

### Nota 3: Algoritmo de Harrow, Hassidim y Lloyd (HHL)

Este algoritmo, publicado en [2], resuelve un problema clásico de álgebra lineal.

#### 1. Enunciado

Considérese el espacio vectorial  $V$  de dimensión  $N$  sobre el cuerpo  $C$  de los números complejos. Un problema que se plantea frecuentemente en el estudio de los sistemas es la solución de la ecuación

$$Ax = b, \quad (1)$$

donde  $A$  es un operador lineal sobre  $V$ ,  $b$  es un elemento de  $V$  y la incógnita  $x$  es un elemento de  $V$ .

Un problema similar, en el marco de los sistemas cuánticos, se enunciaría como sigue: considérese

- el espacio vectorial  $V = C^N$  cuyos elementos unitarios son los posibles estados de un registro de  $n$  qubits, con lo cual  $N = 2^n$ ;
- un operador hermitiano  $A$  sobre  $V$ ;
- un vector unitario  $|b\rangle \neq 0$  de  $V$ .

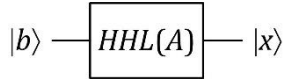
Genérese un circuito cuántico  $HHL(A)$  (Fig.1) que ejecuta la operación

$$|b\rangle \xrightarrow{HHL(A)} |x\rangle$$

de tal manera que

$$\frac{1}{C} \cdot A|x\rangle = |b\rangle, \quad (2)$$

donde  $|x\rangle$  es unitario y el factor  $\frac{1}{C}$ , con  $C = |A|x\rangle|$  normaliza  $A|x\rangle$ . Efectivamente, ni  $A$  ni  $A|x\rangle$  tienen que ser unitarios. Por tanto, el circuito de la Fig. 1 genera un vector unitario  $|x\rangle$  proporcional a la solución  $x$  de la ecuación (1).



**Figura 1** Circuito  $HHL(A)$

### Comentario

Si el operador  $A$ , representado por la matriz  $A$ , no es hermitiano, se sustituye  $A$  por el operador hermitiano  $A'$ , definido por la matriz

$$A' = \begin{bmatrix} 0 & A \\ A^+ & 0 \end{bmatrix},$$

el vector  $|b\rangle$  por  $\begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$ , y la ecuación (1) por

$$\begin{bmatrix} 0 & A \\ A^+ & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix},$$

cuya solución es  $\begin{bmatrix} 0 \\ x \end{bmatrix}$ .

### 2. Algoritmo $HHL$

Si el operador  $A$  es hermitiano, entonces es diagonalizable y sus valores propios son números reales ([1], Propiedades 1.6). Para simplificar la presentación se supone que

- los valores propios de  $A$  son todos distintos, con lo cual los vectores correspondientes son ortogonales ([1], Propiedades 1.6),
- ningún valor propio es nulo.

Por tanto, el operador  $A$  puede representarse como sigue (descomposición espectral, [1], p.34)

$$A = \sum_{j=1}^N \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j| \quad (3)$$

donde  $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_N\rangle$  son vectores propios ortonormales que constituyen una base de  $V$  y los valores propios correspondientes  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$  son números reales distintos y no nulos.

Cualquier vector unitario  $|b\rangle$  de  $V$  puede expresarse como

$$|b\rangle = \sum_{j=1}^N \beta_j |u_j\rangle \quad (4)$$

en la base de los vectores propios de  $A$ . El problema planteado es el cálculo de un vector unitario

$$|x\rangle = \sum_{k=1}^N \alpha_k |u_k\rangle \quad (5)$$

definido que satisface (2). Según (3) y (5) y por ortonormalidad de los vectores  $|u_i\rangle$

$$A|x\rangle = \sum_{j=1}^N \lambda_j |u_j\rangle \langle u_j | \left( \sum_{k=1}^N \alpha_k |u_k\rangle \right) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \alpha_j |u_j\rangle .$$

Por tanto, según (2)

$$\frac{1}{C} \cdot A|x\rangle = \frac{1}{C} \cdot \sum_{j=1}^N \lambda_j \alpha_j |u_j\rangle = \sum_{j=1}^N \beta_j |u_j\rangle . \quad (6)$$

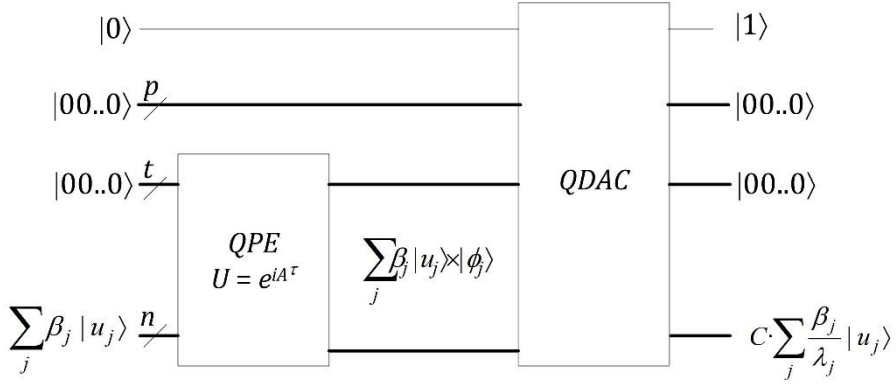
De (6) se deduce que

$$\alpha_j = C \cdot \frac{\beta_j}{\lambda_j}, j = 1 \text{ to } N, \quad (7)$$

y, por tanto, según (5)

$$|x\rangle = C \cdot \sum_{j=1}^N \frac{\beta_j}{\lambda_j} |u_j\rangle . \quad (8)$$

En la Fig.2 se muestra la estructura de un circuito que calcula la relación (8). Consta de cuatro registros y se supone que el primero se ha preparado en el estado  $|b\rangle$  que, según (4), puede expresarse en la base de los estados propios. Los otros se preparan en el estado  $|00\dots 0\rangle$ . A continuación, se describe la función de los dos bloques de la Fig.2.



**Figura 2** Diagrama de bloques

### 2.1 QPE: cálculo de los valores propios

El operador  $QPE(A, \tau)$  ejecuta el algoritmo de estimación de la fase (*Quantum Phase Estimation*, [1], Sec.7.4) aplicado al operador unitario

$$U = e^{iA\tau}, \quad (9)$$

donde  $\tau$  es un parámetro real positivo. De la descomposición espectral (3) se deduce que

$$U = \sum_{j=1}^N e^{i\lambda_j \tau} |u_j\rangle\langle u_j|. \quad (10)$$

Por tanto,  $U$  tiene los mismos vectores propios que  $A$  y los valores propios correspondientes son  $\{e^{i\lambda_j \tau}\}$ . El algoritmo de estimación de la fase aplicado al vector propio  $|u_j\rangle$  ejecuta la siguiente operación:

$$|u_j\rangle \times |00\dots 0\rangle \xrightarrow{QPE} |u_j\rangle \times |\phi_j\rangle, \quad (11)$$

donde el segundo registro consta de  $t$  qubits y su estado final  $|\phi_j\rangle$  define un entero, representado con  $t$  bits, tal que

$$\phi_j \equiv \frac{2^t (\lambda_j \tau \bmod 2\pi)}{2\pi}. \quad (12)$$

Se elige  $\tau$  de tal manera que

$$-\pi/2 \leq \lambda_j \tau < \pi/2, \quad (13)$$

con lo cual

$$-2^{t-1} \leq \frac{2^t \lambda_j \tau}{2\pi} < 2^{t-1}, \quad (14)$$

y se interpreta  $\phi_j$  como la representación en complemento a 2, con  $t$  bits, de un entero proporcional a  $\lambda_j$ .

La relación (9), entre  $A$  y  $U$ , es similar a la relación entre el hamiltoniano de un sistema físico (un operador hermitiano) y el operador unitario que describe la evolución de este sistema en función del tiempo ([1], Equ.2.46), motivo por el cual esta técnica de cálculo se conoce como *simulación hamiltoniana*.

Para el cálculo del operador  $U$ , sin utilizar la definición (10) que implicaría el cálculo previo de los vectores y valores propios de  $A$ , se han definido métodos eficientes en el caso de matrices  $A$  con pocos coeficientes no nulos (*sparse matrices*); véase por ejemplo [5]. Una solución, conceptualmente simple, es el uso de la fórmula de Taylor:

$$e^{iA\tau} = \sum_k \frac{1}{k!} (iA\tau)^k. \quad (15)$$

### Ejemplo1

Considérese el operador definido por la matriz

$$A = \begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{bmatrix}$$

en la base natural. El programa `nota3_1.py` calcula la relación (15) truncada con  $\tau = 0.25$  y  $k \leq 50$ . Se obtiene la siguiente matriz  $U$ :

$$\begin{bmatrix} [0.93814834+0.24482412j & -0.24482412+0.j] \\ [0.24482412+0.j & 0.93814834-0.24482412j] \end{bmatrix}$$

El algoritmo de estimación de la fase se describe en [1], Sec.7.4.

De las relaciones (4) y (11) se deduce, por linealidad, que el circuito *QPE* ejecuta la siguiente operación:

$$|b\rangle \times |00\dots 0\rangle = \sum_{j=1}^N \beta_j |u_j\rangle \times |00\dots 0\rangle \xrightarrow{QPE} \sum_{j=1}^N \beta_j |u_j\rangle \times |\phi_j\rangle. \quad (16)$$

## 2.2 QDAC: inversión de los valores propios

Al estado final de la operación (16) se aplica un operador QDAC funcional (Nota2) con

$$f(\phi_j) = \text{int}\left(\frac{2^s}{\phi_j}\right), \quad \phi_j \neq 0, \quad (17)$$

donde el parámetro  $s$  se elije de tal manera que

$$\left\lfloor \frac{2^s}{\phi_j} \right\rfloor \geq 1,$$

con lo cual, según (14),  $2^s \geq 2^{t-1}$ , es decir,

$$s \geq t-1.$$

Por otra parte,

$$-2^s \leq f(\phi_j) \leq 2^s,$$

con lo cual,  $f(\phi_j)$  es un entero, representado con  $s+2$  bits en complemento a 2, y aproximadamente proporcional a  $1/\phi_j$  ( $\phi_j \neq 0$ ).

El operador  $T^+$  incluido en el operador QDAC (Nota2, Fig.2) es  $QPE^+$ . La operación ejecutada por el operador QDAC es (Nota2, Equ.18)

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \beta_j |u_j\rangle \times |\phi_j\rangle \times |00 \dots 0\rangle \times |0\rangle &\xrightarrow{QDAC} K \cdot \sum_{j=1}^N \beta_j f(\phi_j) |u_j\rangle \times |00 \dots 0\rangle \times |00 \dots 0\rangle \times |1\rangle \\ &= C \cdot \sum_{j=1}^N \frac{\beta_j}{\phi_j} |u_j\rangle \times |00 \dots 0\rangle \times |00 \dots 0\rangle \times |1\rangle, \end{aligned} \quad (18)$$

donde  $\phi_j \cong \lambda_j$ , es decir aproximadamente la relación (8). Los factores  $K$  y  $C$  normalizan los estados correspondientes.

### Ejemplo 2

El programa `nota3_2.py` simula el circuito de la Fig.2 con la matriz  $A$  del ejemplo 1. El operador  $U_f(t, p)$  que genera el ángulo de rotación  $\theta$  (Nota2, Fig.2) se define a partir de una tabla de la verdad que, a un vector de  $t$  bits  $(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_t)$ , asocia un vector de  $p$  bits  $(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p)$ , tal que, en complemento a 2,

$$2 \cdot \sin^{-1}(2^s/\phi) \cong \theta_1 \theta_2 \theta_3 \dots, \theta_p,$$

con  $s = t+1$ . Véanse algunos resultados de la ejecución del programa con  $t = 4$  y  $p = 5$ . Recuérdese que se debe repetir la simulación hasta que la medición del qubit 5 dé como resultado 1.

Con  $|b\rangle = |0\rangle$ , el resultado es

```
measurements:
q(0),q(1),q(2),q(3),q(6),q(7),q(8),q(9),q(10),q(5)=0000000001

qubits: (cirq.LineQubit(4),)
output vector: 0.707|0⟩ - 0.707j|1⟩
```

Se confirma que los qubits 0 a 3 y 6 a 10 han vuelto a su estado inicial. La medición del qubit 5 da como resultado 1, y el qubit 4 está en el estado  $0.707|0\rangle - 0.707i|1\rangle$ , es decir, aproximadamente

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{-i}{\sqrt{2}}|1\rangle.$$

Efectivamente

$$\begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} = \sqrt{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Con  $|b\rangle = |1\rangle$ , el resultado es

```
output vector: 0.707j|0⟩ - 0.707|1⟩
```

es decir, aproximadamente

$$\frac{i}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{-1}{\sqrt{2}}|1\rangle.$$

Efectivamente

$$\begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} i \\ -1 \end{bmatrix} = \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Con  $|b\rangle = H|0\rangle = |+\rangle$ , el resultado es

```
output vector: (0.5+0.5j)|0⟩ + (-0.5-0.5j)|1⟩
```

es decir,

$$\frac{1+i}{2}|0\rangle + \frac{-1-i}{2}|1\rangle.$$

Efectivamente

$$\begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{bmatrix} \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1+i \\ -1-i \end{bmatrix} = \sqrt{2} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}.$$

Con  $|b\rangle = H|1\rangle = |-\rangle$ , el resultado es

output vector:  $(0.5-0.5j)|0\rangle + (0.5-0.5j)|1\rangle$

es decir,

$$\frac{1-i}{2}|0\rangle + \frac{1-i}{2}|1\rangle.$$

Efectivamente

$$\begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{bmatrix} \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1-i \\ 1-i \end{bmatrix} = \sqrt{2} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}.$$

Con  $|b\rangle = R_x(2 \cdot \arccos(0.924))|0\rangle = 0.924|0\rangle - 0.383i|1\rangle$ , el resultado es

output vector:  $0.924|0\rangle - 0.383j|1\rangle$

Efectivamente

$$\begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.924 \\ -0.383i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.307 \\ -0.541i \end{bmatrix} = \sqrt{2} \begin{bmatrix} 0.924 \\ -0.383i \end{bmatrix}.$$

El estado  $0.924|0\rangle - 0.383i|1\rangle$  es un vector propio de  $A$  con valor propio igual a  $2^{0.5}$ .



## Referencias

- [1] J.P.Deschamps, Computación Cuántica, Marcombo, Barcelona, 2023.
- [2] A.W. Harrow, A. Hassidim, S. Lloyd, Quantum algorithm for linear systems of equations, Phys. Rev. Lett. 103(15) (2009) 150502.
- [3] G. Brassard, P. Hoyer, M. Mosca, A. Tapp, Quantum amplitude amplification and estimation, Contemp. Math. 305 (2002) 53–74.
- [4] I. Cong, L. Duan, Quantum discriminant analysis for dimensionality reduction and classification, New J. Phys. 18(7) (2016) 073011.
- [5] D.W. Berry, G. Ahokas, R. Cleve, and B.C. Sanders. Efficient Quantum Algorithms for Simulating Sparse Hamiltonians. Comm. Math. Phys., 270(2):359–371, 2007. arXiv:quant-ph/0508139.