科学计算中的量子算法：厄米矩阵函数

安冬

北京大学北京国际数学研究中心（BICMR）

andong@bicmr.pku.edu.cn

24-25 学年第 2 学期

大纲

-

厄米矩阵函数

$$A = A^\dagger, \quad A = V\Lambda V^\dagger = \sum \lambda_j \left| v_j \right\rangle \left\langle v_j \right|$$

厄米矩阵函数通过特征值变换来定义：

$$A = V \operatorname{diag}(\lambda_j) V^\dagger \quad \to \quad f(A) = V \operatorname{diag}(f(\lambda_j)) V^\dagger$$

例子：

- Chebyshev 多项式
- 线性方程组: $f(x) = \frac{1}{x}$
- 哈密顿量模拟: $f(x) = e^{-ixt}$
- ……

厄米矩阵函数：主要结果

Theorem

设 A 是一个厄米矩阵，满足 $\|A\| \leq 1$，U_A 是 A 的一个 $(1, a, 0)$-*block-encoding*, $p(x)$ 是一个实系数多项式，满足

1. $deg(p(x)) = d$,
2. $|p(x)| \leq 1, \quad \forall x \in [-1, 1]$.

那么，存在一个量子算法，可以构造矩阵函数 $p(A)$ 的一个 $(1, a+1, 0)$-*block-encoding*，同时该算法关于 U_A 的访问复杂度为

$$\mathcal{O}(d).$$

Toy example：一维 Chebyshev 多项式

Chebyshev 多项式：

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad T_{k+1}(x) = 2xT_k(x) - T_{k-1}(x),$$

$$T_k(\cos\theta) = \cos(k\theta)$$

- 正交性（带 $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 权重）
- 近似最优的 minimax 逼近

Toy example：一维 Chebyshev 多项式

考虑二维酉矩阵（记 $\theta = \arccos\lambda$）

$$O = \begin{pmatrix} \lambda & -\sqrt{1-\lambda^2} \\ \sqrt{1-\lambda^2} & \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

$$O^k = \begin{pmatrix} \cos(k\theta) & -\sin(k\theta) \\ \sin(k\theta) & \cos(k\theta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_k(\lambda) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

- $T_k(\lambda)$ 的一个 $(1,1,0)$-block-encoding

矩阵情形 $T_k(A)$：对于每一个特征值，找到对应的二维不变子空间

量子比特化（Qubitization）

假设 U_A 是厄米矩阵 A 的厄米 block-encoding ($U_A = U_A^\dagger$).

$$U_A\left|0\right\rangle\left|v_j\right\rangle = \left|0\right\rangle A\left|v_j\right\rangle + * = \lambda_j\left|0\right\rangle\left|v_j\right\rangle + \sqrt{1-\lambda_j^2}\left|\perp_j\right\rangle$$

- $\Pi\left|\perp_j\right\rangle = 0$, $\Pi = \left|0\right\rangle\left\langle 0\right| \otimes I$

再作用一次 U_A:

$$U_A^2\left|0\right\rangle\left|v_j\right\rangle = \lambda_j(\lambda_j\left|0\right\rangle\left|v_j\right\rangle + \sqrt{1-\lambda_j^2}\left|\perp_j\right\rangle) + U_A\sqrt{1-\lambda_j^2}\left|\perp_j\right\rangle$$

$$U_A\left|\perp_j\right\rangle = \sqrt{1-\lambda^2}\left|0\right\rangle\left|v_j\right\rangle - \lambda_j\left|\perp_j\right\rangle.$$

不变子空间: $\mathcal{H}_j = \mathrm{span}\left\{\left|0\right\rangle\left|v_j\right\rangle, \left|\perp_j\right\rangle\right\}$.

$$[U_A]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1-\lambda_j^2} \\ \sqrt{1-\lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}, \quad [\Pi]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

量子比特化（Qubitization）

$$[U_A]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1-\lambda_j^2} \\ \sqrt{1-\lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}, \quad [\Pi]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

记

$$Z_\Pi = 2\Pi - 1, \quad [Z_\Pi]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

考虑

$$O = U_A Z_\Pi, \quad [O]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & -\sqrt{1-\lambda_j^2} \\ \sqrt{1-\lambda_j^2} & \lambda_j \end{pmatrix},$$

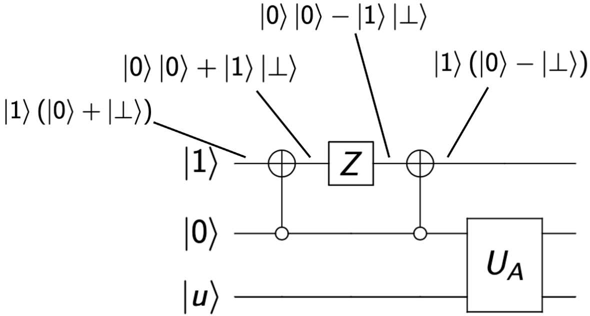
那么

$$[O^k]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} T_k(\lambda_j) & * \\ * & * \end{pmatrix}, \quad O^k = \begin{pmatrix} T_k(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

量子比特化（Qubitization）：量子线路

$$U_A = \begin{pmatrix} A & * \\ * & * \end{pmatrix}, \quad U_A = U_A^\dagger, \quad \Pi = |0\rangle\langle 0| \otimes I, \quad Z_\Pi = 2\Pi - 1$$

$$(U_A Z_\Pi)^k = \begin{pmatrix} T_k(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$



$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

量子比特化（Qubitization）

现在考虑一般的非厄米 U_A（但 A 仍是厄米）

$$U_A \left|0\right\rangle \left|v_j\right\rangle = \lambda_j \left|0\right\rangle \left|v_j\right\rangle + \sqrt{1-\lambda_j^2} \left|\perp_j'\right\rangle$$

- $\Pi \left|\perp_j'\right\rangle = 0$, $\Pi = \left|0\right\rangle \left\langle 0\right| \otimes I$.

注意到 A 是厄米的：

$$U_A^\dagger = \begin{pmatrix} A & * \\ * & * \end{pmatrix}, \quad U_A^\dagger \left|0\right\rangle \left|v_j\right\rangle = \lambda_j \left|0\right\rangle \left|v_j\right\rangle + \sqrt{1-\lambda_j^2} \left|\perp_j\right\rangle$$

- $\Pi \left|\perp_j\right\rangle = 0$

再作用一次 U_A：

$$\left|0\right\rangle \left|v_j\right\rangle = \lambda_j(\lambda_j \left|0\right\rangle \left|v_j\right\rangle + \sqrt{1-\lambda_j^2} \left|\perp_j'\right\rangle) + \sqrt{1-\lambda_j^2}\, U_A \left|\perp_j\right\rangle$$

$$U_A \left|\perp_j\right\rangle = \sqrt{1-\lambda_j^2} \left|0\right\rangle \left|v_j\right\rangle - \lambda_j \left|\perp_j'\right\rangle$$

量子比特化（Qubitization）

$$U_A|0\rangle|v_j\rangle = \lambda_j|0\rangle|v_j\rangle + \sqrt{1-\lambda_j^2}\,|\perp_j'\rangle$$
$$U_A|\perp_j\rangle = \sqrt{1-\lambda_j^2}\,|0\rangle|v_j\rangle - \lambda_j|\perp_j'\rangle$$

- U_A: $\mathcal{H}_j = \mathrm{span}\{|0\rangle|v_j\rangle, |\perp_j\rangle\} \quad \mapsto \quad \mathcal{H}_j' = \mathrm{span}\left\{|0\rangle|v_j\rangle, |\perp_j'\rangle\right\}$
- $U_A^\dagger$: $\mathcal{H}_j' \quad \mapsto \quad \mathcal{H}_j$

$$[U_A]_{\mathcal{H}_j\to\mathcal{H}_j'} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1-\lambda_j^2} \\ \sqrt{1-\lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}, \quad [U_A^\dagger]_{\mathcal{H}_j'\to\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1-\lambda_j^2} \\ \sqrt{1-\lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}$$

对于投影矩阵 $\Pi = |0\rangle\langle 0| \otimes I$, $Z_\Pi = 2\Pi - 1$,

$$[Z_\Pi]_{\mathcal{H}_j} = [Z_\Pi]_{\mathcal{H}_j'} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

量子比特化（Qubitization）

$$\mathcal{H}_j = \text{span}\left\{|0\rangle\,|v_j\rangle\,,|\perp_j\rangle\right\},\ \mathcal{H}'_j = \text{span}\left\{|0\rangle\,|v_j\rangle\,,|\perp'_j\rangle\right\},$$

$$[U_A]_{\mathcal{H}_j\to\mathcal{H}'_j} = [U_A^\dagger]_{\mathcal{H}'_j\to\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1-\lambda_j^2} \\ \sqrt{1-\lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}, \quad [Z_\Pi]_{\mathcal{H}_j} = [Z_\Pi]_{\mathcal{H}'_j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

考虑两步运算的复合，交替作用 U_A 和 $U_A^\dagger$：

$$[U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} \lambda_j & \sqrt{1-\lambda_j^2} \\ \sqrt{1-\lambda_j^2} & -\lambda_j \end{pmatrix}^2, \quad [(U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi)^k]_{\mathcal{H}_j} = \begin{pmatrix} T_{2k}(\lambda_j) & * \\ * & * \end{pmatrix}.$$

结论：$(U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi)^k$ 给出了 $T_{2k}(A)$ 的一个 $(1, a+1, 0)$-block-encoding

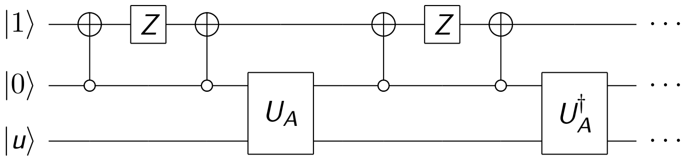
量子比特化（Qubitization）

对于奇次 Chebyshev 多项式，注意到 $\mathcal{H}_j$ 和 $\mathcal{H}_j'$ 中都包含 $|0\rangle\,|v_j\rangle$：

$$
\begin{aligned}
[U_A Z_\Pi (U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi)^k]_{\mathcal{H}_j \to \mathcal{H}_j'} &= \begin{pmatrix} T_{2k+1}(\lambda_j) & * \\ * & * \end{pmatrix}, \\
U_A Z_\Pi (U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi)^k &= \begin{pmatrix} T_{2k+1}(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

量子比特化（Qubitization）：量子线路

$$(U_A^\dagger Z_\Pi U_A Z_\Pi)^k$$



基于 Chebyshev 和 LCU 的矩阵函数算法

对于一般的函数

$$f(A) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j T_j(A)$$

算法:

- 每个 $T_j(A)$： qubitization
- 线性组合： LCU

缺点： 额外的辅助量子比特 $\mathcal{O}(\log J)$ 和复杂控制操作

量子信号处理（Quantum signal processing，QSP）

回到二维矩阵的情形：

$$U(x) = \begin{pmatrix} x & \sqrt{1-x^2} \\ \sqrt{1-x^2} & -x \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad O(x) = U(x)Z$$

我们已经证明了

$$O(x)^k = \begin{pmatrix} T_k(x) & * \\ * & * \end{pmatrix}.$$

考虑

$$U_\Phi(x) = e^{i\phi_0 Z} O(x) e^{i\phi_1 Z} O(x) e^{i\phi_2 Z} \cdots O(x) e^{i\phi_{d-1} Z} O(x) e^{i\phi_d Z} = e^{i\phi_0 Z} \prod_{j=1}^{d} \left[O(x) e^{i\phi_j Z} \right]$$

其中 $\Phi = (\phi_0, \phi_1, \cdots, \phi_d) \in \mathbb{R}^{d+1}$（称为相位参数，phase factors）

量子信号处理（QSP）：复系数多项式

Theorem (QSP)

记

$$O(x) = \begin{pmatrix} x & -\sqrt{1-x^2} \\ \sqrt{1-x^2} & x \end{pmatrix}.$$

那么，存在一组相位参数 $(\phi_0, \phi_1, \cdots, \phi_d) \in \mathbb{R}^{d+1}$ 使得

$$U_\Phi(x) = e^{i\phi_0 Z} \prod_{j=1}^{d} \left[O(x) e^{i\phi_j Z} \right] = \begin{pmatrix} P(x) & -Q(x)\sqrt{1-x^2} \\ Q^*(x)\sqrt{1-x^2} & P^*(x) \end{pmatrix}$$

当且仅当 $P(x), Q(x)$ 是两个满足以下条件的复系数多项式：

1. $deg(P) \leq d$, $deg(Q) \leq d-1$，（约定 $deg(Q) = -1$ 即指 $Q = 0$）
2. P 有 $d \bmod 2$ parity，Q 有 $d-1 \bmod 2$ parity,
3. $|P(x)|^2 + (1-x^2)|Q(x)|^2 = 1, \forall x \in [-1, 1]$.

量子信号处理（QSP）：复系数多项式

$$U_\Phi(x) = e^{i\phi_0 Z}\prod_{j=1}^{d}\left[U(x) Z e^{i\phi_j Z}\right] = \begin{pmatrix} P(x) & -Q(x)\sqrt{1-x^2} \\ Q^*(x)\sqrt{1-x^2} & P^*(x) \end{pmatrix}$$

利用 $Ze^{i\phi Z} = (-i)e^{i(\phi+\pi/2)Z} = ie^{i(\phi-\pi/2)Z}$，可通过修改相位来合并 Z_Π 和 $e^{i\phi Z_\Pi}$

- d 为偶数，则 $\widetilde{\phi}_j = \phi_j + (-1)^j\pi/2, j \neq 0$，$\widetilde{\phi}_0 = \phi_0$
- d 为奇数，则 $\widetilde{\phi}_j = \phi_j + (-1)^j\pi/2, j \neq 0$，会多出一个 Z，但不影响输出的左上角

$$e^{i\widetilde{\phi}_0 Z}\prod_{j=1}^{d}\left[U(x) e^{i\widetilde{\phi}_j Z}\right] = \begin{pmatrix} P(x) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

复系数多项式：Qubitization

考虑厄米矩阵 A 和满足条件的多项式 $P(x)$，根据 qubitization，

- d 为偶数：

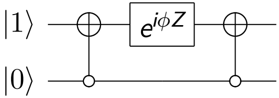
$$e^{i\widetilde{\phi}_0 Z_\Pi} \prod_{j=1}^{d/2} \left[U_A^\dagger e^{i\widetilde{\phi}_{2j-1} Z_\Pi} U_A e^{i\widetilde{\phi}_{2j} Z_\Pi} \right] = \begin{pmatrix} P(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

- d 为奇数：

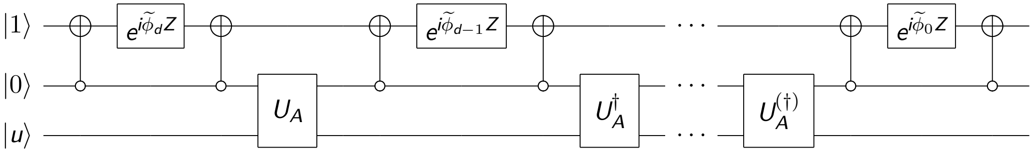
$$e^{i\widetilde{\phi}_0 Z_\Pi} U_A e^{i\widetilde{\phi}_1 Z_\Pi} \prod_{j=1}^{(d-1)/2} \left[U_A^\dagger e^{i\widetilde{\phi}_{2j} Z_\Pi} U_A e^{i\widetilde{\phi}_{2j+1} Z_\Pi} \right] = \begin{pmatrix} P(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

复系数多项式：量子线路

$e^{i\phi Z_\Pi}$ 的实现：$\Pi = |0\rangle\langle 0| \otimes I, \quad Z_\Pi = 2\Pi - I$



算法：



- 输出 $P(A)$ 的 $(1, a+1, 0)$-block-encoding
- 访问复杂度：$d+1$

复系数多项式

两个限制:

- 需要存在多项式 Q 使得 $|P|^2 + (1 - x^2)|Q|^2 = 1$
- 需要满足 parity（奇偶性）假设

量子信号处理（QSP）：实系数多项式

Theorem (实系数多项式 QSP)

记

$$O(x) = \begin{pmatrix} x & -\sqrt{1-x^2} \\ \sqrt{1-x^2} & x \end{pmatrix}.$$

给定一个实系数多项式 $p(x)$，满足

1. $deg(p) = d$,
2. p 有 $d \bmod 2$ $parity$,
3. $|p(x)| \leq 1, \forall x \in [-1, 1]$.

那么，存在两个复系数多项式 $P(x), Q(x)$ 和相位参数 $(\phi_0, \phi_1, \cdots, \phi_d) \in \mathbb{R}^{d+1}$，使得

$$U_\Phi(x) = e^{i\phi_0 Z} \prod_{j=1}^{d} \left[O(x) e^{i\phi_j Z} \right] = \begin{pmatrix} P(x) & -Q(x)\sqrt{1-x^2} \\ Q^*(x)\sqrt{1-x^2} & P^*(x) \end{pmatrix}$$

且 $Re(P(x)) = p(x)$.

实系数多项式

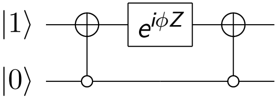
考虑厄米矩阵 A 和 d 次实系数多项式 $p(x)$，根据 qubitization（简单起见这里我们仅讨论 d 为偶数）：

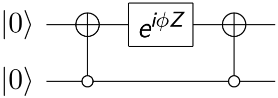
$$e^{i\widetilde{\phi}_0 Z_\Pi} \prod_{j=1}^{d/2} \left[U_A^\dagger e^{i\widetilde{\phi}_{2j-1} Z_\Pi} U_A e^{i\widetilde{\phi}_{2j} Z_\Pi} \right] = \begin{pmatrix} P(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

$$e^{-i\widetilde{\phi}_0 Z_\Pi} \prod_{j=1}^{d/2} \left[U_A^\dagger e^{-i\widetilde{\phi}_{2j-1} Z_\Pi} U_A e^{-i\widetilde{\phi}_{2j} Z_\Pi} \right] = \begin{pmatrix} P^*(A) & * \\ * & * \end{pmatrix}$$

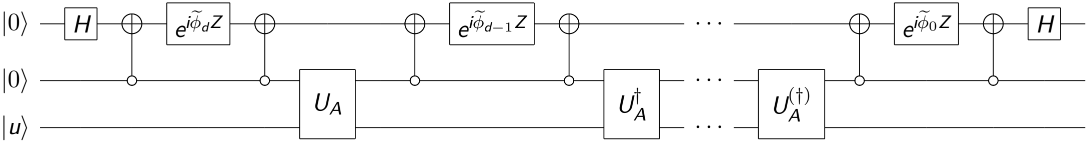
实系数多项式：量子线路

$e^{\pm i\phi Z_\Pi}$ **的实现**：$\Pi = |0\rangle\langle 0| \otimes I, \quad Z_\Pi = 2\Pi - I$





算法：



- 输出 $p(A)$ 的 $(1, a+1, 0)$-block-encoding
- 访问复杂度：$d + 1$

矩阵函数的量子算法

对于一般的 d 次复系数多项式 $f(x)$（只要求 $|f(x)| \leq 1$）：

1. 将其分解为实部和虚部：$f(x) = f_{\text{real}}(x) + f_{\text{imag}}(x)$
2. 将实部和虚部进一步按奇偶性分解：

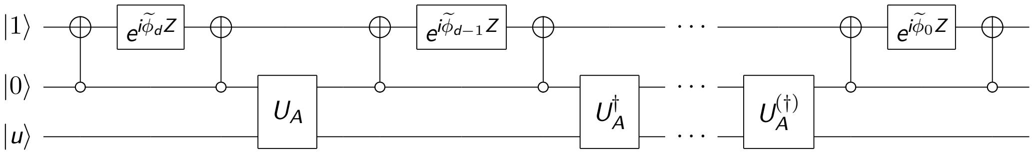
$$f(x) = f_{\text{real,even}}(x) + f_{\text{real,odd}}(x) + f_{\text{imag,even}}(x) + f_{\text{imag,odd}}(x)$$

3. 用实系数多项式版本的 QSP+qubitization 分别实现 $f_{\text{real,even}}$，$f_{\text{real,odd}}$，$f_{\text{imag,even}}$，$f_{\text{imag,odd}}$
4. 用 LCU 组合起来，实现 $f(x)$ 的 $(1, a+3, 0)$-block-encoding

对于一般的函数 $f(x)$：先构造多项式逼近

小结

d 次矩阵多项式可由 QSP+qubitization 实现，访问复杂度为 $\mathcal{O}(d)$



拓展：

- 相位参数的求解
- 其他形式的“类 QSP”

阅读

阅读:

- LL: Chapter 7