

科学计算中的量子算法

安冬

北京大学北京国际数学研究中心 (BICMR)

andong@bicmr.pku.edu.cn

24-25 学年第 2 学期

课程基本信息

- ▶ 课程主页: <https://dong-an.github.io/QASC/>
- ▶ 先修课程: 高等代数, 概率论
- ▶ 上课时间地点: 三教 406, 每周周二 7-8 节, 单周周四 5-6 节
- ▶ 通知: 第 2 周周二 (2 月 25 日) 课程暂停一次, 第 4 周周四 (3 月 13 日) 5-6 节补课 (地点另行通知)
- ▶ 任课教师: 安冬 (andong@bicmr.pku.edu.cn)
- ▶ 答疑时间地点: 每周周四 7-8 节, 镜春园 78 号院 78406-2

课程参考资料

- ▶ Lin Lin, Lecture Notes on Quantum Algorithms for Scientific Computation. [arXiv:2201.08309](#)
- ▶ Michael Nielsen, Issac Chuang, Quantum computation and quantum information. 10th anniversary edition, ISBN-13: 978-1107002173
- ▶ Andrew Childs, Lecture Notes on Quantum Algorithms. <https://www.cs.umd.edu/~amchilds/qa/qa.pdf>
- ▶ Quantum algorithm zoo: <https://quantumalgorithmzoo.org/>
- ▶ Online platforms: Qiskit, Cirq, Classiq

课程评估

作业 60% (6 次, 每次 10%) + 期末课程项目 40%

作业:

- ▶ 独立完成, 考察对课程讲授内容的理解与思考
- ▶ 截止日期: 周二上课, 暂定第 4、6、8、11、13、15 周
- ▶ 迟交、补交: 每迟一天减 2 分

课程评估

期末课程项目：

- ▶ 选取与本课程课堂讲授主题相关的优秀文献进行阅读学习，并提交课程论文
 - ▶ 文章参考列表将于第 8 周左右发布，选题互不重复
- ▶ 独立或 2 人小组为单位
- ▶ 截止时间：第 17 周周日（6 月 15 日）23 点 59 分，**不接受迟交**
- ▶ 内容要求：
 - ▶ 基本要求：正确完整地概括相关主题及文献的核心内容，正确地重现核心结果的推导思路、关键步骤及重要数值试验，清晰的论文写作，符合一般的学术道德与学术规范等
 - ▶ 额外内容：原创性结果与思考，包括但不限于对已有理论结果进行新的数值验证与探索，改进已有结果或推广其应用场景，对可能的研究方向探索等
- ▶ 格式要求：英文写作，长度不作严格要求，但不宜过短或过长（11 号字、2.5 厘米页边距下，建议 15 页左右）

量子计算

"If you want to make a simulation of nature, you' d better make it quantum mechanical, and by golly it' s a wonderful problem, because it doesn' t look so easy." [Feynman (1982)]

什么是量子计算？

- ▶ 基于量子力学的原理进行计算的新型计算模式

历史:

- ▶ 物理学：理解量子力学、兴趣驱使、更加自然的方法
- ▶ 计算机科学：硬件摩尔定律、算法效率
- ▶ 信息学：通信资源、噪声
- ▶ 密码学：破解经典密码、量子密码

现状

- ▶ 硬件（实验）方面
- ▶ 算法方面

量子计算：硬件（实验）方面

从含噪声中尺度量子（Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ)）时代迈向早期全容错（Early fault-tolerant）时代

- ▶ 量子霸权（Quantum supremacy）
- ▶ 量子错误纠正（Quantum error correction）

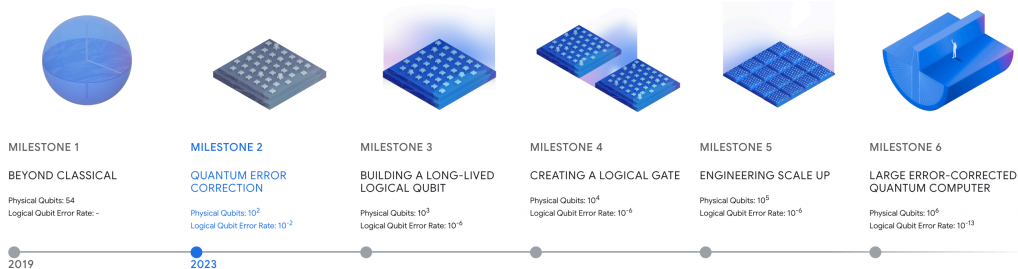
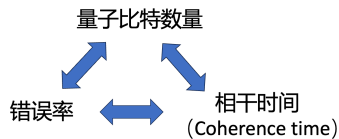


Figure: Credit: Google Quantum AI

量子计算：算法方面

广泛的探索

- ▶ 密码学，离散数学，组合优化等：Shor 算法
- ▶ 量子物理的问题
 - ▶ 求解薛定谔方程（哈密顿量模拟，Hamiltonian simulation）
 - ▶ 开放量子系统，量子系统的基态，Gibbs 态制备，Green 函数等
- ▶ 经典计算数学的问题：线性方程组，微分方程，优化，控制，数据科学等

量子优势

- ▶ 期待：量子 $\text{poly} \log(N)$ vs 经典 $\text{poly}(N)$
- ▶ 基本尚未实现

课程主题

- ▶ 理论
- ▶ 仅考虑全容错、大规模、稳定的量子计算机
- ▶ 侧重数学方面：
 - ▶ 主要关心计算数学中的问题
 - ▶ 侧重数学思想

课程大纲

1. 量子力学与量子算法基础：

- ▶ 量子力学的基本原理和数学表达方法，量子态、量子比特、门、变换、测量、量子电路等基本概念，量子态不可复制定理，通用量子门集合^{*}，量子与经典计算电路的联系^{*}，Deutsch-Jozsa 算法^{*} 等

2. 量子数值线性代数基础

- ▶ 基本对象：高维向量的量子态表示，高维矩阵的块编码（block-encoding）表示，简单量子态的制备（Grover-Rudolph 算法），简单矩阵的块编码构造^{*}
- ▶ 基本算法：计算向量内积的量子算法（Hadamard test），矩阵向量乘的量子算法，向量或矩阵之间加法的量子算法（线性酉组合算法），矩阵乘法的量子算法等

课程大纲

3. 量子算法基元 (primitive)

- ▶ 量子傅立叶变换算法, 量子素因数分解算法 (Shor 算法) *, 量子搜索算法 (Grover 算法), 量子振幅估计与放大算法, 量子相位估计算法, 薛定谔方程的量子算法

4. 线性方程组的量子算法

- ▶ Harrow-Hassidim-Lloyd 算法, 基于线性酉组合的量子算法

5. 线性微分方程的量子算法

- ▶ 基于线性方程组的量子微分方程算法 (欧拉法、多步法 *, 泰勒展开法 *, 谱方法 * 等), 基于线性酉组合的量子微分方程算法

课程大纲

6. 矩阵函数的量子算法

- ▶ 量子化 (qubitization), 切比雪夫多项式的量子算法, 量子信号处理, 厄米矩阵函数的量子算法, 量子奇异值变换算法, 矩阵函数量子算法的应用 (薛定谔方程、线性方程组、特征向量问题、哈密顿量的虚时演化 * 等)

7. 特征值问题的量子算法

- ▶ 绝热量子计算, 离散绝热量子计算 *, 变分量子算法基础

8. 进阶量子科学计算算法选讲 *