HHL 算法详细求解过程

王心锐

2025 年 8 月 25 日

1 概述

HHL 算法用于求解线性方程组 $A\vec{x}=\vec{b}$，其中 A 为 $N_b\times N_b$ 厄米矩阵，$\vec{x}$ 和 $\vec{b}$ 为 N_b 维向量，其解可表示为 $\vec{x}=A^{-1}\vec{b}$，其中 $N_b=2^{n_b}$。该算法通过量子态的振幅编码和演化，实现了相比经典方法的指数级加速，是量子计算中解决线性系统问题的核心算法之一。

算法中向量 $\vec{b}$ 和 $\vec{x}$ 的 N_b 个分量通过振幅编码（amplitude encoding），由 n_b 个量子比特（构成 $\mathbb{C}^{N_b}$ 希尔伯特空间，记为 b-register ）进行编码，n_b 需足够大以完整编码 $\vec{b}$ 。矩阵 A 则通过哈密顿量编码（Hamiltonian encoding）模拟实现。

HHL 算法主要包含五大核心模块：状态制备（state preparation）、量子相位估计（quantum phase estimation, QPE）、辅助比特旋转（ancilla bit rotation）、逆量子相位估计（inverse quantum phase estimation, IQPE）及测量（measurement）。除 n_b 个用于编码 $\vec{b}$ 振幅及最终存储 $\vec{x}$ 结果振幅的量子比特外，算法还需 1 个辅助量子比特 $|\rangle_a$ 与 n 个时钟量子比特（clock qubits，记为 c-register ）。辅助量子比特虽最终会被舍弃，但对算法目标实现至关重要；时钟量子比特用于存储矩阵 A 编码后的特征值，且 n 越大（对应 $N=2^n$ ），在编码非精确场景下算法结果精度越高。

作为哈密顿量的矩阵 A，可在其本征向量基下展开为线性组合形式。由于 A 是哈密顿量，它可表示为其本征向量 $|u_i\rangle$ 按本征值 λ_i 加权的线性组合，即：

$$A=\sum_{i=0}^{2^{n_b}-1}\lambda_i|u_i\rangle\langle u_i|$$

其中，n_b 为与编码相关的量子比特数，对应构建的希尔伯特空间维度为 2^{n_b}。鉴于 A 在其本征向量基下是对角矩阵，其逆矩阵 A^{-1} 可简便表示为：

$$A^{-1}=\sum_{i=0}^{2^{n_b}-1}\lambda_i^{-1}|u_i\rangle\langle u_i|$$

同时，向量 $\vec{b}$ 也能在 A 的本征向量基下展开，形式为：

$$|b\rangle=\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1}b_j|u_j\rangle$$

基于上述展开，结合 $\langle u_i|u_j\rangle=\delta_{ij}$（$\delta_{ij}$ 为克罗内克函数，$i=j$ 时为 1，否则为 0 ）这一性质，原线性方程组可编码为量子态形式。最终，解 $|x\rangle$ 满足：

$$|x\rangle=A^{-1}|b\rangle=\sum_{i=0}^{2^{n_b}-1}\lambda_i^{-1}b_i|u_i\rangle$$

HHL 算法的目标便是以这种形式求解，且解 $|x\rangle$ 存储于 b-register 中。

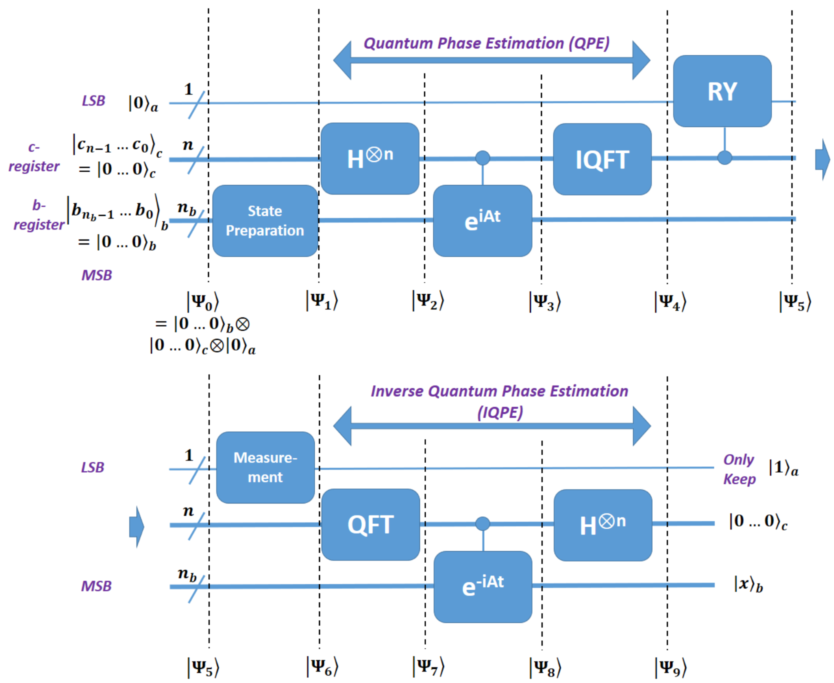

图 1: HHL 量子电路从左到右的结构示意图。根据小端字序约定，图中最低的量子位是最高有效位（MSB），而最上方的则是最低有效位（LSB）。

2 算法核心步骤

2.1 状态制备

初始时，系统包含 n_b+n+1 个量子比特（n_b 个用于编码向量的 b 寄存器、n 个时钟量子比特的 c 寄存器、1 个辅助量子比特），初始状态为：

$$|\Psi_0\rangle = |0\cdots0\rangle_b\, |0\cdots0\rangle_c\, |0\rangle_a = |0\rangle^{\otimes n_b}\, |0\rangle^{\otimes n}\, |0\rangle$$

在状态制备过程中，b-寄存器中的 $|0\cdots0\rangle_b$ 需要通过旋转操作，使其振幅与向量 $\vec{b}$ 的系数一一对应。

$$\vec{b} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_{N_b-1} \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \beta_0\,|0\rangle + \beta_1\,|1\rangle + \cdots + \beta_{N_b-1}\,|N_b-1\rangle = |b\rangle = \sum_{j=0}^{N_b-1} \beta_j\,|j\rangle$$

左侧的 $\vec{b}$ 以列向量形式呈现，其中 β_i 是列向量的系数，这也是量子态 $|b\rangle$ 的有效表示；右侧则显式写出了由 n_b 个量子比特张成的希尔伯特空间的对应基矢展开形式。因此，状态制备完成后，系统量子态演化为：

$$|\Psi_1\rangle = |b\rangle_b\, |0\cdots0\rangle_c\, |0\rangle_a = |b\rangle \otimes |0\rangle^{\otimes n} \otimes |0\rangle_a$$

2.2 量子相位估计（QPE）

量子相位估计（QPE）也是一种特征值估计算法。QPE 包含三个部分，即通过哈达玛门实现时钟量子比特的叠加、受控旋转以及逆量子傅里叶变换（IQFT）。

2.2.1 时钟量子比特叠加

在创建时钟量子比特叠加的第一步中，对时钟量子比特应用哈达玛门，得到：

$$\begin{aligned}|\Psi_2\rangle &= I^{\otimes n_b} \otimes H^{\otimes n} \otimes I\,|\Psi_1\rangle \\ &= |b\rangle \frac{1}{2^{\frac{n}{2}}}(|0\rangle + |1\rangle)^{\otimes n}|0\rangle\end{aligned}$$

2.2.2 受控旋转

在受控旋转部分，将 U 应用于 $|b\rangle$，其中时钟量子比特作为控制量子比特（图 2）。为简单起见，我们首先假设 $|b\rangle$ 是 U 的特征向量，其特征值为 $e^{2\pi i\phi}$。因此：

$$U|b\rangle = e^{2\pi i\phi}|b\rangle$$

当控制时钟量子比特为 0 时，$|b\rangle$ 不会受到影响。如果时钟比特为 1，则将 U 应用于 $|b\rangle$。这相当于

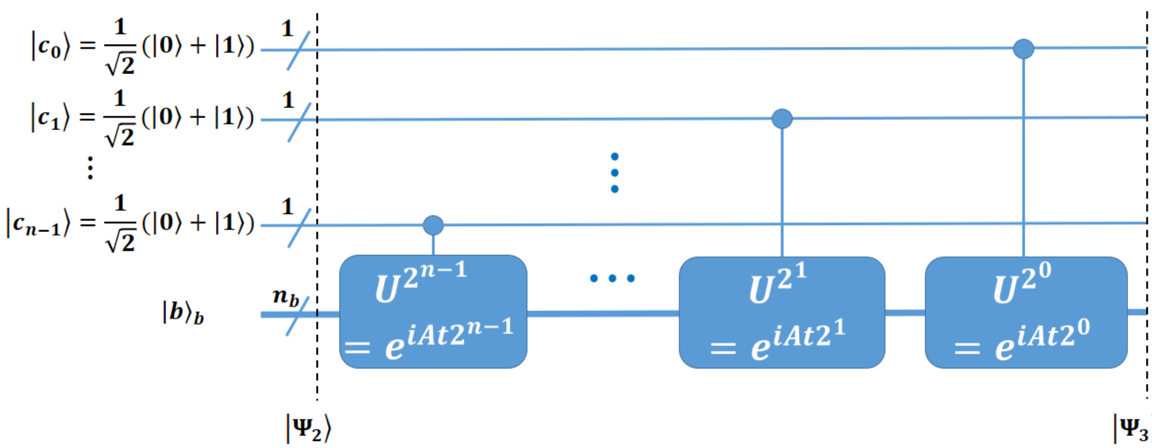

图 2: QPE 的受控旋转部分。在 HHL 算法中，U 由 e^{iAt} 取代。

在第 j 个时钟量子比特的 1 前面乘以 $e^{2\pi i\phi 2^j}$。因此，在受控 U 操作之后，我们有：

$$\begin{aligned}|\Psi_3\rangle &= |b\rangle \otimes \left(\frac{1}{2^{\frac{n}{2}}}\left(|0\rangle + e^{2\pi i\phi 2^{n-1}}|1\rangle\right) \otimes \cdots \otimes \left(|0\rangle + e^{2\pi i\phi 2^0}|1\rangle\right)\right) \otimes |0\rangle_a \\ &= |b\rangle \frac{1}{2^{\frac{n}{2}}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i\phi k}|k\rangle|0\rangle_a\end{aligned}$$

2.2.3 逆量子傅里叶变换（IQFT）

在 IQFT 部分，只有时钟量子比特受到影响。注意，在某些文献中，这被称为量子傅里叶变换（QFT）。

$$
\begin{aligned}
|\Psi_4\rangle &= |b\rangle IQFT\left(\frac{1}{2^{\frac{n}{2}}}\sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i\phi k}|k\rangle\right)|0\rangle_a \\
&= |b\rangle\frac{1}{2^{\frac{n}{2}}}\sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i\phi k}(IQFT|k\rangle)|0\rangle_a \\
&= |b\rangle\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i\phi k}\left(\sum_{y=0}^{2^n-1} e^{-2\pi iyk/N}|y\rangle\right)|0\rangle_a \\
&= \frac{1}{2^n}|b\rangle\sum_{y=0}^{2^n-1}\sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi ik(\phi-y/N)}|y\rangle|0\rangle_a
\end{aligned}
$$

由于干涉，只有满足 $\phi-y/N=0$ 的 $|y\rangle$ 会有 $\sum_{k=0}^{2^n-1}e^0=2^n$ 的有限振幅。否则，由于相消干涉，振幅为 $\sum_{k=0}^{2^n-1}e^{2\pi ik(\phi-y/N)}=0$。忽略振幅为零的状态，我们可以将 $|\Psi_4\rangle$ 重写为：

$$|\Psi_4\rangle = |b\rangle|N\phi\rangle|0\rangle_a$$

因此，在 QPE 中，时钟量子比特用于表示 U 的相位信息 ϕ，其精度取决于量子比特的数量 n。在哈密顿量编码中，U 与 A 的关系为：

$$U = e^{iAt}$$

其中 t 是该哈密顿量的演化时间。显然，U 在 A 的特征向量 $|u_i\rangle$ 基下是对角的。

如果 $|b\rangle=|u_j\rangle$，则：

$$U|b\rangle = e^{i\lambda_j t}|u_j\rangle$$

通过将式 $U|b\rangle=e^{2\pi i\phi}|b\rangle$ 中的 $2\pi i\phi$ 等同于 $i\lambda_j t$，我们得到 $\phi=\lambda_j t/(2\pi)$，则 $|\Psi_4\rangle$ 变为：

$$|\Psi_4\rangle = |u_j\rangle\,|N\lambda_j t/2\pi\rangle\,|0\rangle_a$$

这样，A 的特征值就被编码到了时钟量子比特中（基编码）。

然而，一般来说，$|b\rangle=\sum_{j=0}^{2^{n_b-1}} b_j|u_j\rangle$，利用叠加原理，有：

$$|\Psi_4\rangle = \sum_{j=0}^{2^{n_b-1}} b_j\,|u_j\rangle\,|N\lambda_j t/2\pi\rangle\,|0\rangle_a$$

λ_j 通常不是整数。我们会选择 t，使得 $\tilde{\lambda_j}=N\lambda_j t/(2\pi)$ 为整数。因此，编码值 $\tilde{\lambda_j}$ 可以与 λ_j 不同。Ψ_4 可以重写为：

$$|\Psi_4\rangle = \sum_{j=0}^{2^{n_b-1}} b_j\,|u_j\rangle\left|\tilde{\lambda}_j\right\rangle|0\rangle_a$$

2.3 辅助量子比特的受控旋转与测量

下一步是基于时钟寄存器（c-register）中编码的特征值旋转辅助量子比特 $|0\rangle_a$，旋转后的态为：

$$|\Psi_5\rangle = \sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} b_j|u_j\rangle|\tilde{\lambda}_j\rangle\left(\sqrt{1-\frac{C^2}{\tilde{\lambda}_j^2}}|0\rangle_a + \frac{C}{\tilde{\lambda}_j}|1\rangle_a\right)$$

其中 C 为常数。对辅助量子比特进行测量时，其波函数会坍缩到 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$。若坍缩到 $|0\rangle$，则结果会被丢弃，需重复计算直至测量结果为 $|1\rangle$。因此，我们关注的最终波函数为：

$$|\Psi_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \left|\frac{b_j C}{\tilde{\lambda}_j}\right|^2}} \sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} b_j |u_j\rangle |\tilde{\lambda}_j\rangle \frac{C}{\tilde{\lambda}_j} |1\rangle_a$$

式中的归一化因子源于测量后的归一化处理。由于 $\left|\frac{C}{\tilde{\lambda}_j}\right|^2$ 是测量到 $|1\rangle$ 的概率，因此 C 应尽可能取大值。与式 $|x\rangle = A^{-1}|b\rangle = \sum_{i=0}^{2^{n_b}-1} \lambda_i^{-1} b_i |u_i\rangle$ 对比可知，上述结果与目标解 $|x\rangle$ 类似，但它与时钟寄存器 $|\tilde{\lambda}_j\rangle$ 存在纠缠，即无法将结果分解为时钟寄存器与 b 寄存器的张量积。因此，我们需要通过反计算（uncomputation）来消除这种纠缠。

测量通常可在反计算后进行，但由于辅助量子比特在受控旋转后不再参与任何操作，因此在反计算前测量辅助量子比特会得到相同的结果。为简化推导，此处选择在反计算前进行测量。

2.4 反计算——逆量子相位估计（IQPE）

首先，对时钟寄存器应用量子傅里叶变换（QFT）：

$$\begin{aligned}|\Psi_7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \left|\frac{b_j C}{\tilde{\lambda}_j}\right|^2}} \sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \frac{b_j C}{\tilde{\lambda}_j} |u_j\rangle \,\mathrm{QFT}\, |\tilde{\lambda}_j\rangle |1\rangle_a \\ &= \frac{1}{\sqrt{\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \left|\frac{b_j C}{\tilde{\lambda}_j}\right|^2}} \sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \frac{b_j C}{\tilde{\lambda}_j} |u_j\rangle \left(\frac{1}{2^{n/2}} \sum_{y=0}^{2^n-1} e^{2\pi i y \tilde{\lambda}_j / N} |y\rangle \right) |1\rangle_a\end{aligned}$$

随后，通过时钟寄存器对 b 寄存器应用逆受控旋转，其中 $U^{-1} = e^{-iAt}$。与正向过程类似，当时钟量子比特为 0 时，$|u_j\rangle$ 不受影响；当时钟量子比特为 1 时，U^{-1} 会作用于 $|u_j\rangle$，这等价于在第 i 个时钟比特的 $|1\rangle$ 前乘以 $e^{-i\lambda_j t 2^i}$。因此：

$$|\Psi_8\rangle = \frac{1}{2^{n/2}\sqrt{\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \left|\frac{b_j C}{\tilde{\lambda}_j}\right|^2}} \sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \frac{b_j C}{\tilde{\lambda}_j} |u_j\rangle \left(\sum_{y=0}^{2^n-1} e^{-i\lambda_j t y} e^{2\pi i y \tilde{\lambda}_j / N} |y\rangle \right) |1\rangle_a$$

由于我们已设置 $\tilde{\lambda}_j = N\lambda_j t / 2\pi$，因此两个指数项会相互抵消：

$$\begin{aligned}|\Psi_8\rangle &= \frac{1}{2^{n/2}\sqrt{\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \left|\frac{b_j C}{\tilde{\lambda}_j}\right|^2}} \sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \frac{b_j C}{\tilde{\lambda}_j} |u_j\rangle \sum_{y=0}^{2^n-1} |y\rangle |1\rangle_a \\ &= \frac{C}{2^{n/2}\sqrt{\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \left|\frac{b_j C}{\tilde{\lambda}_j}\right|^2}} |x\rangle \sum_{y=0}^{2^n-1} |y\rangle |1\rangle_a\end{aligned}$$

此时，时钟寄存器与 b 寄存器已解纠缠，且 b 寄存器中存储了 $|x\rangle$。最后，对时钟寄存器应用 Hadamard 门。对于多比特 $H^{\otimes n}$（n 个 H 门的张量积），其厄米共轭满足：${H^{\otimes n}}^\dagger = {H^\dagger}^{\otimes n} = H^{\otimes n}$ 且多比特幺正性为：${H^{\otimes n}}^\dagger H^{\otimes n} = I^{\otimes n}$ 这保证了多比特态经过 $H^{\otimes n}$ 操作后，内积运算仍满足正交性和归一性。

$$
\begin{aligned}
|\Psi_9\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1}\left|\frac{b_j C}{\lambda_j}\right|^2}} \sum_{j=0}^{2^{n_b}-1} \frac{b_j C}{\lambda_j}|u_j\rangle|0\rangle^{\otimes n}|1\rangle_a \\
&= \frac{1}{\sqrt{\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1}\left|\frac{b_j}{\lambda_j}\right|^2}}|x\rangle_b|0\rangle_c^{\otimes n}|1\rangle_a
\end{aligned}
$$

2.5 H 门作用于多比特全 0 寄存器的计算过程

2.5.1 单比特情况

首先考虑单比特情况，H 门的定义为：

$$H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$H|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

当 H 门作用于 $|0\rangle$ 时：

$$H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

再将 H 门作用于上述结果：

$$
\begin{aligned}
H\left(H|0\rangle\right) &= H\left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(H|0\rangle + H|1\rangle\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{2|0\rangle}{2} = |0\rangle
\end{aligned}
$$

可见，对单比特 $|0\rangle$ 连续作用两次 H 门，结果回到 $|0\rangle$。

2.5.2 多比特情况

考虑 n 个比特的全 0 寄存器：

$$|0\rangle^{\otimes n} = |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \cdots \otimes |0\rangle \quad (n\text{次张量积})$$

多比特 H 门操作为单比特 H 门的张量积：

$$H^{\otimes n} = H \otimes H \otimes \cdots \otimes H \quad (n\text{次张量积})$$

第一次应用 $H^{\otimes n}$：

$$H^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes n} = (H \otimes H \otimes \cdots \otimes H)(|0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \cdots \otimes |0\rangle)$$

$$= H|0\rangle \otimes H|0\rangle \otimes \cdots \otimes H|0\rangle$$

$$= \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \otimes \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \otimes \cdots \otimes \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right)$$

$$= \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle$$

其中 $|x\rangle$ 表示所有可能的 n 比特态，这是一个均匀叠加态。

第二次应用 $H^{\otimes n}$：

$$H^{\otimes n}\left(H^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes n}\right) = H^{\otimes n}\left(\frac{1}{2^{n/2}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{x=0}^{2^n-1} H^{\otimes n}|x\rangle$$

对于任意 n 比特态 $|x\rangle = |x_1x_2\cdots x_n\rangle$，其中 $x_i \in \{0,1\}$，有：

$$H^{\otimes n}|x\rangle = \bigotimes_{i=1}^{n} H|x_i\rangle$$

当 $x_i = 0$ 时，$H|0\rangle = \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$；当 $x_i = 1$ 时，$H|1\rangle = \frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}$。

将这些代入求和式，展开后大部分项会相互抵消，最终结果为：

$$H^{\otimes n_b}\left(H^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes n}\right) = |0\rangle^{\otimes n}$$

2.5.3 结论

对 n_b 比特全 0 寄存器连续应用两次 $H^{\otimes n}$ 门，系统会回到初始的全 0 态：

$$H^{\otimes n} \cdot H^{\otimes n} \cdot |0\rangle^{\otimes n} = |0\rangle^{\otimes n}$$

这表明 $H^{\otimes n}$ 是自逆的，即 $\left(H^{\otimes n}\right)^2 = I^{\otimes n}$，其中 $I^{\otimes n}$ 是 n 比特的单位操作。

3 数值示例

我们将通过一个数值示例，逐步应用 HHL 算法。首先，我们将讨论如何实现受控-U 操作和辅助量子位的旋转。

3.1 编码方案

在本示例中，矩阵 A 和向量 $\vec{b}$ 设定为：

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

矩阵 A 的特征向量为 $\vec{u}_0 = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ 和 $\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$，对应的特征值分别为 $\lambda_0 = \frac{2}{3}$ 和 $\lambda_1 = \frac{4}{3}$。我们需要通过基编码将特征值编码到时钟量子比特形成的基中，且需要 2 个量子比特：将 λ_0 编码为 $|01\rangle$，将 λ_1 编码为 $|10\rangle$，以保持 $\lambda_1/\lambda_0 = 2$ 的比例。这意味着 $\tilde{\lambda}_0 = 1$、$\tilde{\lambda}_1 = 2$（即 $|\tilde{\lambda}_0\rangle = |01\rangle$、

$|\tilde{\lambda}_1\rangle = |10\rangle$），通过 $n=2$（即 $N=4$）可实现完美编码。因此，选择演化时间 $t=\frac{3\pi}{4}$ 以满足编码方案 $\tilde{\lambda}_j = N\lambda_j t/2\pi$。

由于 $\vec{b}$ 是二维复向量，可通过 1 个量子比特编码，因此 $n_b=1$。

线性系统问题的解为：

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} \frac{3}{8} \\ \frac{9}{8} \end{pmatrix}$$

其中 $|x_0|^2$ 与 $|x_1|^2$ 的比例为 1:9。

3.2 受控-U 实现

实际中，受控-U 操作需通过与 A 相同哈密顿量的物理系统实现。为理解算法，我们推导 U 的矩阵形式并映射到 IBM-Q 中的 CU3 门。由于 $n=2$，需实现由 c_1 控制的 $U^{2^1}=U^2$ 和由 c_0 控制的 $U^{2^0}=U$。

为求解 $U^2=e^{i2At}$ 和 $U=e^{iAt}$ 的矩阵，需对 $i2At$ 和 iAt 进行相似变换，指数化后再转换回原基。

从原基到特征向量基的变换矩阵为：

$$V = \begin{pmatrix} \vec{u}_0 & \vec{u}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

由于 V 是实矩阵，其厄米共轭 $V^\dagger$ 等于自身。

A 在特征向量基下的对角化形式为：

$$A_{\text{diag}} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{4}{3} \end{pmatrix}$$

因对角矩阵的指数化可直接对元素操作，故：

$$U_{\text{diag}} = \begin{pmatrix} e^{i\lambda_0 t} & 0 \\ 0 & e^{i\lambda_1 t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\pi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$U_{\text{diag}}^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

显然，二者均为幺正矩阵，满足量子操作要求。

通过相似变换可得到原基下的 U 和 U^2：

$$U = VU_{\text{diag}}V^\dagger = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1+i & 1+i \\ 1+i & -1+i \end{pmatrix}$$

$$U^2 = VU_{\text{diag}}^2V^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

选择 CU3 门实现 U 和 U^2，其形式为：

$$\text{CU3} = \begin{pmatrix} e^{i\gamma}\cos(\theta/2) & -e^{i(\gamma+\lambda)}\sin(\theta/2) \\ e^{i(\gamma+\phi)}\sin(\theta/2) & e^{i(\gamma+\phi+\lambda)}\cos(\theta/2) \end{pmatrix}$$

- 选择 $\theta=\pi$、$\phi=\pi$、$\lambda=0$、$\gamma=0$ 可实现 U^2；

- 选择 $\theta=\pi/2$、$\phi=-\pi/2$、$\lambda=\pi/2$、$\gamma=3\pi/4$ 可实现 U。

由于本示例中 $(U^2)^{-1}=U^2$，故可使用相同参数实现 $(U^2)^{-1}$。但：

$$U^{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1-i & 1-i\\ 1-i & -1-i\end{pmatrix}$$

需选择 $\theta=\pi/2$、$\phi=\pi/2$、$\lambda=-\pi/2$、$\gamma=-3\pi/4$ 实现 U^{-1}。

受控矩阵 U' 的构造为：

$$C-U'=I\otimes|0\rangle\langle 0|+U'\otimes|1\rangle\langle 1|$$

注意，在这个等式中，为简单起见，仅包含了控制时钟位和 b-寄存器。例如，

$$\begin{aligned}C-U^{-1}&=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1-i & 1-i\\ 1-i & -1-i\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&0\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&-1-i&0&1-i\\0&0&0&0\\0&1-i&0&-1-i\end{pmatrix}\\&=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}2&0&0&0\\0&-1-i&0&1-i\\0&0&2&0\\0&1-i&0&-1-i\end{pmatrix}\end{aligned}$$

3.3 辅助量子比特的受控旋转实现

式 $|\Psi_5\rangle=\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1}b_j|u_j\rangle|\tilde{\lambda}_j\rangle\left(\sqrt{1-\frac{C^2}{\tilde{\lambda}_j^2}}|0\rangle_a+\frac{C}{\tilde{\lambda}_j}|1\rangle_a\right)$ 中辅助比特旋转后 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的系数分别为 $\sqrt{1-\frac{C^2}{\tilde{\lambda}_j^2}}$ 和 $\frac{C}{\tilde{\lambda}_j}$，其模平方和为 1，故 $C\le\tilde{\lambda}_j$。由于最小 $\tilde{\lambda}_j=1$，选择 $C=1$ 以最大化测量到 $|1\rangle$ 的概率。

RY 门形式为：

$$RY(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\end{pmatrix}$$

其中 $\theta=2\arcsin\left(\frac{1}{\tilde{\lambda}_j}\right)$。

定义函数：

$$\theta(c)=\theta(c_1c_0)=2\arcsin\left(\frac{1}{c}\right)$$

其中 c 为时钟量子比特的值，c_1c_0 为其二进制形式。

由于 $|\Psi_4\rangle=\sum_{j=0}^{2^{n_b-1}}b_j\,|u_j\rangle\left|\tilde{\lambda}_j\right\rangle|0\rangle_a$ 中仅 $|\tilde{\lambda}_j\rangle$ 有非零振幅，仅需对 $|c\rangle=|01\rangle$ 和 $|10\rangle$ 定义：

$$\theta(1)=\theta(01)=2\arcsin\left(\frac{1}{1}\right)=\pi$$

$$\theta(2)=\theta(10)=2\arcsin\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{\pi}{3}$$

通过以下函数实现：

$$\theta(c)=\theta(c_1c_0)=\frac{\pi}{3}c_1+\pi c_0$$

受控旋转可表示为：

$$|1\rangle\langle 1|\otimes I\otimes RY\left(\frac{\pi}{3}\right)+|0\rangle\langle 0|\otimes I\otimes I+I\otimes|1\rangle\langle 1|\otimes RY(\pi)+I\otimes|0\rangle\langle 0|\otimes I$$

其中算子从左到右分别作用于量子比特 $|c_1\rangle$、$|c_0\rangle$ 和 $|a\rangle$。

3.4 量子电路

基于数值示例构建的 HHL 电路如图 3 所示，下文将通过数值代入逐步解析该电路。

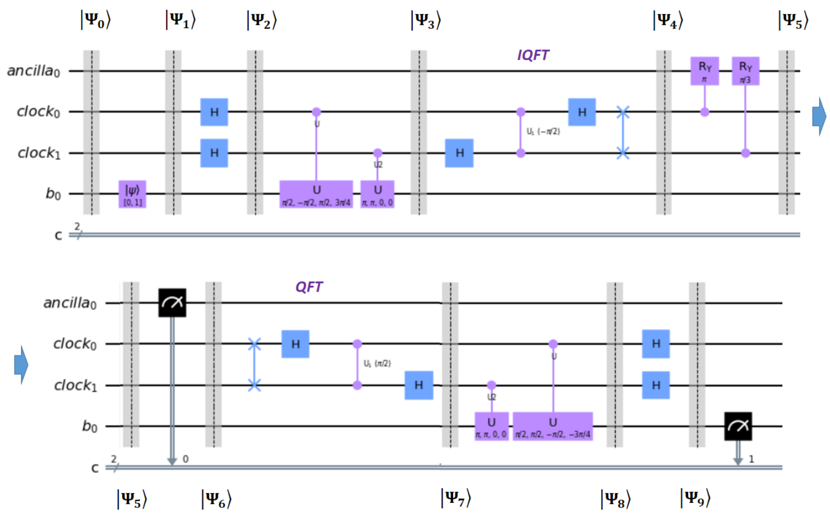

图 3: 本示例对应的 HHL 电路专为在 IBM-Q 上运行而构建，其划分方式与图 1 所示的通用 HHL 原理图相同。

3.5 数值代入

算法始于：

$$|\Psi_0\rangle=|0\rangle_b\otimes|00\rangle_c\otimes|0\rangle_a=|0000\rangle$$

施加 X 门（非门）将 $|0\rangle_b$ 转换为 $|1\rangle_b$：

$$|\Psi_1\rangle=X\otimes I\otimes I|\Psi_0\rangle=|1000\rangle$$

对时钟量子比特施加 Hadamard 门产生叠加态：

$$|\Psi_2\rangle=\frac{1}{2}(|1000\rangle+|1010\rangle+|1100\rangle+|1110\rangle)$$

转换到 A 的特征向量基（因 $|1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(-|u_0\rangle+|u_1\rangle)$，故 $b_0=\frac{-1}{\sqrt{2}}$、$b_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$）：

$$|\Psi_2\rangle=\frac{1}{2\sqrt{2}}(-(|u_0\rangle|000\rangle+|u_0\rangle|010\rangle+|u_0\rangle|100\rangle+|u_0\rangle|110\rangle)+\\|u_1\rangle|000\rangle+|u_1\rangle|010\rangle+|u_1\rangle|100\rangle+|u_1\rangle|110\rangle)$$

在受控旋转操作中，当对应时钟寄存器（c-register）处于状态 $|k\rangle_c$ 时，需为本征向量 $|u_j\rangle$ 添加相位变化 $\phi_j = \frac{k\lambda_j t}{2\pi}$（即乘以相位因子 $e^{2\pi i\phi_j}$）。代入 $t = \frac{3\pi}{4}$、$\lambda_0 = \frac{2}{3}$、$\lambda_1 = \frac{4}{3}$：

$$
\begin{aligned}
|\Psi_3\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \big(&-|u_0000\rangle - e^{2\pi i\phi_0}|u_0010\rangle - e^{2\pi i2\phi_0}|u_0100\rangle - e^{2\pi i3\phi_0}|u_0110\rangle \\
&+|u_1000\rangle + e^{2\pi i\phi_1}|u_1010\rangle + e^{2\pi i2\phi_1}|u_1100\rangle + e^{2\pi i3\phi_1}|u_1110\rangle\big) \\
= \frac{1}{2\sqrt{2}} \big(&-|u_0000\rangle - e^{i\lambda_0 t}|u_0010\rangle - e^{i2\lambda_0 t}|u_0100\rangle - e^{i3\lambda_0 t}|u_0110\rangle \\
&+|u_1000\rangle + e^{i\lambda_1 t}|u_1010\rangle + e^{i2\lambda_1 t}|u_1100\rangle + e^{i3\lambda_1 t}|u_1110\rangle\big) \\
= \frac{1}{2\sqrt{2}} \big(&-|u_0000\rangle - e^{i\pi/2}|u_0010\rangle - e^{i\pi}|u_0100\rangle - e^{i3\pi/2}|u_0110\rangle \\
&+|u_1000\rangle + e^{i\pi}|u_1010\rangle + e^{i2\pi}|u_1100\rangle + e^{i3\pi}|u_1110\rangle\big) \\
= \frac{1}{2\sqrt{2}} (&-|u_0000\rangle - i|u_0010\rangle + |u_0100\rangle + i|u_0110\rangle \\
&+|u_1000\rangle - |u_1010\rangle + |u_1100\rangle - |u_1110\rangle)
\end{aligned}
$$

在应用逆量子傅里叶变换（IQFT）之前，为简化计算，先对 $|\Psi_3\rangle$ 的项进行重组，结果如下：

$$
|\Psi_3\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left((-|u_0\rangle + |u_1\rangle) |00\rangle + (-i|u_0\rangle - |u_1\rangle) |01\rangle + (|u_0\rangle + |u_1\rangle) |10\rangle + (i|u_0\rangle - |u_1\rangle) |11\rangle \right) |0\rangle
$$

接下来，对时钟寄存器（c-register）的量子态应用 IQFT。以 $|10\rangle$ 为例（其对应十进制数值为 2），计算过程如下：

$$
\begin{aligned}
IQFT|10\rangle &= IQFT|2\rangle \\
&= \frac{1}{2^{2/2}} \sum_{y=0}^{2^2-1} e^{-2\pi i\cdot 2y/4}|y\rangle \\
&= \frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle + |2\rangle - |3\rangle) \\
&= \frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle)
\end{aligned}
$$

同理，时钟寄存器其他基态经过 IQFT 后的结果为：

$$
\begin{aligned}
IQFT|00\rangle &= \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle) \\
IQFT|01\rangle &= \frac{1}{2}(|00\rangle - i|01\rangle - |10\rangle + i|11\rangle) \\
IQFT|11\rangle &= \frac{1}{2}(|00\rangle + i|01\rangle - |10\rangle - i|11\rangle)
\end{aligned}
$$

因此，将 IQFT 应用于 $|\Psi_3\rangle$，并代入上式，可得：

$$
\begin{aligned}
|\Psi_4\rangle &= IQFT|\Psi_3\rangle \\
&= \frac{1}{4\sqrt{2}} \Bigg((-|u_0\rangle + |u_1\rangle)(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle) + \\
&\quad (-i|u_0\rangle - |u_1\rangle)(|00\rangle - i|01\rangle - |10\rangle + i|11\rangle) + \\
&\quad (|u_0\rangle + |u_1\rangle)(|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle) + \\
&\quad (i|u_0\rangle - |u_1\rangle)(|00\rangle + i|01\rangle - |10\rangle - i|11\rangle) \Bigg) |0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (-|u_0\rangle|01\rangle + |u_1\rangle|10\rangle) |0\rangle
\end{aligned}
$$

可以看出，经过 IQFT 后，由于相长干涉，矩阵 A 的特征值仅在时钟寄存器处于 $|01\rangle$ 和 $|10\rangle$ 时具有非零振幅，即特征值被编码到时钟寄存器中。其中，$\vec{b}$ 在 A 本征向量基下的系数为 $b_0=\frac{-1}{\sqrt{2}}$、$b_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$，且能清晰观察到 b 寄存器与 c 寄存器之间的纠缠关系—$|u_0\rangle$ 与 $|01\rangle$ 关联，$|u_1\rangle$ 与 $|10\rangle$ 关联。

在执行辅助量子比特旋转操作后，量子态表示为：

$$
\begin{aligned}
|\Psi_5\rangle &= \sum_{j=0}^{2^1-1} b_j\,|u_j\rangle\,|\tilde{\lambda}_j\rangle\left(\sqrt{1-\frac{C^2}{\tilde{\lambda}_j^2}}\,|0\rangle+\frac{C}{\tilde{\lambda}_j}\,|1\rangle\right) \\
&= -\frac{1}{\sqrt{2}}\,|u_0\rangle\,|01\rangle\left(\sqrt{1-\frac{1}{1^2}}\,|0\rangle+\frac{1}{1}\,|1\rangle\right)+ \\
&\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\,|u_1\rangle\,|10\rangle\left(\sqrt{1-\frac{1}{2^2}}\,|0\rangle+\frac{1}{2}\,|1\rangle\right)
\end{aligned}
$$

若辅助比特测量结果为 $|1\rangle$：

$$
|\Psi_6\rangle=\sqrt{\frac{8}{5}}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}|u_0\rangle|01\rangle|1\rangle+\frac{1}{2\sqrt{2}}|u_1\rangle|10\rangle|1\rangle\right)
$$

将 QFT 应用于编码的特征值，我们得到

$$
\begin{aligned}
\mathrm{QFT}|10\rangle &= \mathrm{QFT}|2\rangle \\
&= \frac{1}{2^{2/2}}\sum_{y=0}^{2^2-1} e^{2\pi i\cdot 2y/4}|y\rangle \\
&= \frac{1}{2}\big(|00\rangle-|01\rangle+|10\rangle-|11\rangle\big) \\
\mathrm{QFT}|01\rangle &= \mathrm{QFT}|1\rangle \\
&= \frac{1}{2}\big(|00\rangle+i|01\rangle-|10\rangle-i|11\rangle\big)
\end{aligned}
$$

因此，对 $|\Psi_6\rangle$ 应用量子傅里叶变换（QFT），并代入上述公式，我们得到

$$
\begin{aligned}
|\Psi_7\rangle=\sqrt{\frac{8}{5}}\Bigg(&-\frac{1}{\sqrt{2}}|u_0\rangle\cdot\frac{1}{2}\big(|00\rangle+i|01\rangle-|10\rangle-i|11\rangle\big)|1\rangle+ \\
&\frac{1}{2\sqrt{2}}|u_1\rangle\cdot\frac{1}{2}\big(|00\rangle-|01\rangle+|10\rangle-|11\rangle\big)|1\rangle\Bigg)
\end{aligned}
$$

对于受控旋转，若 $c_0=1$ 和 $c_1=1$，则量子态分别乘以 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda_j t}$ 和 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\lambda_j t}$。已知 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda_0 t}=-\mathrm{i}$、$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\lambda_0 t}=-1$、$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda_1 t}=-1$、$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\lambda_1 t}=1$，且 $\frac{Nt}{2\pi}=\frac{3}{2}$，则量子态 $|\Psi_8\rangle$ 可表示为：

$$
\begin{aligned}
|\Psi_8\rangle &= \sqrt{\frac{8}{5}}\Bigg[-\frac{1}{\sqrt{2}}|u_0\rangle\cdot\frac{1}{2}\left(|00\rangle+|01\rangle+|10\rangle+|11\rangle\right)|1\rangle \\
&\quad +\frac{1}{2\sqrt{2}}|u_1\rangle\cdot\frac{1}{2}\left(|00\rangle+|01\rangle+|10\rangle+|11\rangle\right)|1\rangle\Bigg] \\
&= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{8}{5}}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}|u_0\rangle+\frac{1}{2\sqrt{2}}|u_1\rangle\right)\left(|00\rangle+|01\rangle+|10\rangle+|11\rangle\right)|1\rangle \\
&= \frac{1}{2}\cdot\frac{2}{3}\sqrt{\frac{8}{5}}\left(-\frac{3}{2\sqrt{2}}|u_0\rangle+\frac{3}{4\sqrt{2}}|u_1\rangle\right)\left(|00\rangle+|01\rangle+|10\rangle+|11\rangle\right)|1\rangle
\end{aligned}
$$

最后，对时钟量子比特施加哈达玛门（Hadamard gate），我们有：

$$|\Psi_9\rangle = \frac{2}{3}\sqrt{\frac{8}{5}}\left(-\frac{1}{\frac{2}{3}\sqrt{2}}|u_0\rangle + \frac{1}{\frac{4}{3}\sqrt{2}}|u_1\rangle\right)|00\rangle|1\rangle \tag{63}$$

可以验证，$|\Psi_9\rangle$ 是一个归一化向量，理应如此，因为 HHL 电路中的每一个操作都是幺正的（酉操作），会保持范数（模长）不变。

通过将 $|u_0\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ 和 $|u_1\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ 代入式，可对其进行化简。化简后，我们得到：

$$|\Psi_9\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{5}}(|0\rangle + 3|1\rangle)|00\rangle|1\rangle \tag{64}$$

对 b 寄存器（b-register）进行测量时，测得 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的概率比为 $1:9$ ，与预期一致。

3.6 H 门作用于 $|\Psi_8\rangle$ 生成 $|\Psi_9\rangle$ 的具体过程

3.6.1 初始态 $|\Psi_8\rangle$ 的表达式

施加 H 门前的量子态 $|\Psi_8\rangle$ 可表示为：

$$|\Psi_8\rangle = \underbrace{\frac{2}{3}\sqrt{\frac{8}{5}}\left(-\frac{1}{\frac{2}{3}\sqrt{2}}|u_0\rangle + \frac{1}{\frac{4}{3}\sqrt{2}}|u_1\rangle\right)}_{\text{系统部分}} \otimes \underbrace{(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)}_{\text{时钟量子比特（2 量子比特）}} \otimes \underbrace{|1\rangle}_{\text{辅助量子比特}}$$

3.6.2 H 门对 2 量子比特系统的作用

H 门作用于时钟量子比特（2 个量子比特），其操作通过张量积实现：

$$H_{\text{总}} = H \otimes H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1 & 1 & 1\\1 & -1 & 1 & -1\\1 & 1 & -1 & -1\\1 & -1 & -1 & 1\end{pmatrix}$$

对时钟量子比特基态的作用为：

$$H_{\text{总}}|00\rangle = \frac{|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle}{2}$$
$$H_{\text{总}}|01\rangle = \frac{|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle}{2}$$
$$H_{\text{总}}|10\rangle = \frac{|00\rangle + |01\rangle - |10\rangle - |11\rangle}{2}$$
$$H_{\text{总}}|11\rangle = \frac{|00\rangle - |01\rangle - |10\rangle + |11\rangle}{2}$$

3.6.3 H 门作用于 $|\Psi_8\rangle$ 的时钟部分

对 $|\Psi_8\rangle$ 中的时钟量子比特施加 $H_{总}$：

$$\begin{aligned} H_{总}\left(|00\rangle+|01\rangle+|10\rangle+|11\rangle\right) &= H_{总}|00\rangle+H_{总}|01\rangle+H_{总}|10\rangle+H_{总}|11\rangle \\ &= \frac{|00\rangle+|01\rangle+|10\rangle+|11\rangle}{2}+\frac{|00\rangle-|01\rangle+|10\rangle-|11\rangle}{2} \\ &\quad+\frac{|00\rangle+|01\rangle-|10\rangle-|11\rangle}{2}+\frac{|00\rangle-|01\rangle-|10\rangle+|11\rangle}{2} \\ &= 2|00\rangle \quad \text{（化简后）} \end{aligned}$$

3.6.4 最终态 $|\Psi_9\rangle$ 的生成

系统部分和辅助量子比特不受 H 门影响，结合上述结果得到：

$$|\Psi_9\rangle=\frac{2}{3}\sqrt{\frac{8}{5}}\left(-\frac{1}{\frac{2}{3}\sqrt{2}}|u_0\rangle+\frac{1}{\frac{4}{3}\sqrt{2}}|u_1\rangle\right)\otimes|00\rangle\otimes|1\rangle$$