HHL算法及其应用

林照翔
2022级理论物理2班 320220935801
(Dated: 2025 年 1 月 22 日)

1. 引言

HHL算法是由 Harrow, Hassidim 和 Lloyd 提出的一种求解量子线性系统的量子算法，其利用量子态的相干叠加与纠缠等特性实现稀疏线性方程组 $A\vec{x}=\vec{b}$ 的快速求解，与经典的线性方程组求解算法相比在特定情况下可以达到指数级加速。求解线性方程组是解决很多量子应用相关问题的基础，因此 HHL 算法是许多复杂量子算法的基本组成部分，且广泛应用于量子支持向量机、量子判别分析、量子线性回归、量子无监督学习、量子神经网络等量子机器学习算法中。在大数据时代，HHL 算法带来的加速收益相当可观。

2. HHL算法基本原理

A. 定义

一个线性系统问题(linear system problem, LSP)可以表述为

$$A\vec{x}=\vec{b}$$

其中 A 是 $N_b\times N_b$ 厄米矩阵，$\vec{x},\vec{b}$ 是归一化的 N_b 维矢量，$N_b=2^{n_b}$。A 和 $\vec{b}$ 是已知的，而 $\vec{x}$ 待求解。

HHL 算法包含五个主要组成部分：初态制备、量子相位估计(quantum phase estimation, QPE)、辅助量子比特旋转、逆量子相位估计(inverse quantum phase estimation, IQPE) 和测量。

HHL 算法中，$\vec{b},\vec{x}$ 的 N_b 个分量编码为 n_b 个量子比特的振幅。这些量子比特称为 b-寄存器 $|\rangle_b$。

除此之外还有 c-寄存器 $|\rangle_c$，用于储存矩阵 A 在量子相位估计后得到的本征值。

最后一部分是辅助量子比特 $|\rangle_a$。

设厄米矩阵 A 的本征态和本征值分别为 $\{|u_i\rangle\}$ 和 $\{\lambda_i\}$，则 A 可进行谱分解

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

A 是对角的，因此容易得到 A^{-1}

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

$|b\rangle$ 可以表达为

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

因此，由方程 $A\,|x\rangle=|b\rangle$ 有

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

由于 $|x\rangle\,,|b\rangle$ 是归一的，因此有

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

$$\sum_{i=0}^{2^{n_b}-1}\left|\lambda_i^{-1}b_i\right|^2=1$$

B. 初态制备

共有 n_b+n+1 个量子比特，初始化为

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

设 $\vec{b}=(\beta_0,\beta_1,\cdots,\beta_{N_b-1})^{\mathrm{T}}$则 b-寄存器 $|0\cdots0\rangle_b$ 需要制备为

$$|b\rangle=\beta_0\,|0\rangle+\beta_1\,|1\rangle+\cdots\beta_{N_b-1}\,|N_b-1\rangle$$

总态变为

$$|\Psi_1\rangle = |b\rangle_b |0\cdots 0\rangle_c |0\rangle_a$$

为了方便，在不引起歧义的情况下，下文中 ket 的下标省略。

C. 量子相位估计

首先，对c-量子比特施加 Hadamard 门，得到

$$|\Psi_2\rangle = I^{\otimes n_b} \otimes H^{\otimes n} \otimes I |\Psi_1\rangle = |b\rangle \frac{1}{2^{n/2}}(|0\rangle + |1\rangle)^{\otimes n} |0\rangle$$

接着，以 c-量子比特为控制比特，依次对 $|b\rangle$ 施加受控 U^{2^r} 门，其中 r 为 c-量子比特的下标，$U = \mathrm{e}^{\mathrm{i}At}$。

假设 $|b\rangle$ 为 U 的本征态，对应本征值为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\phi}$，它们本征方程 U 的本征方程

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

当控制比特为 $|0\rangle$，$|b\rangle$ 不受影响；当控制比特为 $|1\rangle$，U 将作用于 $|b\rangle$。结合本征方程可知，总态变为

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

然后对 c-量子比特施加逆量子傅里叶变换(IQFT)，总态变为

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

由上式可见，只有当 $|y\rangle$ 满足条件 $\phi - y/N = 0$ 才贡献有限振幅 $\sum_{k=0}^{2^n-1}\mathrm{e}^0 = 2^n$，其他情况下贡献的振幅为零，即 $\sum_{k=0}^{2^n-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi k(\phi-y/N)} = 0, \phi - y/N \neq 0$，因此 $|\Psi_4\rangle$ 可以写为

$$|\psi_4\rangle = \frac{1}{2^n}|b\rangle \sum_{k=0}^{2^n-1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi k\cdot 0}|N\phi\rangle|0\rangle_a = |b\rangle|N\phi\rangle|0\rangle_a$$

因此，c-量子比特就储存了 U 的本质值 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\phi}$ 的相位 ϕ，精确度取决于用于储存的量子比特的数量 n。

由于 U 与 A 的关系为 $U = \mathrm{e}^{\mathrm{i}At}$，若 $|b\rangle = |u_j\rangle$ 则

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

与 $U|b\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\phi}|b\rangle$ 对比，得到 $\phi = \lambda_j t/2\pi$，于是

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

因此 A 的本征值就编码到了 c-量子比特上。上面的推导均在 $|b\rangle$ 为 A 的某一本征态的假设下进行。一般地，$|b\rangle$ 为 A 的所有本征态的线性叠加，则

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

通常 λ_j 不是整数。选择 t 使得 $\tilde{\lambda}_j \equiv N\lambda_j t/2\pi$ 为整数，则 $|\Psi_4\rangle$ 可写为

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

D. 受控旋转和辅助比特的测量

下一步要基于 c-量子比特储存的本征值来旋转辅助比特 $|0\rangle_a$，总态变为

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

其中 C 是常数。

当对辅助量子比特进行测量时，其会塌缩至 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$。若其塌缩至 $|0\rangle$，则重复上面过程直至其塌缩为 $|1\rangle$。最终，总态塌缩至

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

其中，前面多出的系数是归一化因子。

E. 非计算(uncomputation)-逆量子相位估计(IQPE)

非计算通过逆量子相位估计来完成。

首先对 c-量子比特进行量子傅里叶变换，总态变为

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

接着以 c-量子比特为控制比特对 b-寄存器施加逆受控旋转。当第 r 个控制量子比特为 $|0\rangle$ 时，$|u_j\rangle$ 不变；当第 r 个控制量子比特为 $|1\rangle$ 时，对 $|u_j\rangle$ 施加 $(U^{-1})^{2^r}$， $U^{-1} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}At}$。于是，总态变为

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

最后，对 c-量子比特施加 Hadamard 门，得到

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

若 C 为实数，利用归一化条件 $\sum_{j=0}^{2^{n_b}-1}\left|\lambda_j^{-1} b_j\right|^2 = 1$ 得到

$$|\Psi_9\rangle = |x\rangle_b |0\rangle_c^{\otimes n} |1\rangle_a$$

最终，经一系列操作后，解 $|x\rangle$ 储存在 b-寄存器中。

3. HHL算法的简单应用