- A 的特征值的实部非负
- A 的实部的特征值非负：

$$A = L + iH, \quad L = \frac{A + A^\dagger}{2}, \quad H = \frac{A - A^\dagger}{2i}, \quad L \succeq 0$$

目标：制备一个量子态近似 $|u(T)\rangle = u(T)/\|u(T)\|$

参数：维数 N，误差 ϵ，时间 T

Duhamel 原理

$$
\begin{aligned}
\frac{du(t)}{dt} &= -Au(t) + b, \quad t \in [0, T], \\
u(0) &= |u_0\rangle
\end{aligned}
$$

$$
u(T) = e^{-AT}|u_0\rangle + \int_0^T e^{-A(T-s)} b \, ds
$$

- 考虑构造 $e^{-AT} = e^{-(L+iH)T}$ 的 block-encoding

哈密顿量模拟的线性组合（LCHS）

Theorem

设 $A = L + iH$，$L \succeq 0$，那么

$$e^{-At} = \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1 - ik} e^{-i(kL+H)t} dk.$$

其中 $f(z)$（$z \in \mathbb{C}$）满足

1. （解析性）$f(z)$ 在下半平面 $\{z : Im(z) < 0\}$ 解析，在边界 $\{z : Im(z) \leq 0\}$ 连续，
2. （衰减性）存在 $\alpha > 0, C > 0$，使得当 $Im(z) \leq 0$ 时，有 $|z|^{\alpha}|f(z)| \leq C$，
3. （归一化）$\int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik} dk = 1$.

LCHS：证明

$$O_L(t) := e^{-(L+iH)t} = \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik} e^{-i(kL+H)t} dk =: O_R(t).$$

思路: 证明 O_L 和 O_R 满足同一个 ODE

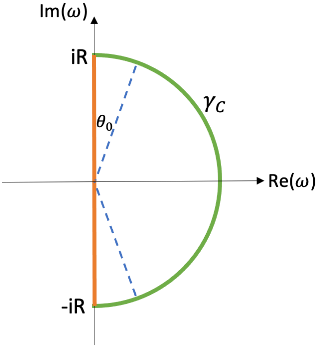
$$\begin{aligned}
\frac{dO_L}{dt} &= -(L+iH)O_L(t), \\
\frac{dO_R}{dt} &= -(L+iH)O_R(t) + L\int_{\mathbb{R}} f(k) e^{-i(kL+H)t} dk.
\end{aligned}$$

只需证明:

$$\int_{\mathbb{R}} f(k) e^{-i(kL+H)t} dk = 0.$$

LCHS：证明

$$
\begin{aligned}
&\int_{-R}^{R} f(k) e^{-i(kL+H)t} dk \\
&= -i \int_{-iR}^{iR} f(-i\omega) e^{-\omega L t - iHt} d\omega \\
&= -i \int_{\gamma_C} f(-i\omega) e^{-\omega L t - iHt} d\omega \\
&= -i \left(\int_{-\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}+\theta_0} + \int_{\frac{\pi}{2}-\theta_0}^{\frac{\pi}{2}} + \int_{-\frac{\pi}{2}+\theta_0}^{\frac{\pi}{2}-\theta_0} \right) \cdots d\theta
\end{aligned}
$$



假设 $L \succ 0$，选取 $\theta_0 \sim 1/R^{c(\alpha)}$，从而每一项积分都会趋向于 0（$R \to \infty$）

对于 $L \succeq 0$，可以通过取极限来证明

LCHS：算法与复杂度

$$e^{-At} = \int_{\mathbb{R}} \frac{f(k)}{1-ik} e^{-i(kL+H)t} dk \approx \int_{-K}^{K} \frac{f(k)}{1-ik} e^{-i(kL+H)t} dk \approx \sum_j c_j e^{-i(k_jL+H)t}$$

算法：哈密顿量模拟 +LCU

访问复杂度：若用 QSVT 实现哈密顿量模拟：$\mathcal{O}(KT + \log(1/\epsilon))$

- 若 $\frac{f(k)}{1-ik} = \frac{1}{\pi(1+k^2)}$：$K = \mathcal{O}(1/\epsilon)$
- 若 $f(k) = \frac{1}{Ce^{(1+ik)^\beta}}$ $\big(\beta \in (0,1)\big)$：$K = \mathcal{O}(\log^{1/\beta}(1/\epsilon))$

$\Longrightarrow$ **访问复杂度**：$\mathcal{O}(T \operatorname{poly} \log(T/\epsilon))$

非线性微分方程

$$\frac{du}{dt} = F_2 u^{\otimes 2} + F_1 u + F_0(t), \quad u(0) = u_0$$

- 思路：升维线性化

非线性微分方程：Carleman 线性化

一维的例子：

$$
\begin{aligned}
\frac{du}{dt} &= f_0 + f_1 u + f_2 u^2 \\
\frac{d(u^2)}{dt} &= 2f_0 u + 2f_1 u^2 + 2f_2 u^3 \\
\frac{d(u^3)}{dt} &= 3f_0 u^2 + 3f_1 u^3 + 3f_2 u^4 \\
&\vdots \\
\frac{d(u^m)}{dt} &= mf_0 u^{m-1} + mf_1 u^m + mf_2 u^{m+1} \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

- 关于 $[u; u^2; u^3; \cdots; u^m; \cdots]$ 的无穷维线性 ODE
- 若 $mf_2 u^{m+1}$ 很小，可在第 m 行截断，并忽略掉 $mf_2 u^{m+1}$ 项

非线性微分方程：Carleman 线性化

$$
\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{m-1} \\ v_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 & f_2 & & & & \\ 2f_0 & 2f_1 & 2f_2 & & & \\ & 3f_0 & 3f_1 & 3f_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & (m-1)f_0 & (m-1)f_1 & (m-1)f_2 \\ & & & & mf_0 & mf_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{m-1} \\ v_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}
$$

- 一定条件下，$v_1(t) \approx u(t)$

非线性微分方程：Carleman 线性化

$$\frac{du}{dt} = F_2 u^{\otimes 2} + F_1 u + F_0(t), \quad u(0) = u_0$$

Carleman 线性化后：

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{m-1} \\ v_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1^1 & A_2^1 & & & & \\ A_1^2 & A_2^2 & A_3^2 & & & \\ & A_2^3 & A_3^3 & A_4^3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & A_{m-2}^{m-1} & A_{m-1}^{m-1} & A_m^{m-1} \\ & & & & A_{m-1}^m & A_m^m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{m-1} \\ v_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F_0(t) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} A_{j+1}^j &= F_2 \otimes I^{\otimes j-1} + I \otimes F_2 \otimes I^{\otimes j-2} + \cdots + I^{\otimes j-1} \otimes F_2 \\ A_j^j &= F_1 \otimes I^{\otimes j-1} + I \otimes F_1 \otimes I^{\otimes j-2} + \cdots + I^{\otimes j-1} \otimes F_1 \\ A_{j-1}^j &= F_0(t) \otimes I^{\otimes j-1} + I \otimes F_0(t) \otimes I^{\otimes j-2} + \cdots + I^{\otimes j-1} \otimes F_0(t) \end{aligned}$$

非线性微分方程：Carleman 线性化

$$
\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{m-1} \\ v_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1^1 & A_2^1 & & & & \\ A_1^2 & A_2^2 & A_3^2 & & & \\ & A_2^3 & A_3^3 & A_4^3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & A_{m-2}^{m-1} & A_{m-1}^{m-1} & A_m^{m-1} \\ & & & & A_{m-1}^m & A_m^m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_{m-1} \\ v_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F_0(t) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}
$$

- 一定条件下，我们期待 $v_1(t) \approx u(t)$
- 升维线性化：若原本的非线性 ODE 是 N 维，则新的线性化 ODE 维数 $\sim N^m$

非线性微分方程：Carleman 线性化

算法：

1. 利用 Carleman 线性化，构造更高维的线性化 ODE
2. 应用线性 ODE 的量子算法
3. 测量辅助量子比特，直到得到 v_1

非线性微分方程：Carleman 线性化

$$\frac{du}{dt} = F_2 u^{\otimes 2} + F_1 u + F_0(t), \quad u(0) = u_0$$

Carleman 线性化的收敛性：

- 常见条件：线性耗散 + 弱非线性

$$\mu(F_1) = \frac{1}{2}\lambda_{\max}(F_1 + F_1^\dagger) < 0, \quad R = \frac{1}{-\mu(F_1)}\left(\|F_2\|\|u_0\| + \frac{\max_t \|F_0(t)\|}{\|u_0\|}\right) < 1$$

  - 此时截断阶数 $m \sim \log(1/\epsilon)$
- 其他情形：线性保守/线性无噪声 + 弱非线性

阅读

阅读:

- LL： Chapter 4.5
- arXiv:2312.03916
- arXiv:2509.07155