# 科学计算中的量子算法：特征值问题的量子算法


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

- 特征向量过滤
- 绝热量子计算
  - 应用：线性方程组
- 变分量子算法

# 特征值问题

**假设**：

- $N$ 维厄米矩阵 $H$
- 最小特征值为单特征值（记为 $\lambda_0$），并且与其它特征值距离至少 $\Delta > 0$

**问题**：求 $\lambda_0$ 和/或其对应的特征向量

注：如果没有任何额外的假设，很可能不存在高效的通用量子算法解决所有特征值问题

**算法回顾**：相位估计（QPE）：酉矩阵，已知特征向量，求特征值

# 有引导的特征向量问题

设 $H$ 是一个厄米矩阵，满足

1. $\|H\| \leq 1$
2. 有一个单特征值为 $0$，其对应的特征向量记为 $|\psi_0\rangle$
3. 所有非 $0$ 特征值的绝对值至少为 $\Delta > 0$（被称为谱间隙）
4. 我们知道一个输入的量子态 $|\psi\rangle$ 满足 $|\langle\psi_0|\psi\rangle| = p_0 > 0$

**目标:** 求 $|\psi_0\rangle$

# 特征向量过滤（Eigenstate filtering）

**考虑一个偶函数** $f(x)$，**满足**

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x \in [-\Delta/2, \Delta/2], \\ 0, & x \in [-1, -\Delta] \cup [\Delta, 1] \end{cases}$$

$$f(H)\left|\psi\right\rangle = p_0 e^{i\theta}\left|\psi_0\right\rangle$$

**算法**：

1. 用 QSVT 实现 $f(H)$ 的 block-encoding
2. 将 $f(H)$ 作用在 $\left|\psi\right\rangle$ 上，并测量（结合振幅放大）

# 特征向量过滤（Eigenstate filtering）

Lemma

对于任意的 $\Delta, \epsilon \in (0, 1/2)$，存在一个次数为 $d = \mathcal{O}(\frac{1}{\Delta}\log(1/\epsilon))$ 的偶实多项式 $p(x)$，满足

$$\sup_{x\in[0,\Delta/2]} |p(x) - 1| \leq \epsilon, \quad \sup_{x\in[\Delta,1]} |p(x)| \leq \epsilon$$

**QSVT 复杂度**：$\mathcal{O}(\frac{1}{p_0\Delta}\log(1/\epsilon))$，**实现了最优复杂度**

# 绝热量子计算（Adiabatic quantum computing，AQC）

$$i\frac{d\,|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t/T)\,|\psi(t)\rangle\,, \quad t \in [0, T]$$
$$H(s) = (1-s)H_0 + sH_f, \quad s \in [0,1]$$

- $H_f$：目标矩阵，$H_0$：已知的初始矩阵

**假设：**

- $T$ 非常大
- 存在 $H(s)$ 的一条特征值路径 $\lambda_0(s)$，满足
  - $\lambda_0(1) = \lambda_0$ 为目标特征值
  - 谱间隙条件：$\lambda_0(s)$ 与 $H(s)$ 的其它特征值有至少 $\Delta(s) > 0$ 的距离

# 绝热量子计算（Adiabatic quantum computing，AQC）

$$i\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt} = H(t/T)\left|\psi(t)\right\rangle, \quad t \in [0, T]$$
$$H(s) = (1-s)H_0 + sH_f, \quad s \in [0, 1]$$

**绝热演化**：若初值 $|\psi(0)\rangle$ 为 $H_0$ 的 $\lambda_0(0)$ 对应的特征向量，则 $|\psi(T)\rangle$ 近似为 $H_f$ 的 $\lambda_0(1)$ 对应的特征向量

**算法**：制备对应的初始态 $|\psi(0)\rangle$，并应用含时哈密顿量模拟算法（例如乘积公式或截断 Dyson），特征值可用 Hadamard 测试估计

**特征向量复杂度**：$\mathcal{O}(T\log(T/\epsilon))$

- $T$ 的选取进一步依赖误差和谱间隙

# 量子绝热定理

**Theorem**

记 $|\phi\rangle$ 为 $H_f$ 对应 $\lambda_0$ 的特征值，那么存在一个常数 $C > 0$ 使得

$$\begin{aligned}&\| |\psi(T)\rangle \langle\psi(T)| - |\phi\rangle \langle\phi| \| \\ &\leq C\left\{ \frac{\|H'(0)\|}{T\Delta^2(0)} + \frac{\|H'(1)\|}{T\Delta^2(1)} + \frac{1}{T}\int_0^1 \left( \frac{\|H''(\tau)\|}{\Delta^2(\tau)} + \frac{\|H'(\tau)\|^2}{\Delta^3(\tau)} \right) d\tau \right\}.\end{aligned}$$

- 记 $\Delta_* = \min_{s\in[0,1]} \Delta(s)$，需要取

$$T \sim \frac{1}{\Delta_*^3 \epsilon}$$

# 应用：线性方程组

线性方程组 $Ax = b$，$\|A\| = 1$，暂时先假设 $A$ 厄米正定

$$H_0 = \begin{pmatrix} 0 & Q_b \\ Q_b & 0 \end{pmatrix}, \quad H_f = \begin{pmatrix} 0 & AQ_b \\ Q_bA & 0 \end{pmatrix}$$

$$Q_b = I - |b\rangle\langle b|$$

$$H(s) = (1 - f(s))H_0 + f(s)H_f$$

- 0 特征值对应特征向量 $[b;0]$ 和 $[x;0]$
- $\Delta(f(s)) \geq 1 - f(s) + f(s)/\kappa$，线性插值会导致 $T \sim \kappa^3/\epsilon$

**解决方案**：改变插值方法

# AQC：一般插值

$$i\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt}=H(t/T)\left|\psi(t)\right\rangle,\quad t\in[0,T]$$

$$H(s)=(1-f(s))H_0+f(s)H_f,\quad s\in[0,1]$$

- $f(s)$ 是一个插值函数，满足 $f(0)=0$，$f(1)=1$

**思路：选取 $f(s)$ 使得 $f'(s)$ 与 $\Delta(f(s))$ 正相关**

$$\begin{aligned}&\left\|\left|\psi(T)\right\rangle\left\langle\psi(T)\right|-\left|\phi\right\rangle\left\langle\phi\right|\right\|\\ \leq\ & C\left\{\frac{\|H'(0)\|}{T\Delta^2(0)}+\frac{\|H'(1)\|}{T\Delta^2(1)}+\frac{1}{T}\int_0^1\left(\frac{\|H''(\tau)\|}{\Delta^2(f(\tau))}+\frac{\|H'(\tau)\|^2}{\Delta^3(f(\tau))}\right)d\tau\right\}.\end{aligned}$$

# 应用: 线性方程组

$$\Delta(f(s)) \geq 1 - f(s) + f(s)/\kappa$$

选取 $f(s)$ 满足:

$$f'(s) = c\Delta(f(s))^p, \quad f(0) = 0, \quad c = \int_0^1 \Delta(u)^{-p} du, \quad 1 < p < 2$$

$$f(s) = \frac{\kappa}{\kappa - 1}\left[1 - \left(1 + s(\kappa^{p-1} - 1)\right)^{\frac{1}{1-p}}\right]$$

$$\implies T \sim \frac{\kappa}{\epsilon}$$

**总复杂度**: $\mathcal{O}(\frac{\kappa}{\epsilon} \log(\frac{\kappa}{\epsilon}))$

**改进方法**: AQC 做到常数精度 + 特征向量过滤

$$\widetilde{\mathcal{O}}(\kappa \log(1/\epsilon))$$

# 线性方程组复杂度总结

| 方法 | 复杂度 | |
|---|---|---|
| | $A$ | $b$ |
| HHL[arXiv:0811.3171] | $\mathcal{O}(\kappa^2/\epsilon)$ | $\mathcal{O}(\kappa)$ |
| LCU[arXiv:1511.02306] | $\mathcal{O}(\kappa^2 \text{ poly} \log(\kappa/\epsilon))$ | $\mathcal{O}(\kappa)$ |
| QSVT[arXiv:1804.01973] | $\mathcal{O}(\kappa^2 \log(\kappa/\epsilon))$ | $\mathcal{O}(\kappa)$ |
| AQC[arXiv:1909.05500] | $\mathcal{O}((\kappa/\epsilon)\log(\kappa/\epsilon))$ | $\mathcal{O}((\kappa/\epsilon)\log(\kappa/\epsilon))$ |
| dAQC+EF[arXiv:2111.08152] | $\mathcal{O}(\kappa\log(1/\epsilon))$ | $\mathcal{O}(\kappa\log(1/\epsilon))$ |
| KR[arXiv:2406.12086] | $\mathcal{O}(\kappa\log(1/\epsilon))$ | $\mathcal{O}(\kappa\log(1/\epsilon))$ |
| Tunable VTAA[arXiv:2410.18178] | $\mathcal{O}(\kappa\log(\kappa/\epsilon)\log(1/\epsilon))$ | $\mathcal{O}(\kappa)$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |
| 下界 | $\Omega(\kappa\log(1/\epsilon))$ | $\Omega(\kappa)$ |

# 变分量子算法（Variational quantum algorithm，VQA）

根据特征值定义，

$$\lambda_0 = \min_{|\psi\rangle} \langle\psi|H|\psi\rangle$$

**参数化量子线路：**

$$|\psi(\theta)\rangle = U_{p-1}(\theta_{p-1}) \cdots U_1(\theta_1) U_0(\theta_0) |\psi_0\rangle$$

考虑优化问题：

$$\min_{\theta} \langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle$$

**变分量子算法：** 量子估值 + 经典优化

1. 量子线路（例如 Hadamard 测试等）估计 $f(\theta) = \langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle$
2. 经典优化算法寻找最优的参数 $\theta$

# 例子：量子近似优化算法（QAOA）

$$\min_{\alpha,\beta} \langle \psi(\alpha,\beta)|H_1|\psi(\alpha,\beta)\rangle$$

$$|\psi(\alpha,\beta)\rangle = e^{-i\beta_{p-1}H_1} e^{-i\alpha_{p-1}H_0} \cdots e^{-i\beta_1 H_1} e^{-i\alpha_1 H_0} e^{-i\beta_0 H_1} e^{-i\alpha_0 H_0} |\psi_0\rangle$$

- $H_0$ 通常选取为一个简单的哈密顿量
- 可被视为 AQC+ 乘积公式的推广

# 变分量子算法

**优点**：

- 结构简单、灵活
- 可能适配近期量子设备

**缺点**：

- 优化问题较为困难（barren plateau）
- 缺少理论保证