6.2 作为量子仿真的量子搜索——习题与解答

DanX, and Shan Jin *

练习 6.7 (指数算符的电路实现验证)**.** 证明图 *6.4* 与图 *6.5* 所示线路分别实现

$$e^{-i|x\rangle\langle x|\Delta t}, \qquad e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t}.$$

图 6.4

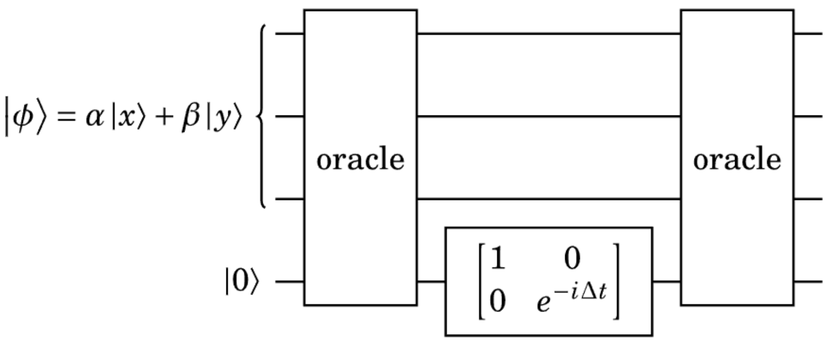
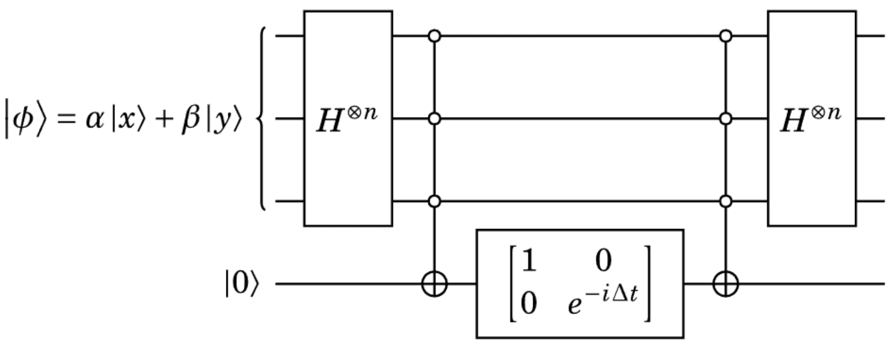


图 6.5



解答. 本题的核心是利用「投影算符的幂等性」来化简指数，并逐步跟踪量子线路对状态的作用。

(1) 证明图 6.4 实现 $e^{-i|x\rangle\langle x|\Delta t}$

设目标空间是两维：有一组正交归一基

$$|x\rangle\,, \quad |y\rangle\,, \qquad \langle x|y\rangle = 0,$$

并假定我们只关心这两维张成的子空间。

*jinshan@tgqs.net

(a) 先直接化简指数算符。 $|x\rangle\langle x|$ 是一个投影算符，满足

$$(|x\rangle\langle x|)^2 = |x\rangle\langle x|x\rangle\langle x| = |x\rangle\langle x|.$$

令

$$P := |x\rangle\langle x|,$$

则

$$P^k = P, \quad k \geq 1.$$

因此

$$\begin{aligned} e^{-iP\Delta t} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-i\Delta t)^k}{k!} P^k \\ &= I + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-i\Delta t)^k}{k!} P \\ &= I + \left(e^{-i\Delta t} - 1\right) P \\ &= I + (e^{-i\Delta t} - 1)|x\rangle\langle x|. \end{aligned}$$

在 $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ 基下，

$$I = |x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y|,$$

所以

$$\begin{aligned} e^{-i|x\rangle\langle x|\Delta t} &= |x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y| + (e^{-i\Delta t} - 1)|x\rangle\langle x| \\ &= e^{-i\Delta t}|x\rangle\langle x| + |y\rangle\langle y|. \end{aligned}$$

这说明指数算符对基矢的作用为

$$|x\rangle \mapsto e^{-i\Delta t}|x\rangle, \qquad |y\rangle \mapsto |y\rangle.$$

对任意叠加态

$$|\phi\rangle = \alpha|x\rangle + \beta|y\rangle,$$

有

$$e^{-i|x\rangle\langle x|\Delta t}|\phi\rangle = \alpha e^{-i\Delta t}|x\rangle + \beta|y\rangle.$$

(b) 跟踪图 6.4 的线路。 线路结构（只关注逻辑）是：

1. 用 oracle 标记是否为 $|x\rangle$，将信息写入辅助比特；2. 在辅助比特上加一个相位门 $P_{-i\Delta t} = |0\rangle\langle 0| + e^{-i\Delta t}|1\rangle\langle 1|$；3. 再用 oracle 把标记"擦掉"。

设输入为 $|\phi\rangle|0\rangle = (\alpha|x\rangle + \beta|y\rangle)|0\rangle$。这里 ancilla 初态为 $|0\rangle$。

- **第一次 oracle：**令 oracle 满足

  $$O|x\rangle|0\rangle = |x\rangle|1\rangle, \quad O|y\rangle|0\rangle = |y\rangle|0\rangle.$$

  则

  $$O(\alpha|x\rangle + \beta|y\rangle)|0\rangle = \alpha|x\rangle|1\rangle + \beta|y\rangle|0\rangle.$$

- **相位门 $P_{-i\Delta t}$ 作用在辅助比特：**

  $$P_{-i\Delta t}|0\rangle = |0\rangle, \quad P_{-i\Delta t}|1\rangle = e^{-i\Delta t}|1\rangle.$$

  因此

  $$(I \otimes P_{-i\Delta t})(\alpha|x\rangle|1\rangle + \beta|y\rangle|0\rangle) = \alpha e^{-i\Delta t}|x\rangle|1\rangle + \beta|y\rangle|0\rangle.$$

- **第二次 oracle：**再次作用同一个 O：

$$O|x\rangle|1\rangle=|x\rangle|0\rangle,\quad O|y\rangle|0\rangle=|y\rangle|0\rangle,$$

所以

$$O(\alpha e^{-i\Delta t}|x\rangle|1\rangle+\beta|y\rangle|0\rangle)=\alpha e^{-i\Delta t}|x\rangle|0\rangle+\beta|y\rangle|0\rangle.$$

因此线路输出为

$$\big(\alpha e^{-i\Delta t}|x\rangle+\beta|y\rangle\big)|0\rangle=e^{-i|x\rangle\langle x|\Delta t}|\phi\rangle\otimes|0\rangle.$$

辅助比特回到 $|0\rangle$，主系统恰好经历了 $e^{-i|x\rangle\langle x|\Delta t}$，与前面算符分析一致。

(2) 证明图 6.5 实现 $e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t}$

图 6.5 的结构大致是：

1. 对前 n 个数据比特做 $H^{\otimes n}$；2. 用“多控非门”判断数据寄存器是否在 $|0^n\rangle$，控制一个辅助比特；3. 在辅助比特上加相位门 $P_{-i\Delta t}$；4. 再来一次同样的多控非门，把标记擦掉；5. 最后对前 n 个比特再做一次 $H^{\otimes n}$。

目标是证明它等价于

$$e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t},\qquad|\psi\rangle=H^{\otimes n}|0^n\rangle.$$

(a) 直接化简算符 $e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t}$。 同样利用投影算符幂等性。记

$$Q:=|\psi\rangle\langle\psi|.$$

则

$$Q^k=Q,\quad k\geq1.$$

于是

$$\begin{aligned}e^{-iQ\Delta t}&=I+(e^{-i\Delta t}-1)Q\\&=I+(e^{-i\Delta t}-1)|\psi\rangle\langle\psi|.\end{aligned}$$

稍后会看到线路对任意输入 $|\phi\rangle|0\rangle$ 的作用正好给出这一形式。

(b) 将线路写成算符积，并逐步展开。 把图 6.5 中 5 个操作按顺序对应到算符（作用在 $\mathcal{H}^{\otimes n}\otimes\mathbb{C}^2$）：

- $\mathcal{H}_1=H^{\otimes n}\otimes I$；
- $\mathcal{H}_2=I^{\otimes n}\otimes I-|0^n\rangle\langle0^n|\otimes(I-X)$ （这是“若前 n 比特为 $|0^n\rangle$ 则翻转 ancilla”的算符形式）；
- $\mathcal{H}_3=I^{\otimes n}\otimes P_{-i\Delta t}$；
- $\mathcal{H}_4=\mathcal{H}_2$（第二次多控非门）；
- $\mathcal{H}_5=H^{\otimes n}\otimes I$。

总算符为

$$U_{\text{circuit}}=\mathcal{H}_5\mathcal{H}_4\mathcal{H}_3\mathcal{H}_2\mathcal{H}_1.$$

注意 $|\psi\rangle=H^{\otimes n}|0^n\rangle$，因此

$$|0^n\rangle\langle0^n|\,H^{\otimes n}=|0^n\rangle\langle\psi|.$$

先看前两步 $\mathcal{H}_2\mathcal{H}_1$：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_2\mathcal{H}_1 &= \big(I^{\otimes n}\otimes I - |0^n\rangle\langle 0^n|\otimes(I-X)\big)\big(H^{\otimes n}\otimes I\big)\\ &= H^{\otimes n}\otimes I - |0^n\rangle\langle 0^n| H^{\otimes n}\otimes(I-X)\\ &= H^{\otimes n}\otimes I - |0^n\rangle\langle\psi|\otimes(I-X).\end{aligned}$$

再作用相位门 $\mathcal{H}_3$：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_3(\mathcal{H}_2\mathcal{H}_1) &= \big(I^{\otimes n}\otimes P_{-i\Delta t}\big)\big(H^{\otimes n}\otimes I - |0^n\rangle\langle\psi|\otimes(I-X)\big)\\ &= H^{\otimes n}\otimes P_{-i\Delta t} - |0^n\rangle\langle\psi|\otimes P_{-i\Delta t}(I-X).\end{aligned}$$

再作用用第二个多控非门 $\mathcal{H}_4$：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_4\big(\mathcal{H}_3\mathcal{H}_2\mathcal{H}_1\big) &= \big(I^{\otimes n}\otimes I - |0^n\rangle\langle 0^n|\otimes(I-X)\big)\big(H^{\otimes n}\otimes P_{-i\Delta t} - |0^n\rangle\langle\psi|\otimes P_{-i\Delta t}(I-X)\big)\\ &= H^{\otimes n}\otimes P_{-i\Delta t} - |0^n\rangle\langle\psi|\otimes P_{-i\Delta t}(I-X)\\ &\quad - |0^n\rangle\langle 0^n| H^{\otimes n}\otimes(I-X)P_{-i\Delta t} + |0^n\rangle\langle 0^n|0^n\rangle\langle\psi|\otimes(I-X)P_{-i\Delta t}(I-X)\\ &= H^{\otimes n}\otimes P_{-i\Delta t} - |0^n\rangle\langle\psi|\otimes P_{-i\Delta t}(I-X)\\ &\quad - |0^n\rangle\langle\psi|\otimes(I-X)P_{-i\Delta t} + |0^n\rangle\langle\psi|\otimes(I-X)P_{-i\Delta t}(I-X),\end{aligned}$$

这里使用了 $\langle 0^n| H^{\otimes n} = \langle\psi|$ 以及 $\langle 0^n|0^n\rangle = 1$。

最后再作用 $\mathcal{H}_5 = H^{\otimes n}\otimes I$，注意

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

于是得到

$$\begin{aligned}U_{\text{circuit}} &= I^{\otimes n}\otimes P_{-i\Delta t} - |\psi\rangle\langle\psi|\otimes P_{-i\Delta t}(I-X)\\ &\quad - |\psi\rangle\langle\psi|\otimes(I-X)P_{-i\Delta t} + |\psi\rangle\langle\psi|\otimes(I-X)P_{-i\Delta t}(I-X).\end{aligned}$$

(c) 令最后一比特初态为 $|0\rangle$，计算对 $|\phi\rangle|0\rangle$ 的作用。 我们只关心输入形如 $|\phi\rangle|0\rangle$ 的情况。需要用到下列关系：

$$\begin{aligned}P_{-i\Delta t}|0\rangle &= |0\rangle,\\ P_{-i\Delta t}(I-X)|0\rangle &= |0\rangle - e^{-i\Delta t}|1\rangle,\\ (I-X)P_{-i\Delta t}|0\rangle &= |0\rangle - |1\rangle,\\ (I-X)P_{-i\Delta t}(I-X)|0\rangle &= (1+e^{-i\Delta t})(|0\rangle - |1\rangle).\end{aligned}$$

把它们逐项代入：

$$\begin{aligned}U_{\text{circuit}}\big(|\phi\rangle|0\rangle\big) &= I^{\otimes n}|\phi\rangle\otimes|0\rangle - |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle\otimes\big(|0\rangle - e^{-i\Delta t}|1\rangle\big)\\ &\quad - |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle\otimes\big(|0\rangle - |1\rangle\big) + |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle\otimes(1+e^{-i\Delta t})(|0\rangle - |1\rangle).\end{aligned}$$

把所有 ancilla 为 $|0\rangle$ 的项收集起来（$|1\rangle$ 的系数会相互抵消），可以整理为

$$\begin{aligned}U_{\text{circuit}}\big(|\phi\rangle|0\rangle\big) &= |\phi\rangle|0\rangle + |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle(e^{-i\Delta t}-1)|0\rangle\\ &= \big(I^{\otimes n} + (e^{-i\Delta t}-1)|\psi\rangle\langle\psi|\big)|\phi\rangle\otimes|0\rangle\\ &= e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t}|\phi\rangle\otimes|0\rangle.\end{aligned}$$

因此，该线路在「数据寄存器 + 辅助比特」上实现的正是

$$e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t}\otimes I_{\text{ancilla}},$$

从而完成了对 $e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t}$ 的电路实现验证。 □

练习 6.8 (高阶量子仿真的调用次数估计)**.** 设 *Hamiltonian* 仿真中每一步的局部误差可以做到

$$O(\Delta t^r),$$

其中 $r \geq 2$。证明：要在总演化时间 $t = O(\sqrt{N})$ 内，以常数级精度模拟搜索 *Hamiltonian* H，所需的 *oracle* 调用次数为

$$O\left(N^{\frac{r}{2(r-1)}}\right).$$

说明当 $r \to \infty$ 时，指数趋近于 1/2。

解答. 设我们用 Trotter-Suzuki 之类的分解方法做仿真：

- 总演化时间 $t = \Theta(\sqrt{N})$（连续时间量子搜索的量级）；- 单步仿真时间步长为 Δt；- 因此总步数

$$L = \frac{t}{\Delta t} = O\left(\frac{\sqrt{N}}{\Delta t}\right).$$

(1) 累积误差估计。

若每步的误差是 $O(\Delta t^r)$，最粗略的线性累加估计给出总误差量级

$$\mathrm{Error}_{\mathrm{tot}} = O\big(L\,\Delta t^r\big) = O\left(\frac{\sqrt{N}}{\Delta t}\,\Delta t^r\right) = O\left(\sqrt{N}\,\Delta t^{r-1}\right).$$

为了让总误差保持在常数级（比如 $O(1)$），需要

$$\sqrt{N}\,\Delta t^{r-1} = O(1),$$

所以

$$\Delta t = \Theta\left(N^{-\frac{1}{2(r-1)}}\right).$$

(2) 总步数与 oracle 调用次数。

总步数

$$L = O\left(\frac{\sqrt{N}}{\Delta t}\right) = O\left(\sqrt{N}\;N^{\frac{1}{2(r-1)}}\right) = O\left(N^{\frac{1}{2}+\frac{1}{2(r-1)}}\right).$$

用一个指数写就是

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2(r-1)} = \frac{r}{2(r-1)},$$

故

$$L = O\left(N^{\frac{r}{2(r-1)}}\right).$$

假设每个时间步中需要 $O(1)$ 次 oracle 调用，则 oracle 调用次数同阶，为

$$O\left(N^{\frac{r}{2(r-1)}}\right).$$

(3) 当 $r \to \infty$ 时的极限。

直接计算

$$\lim_{r\to\infty} \frac{r}{2(r-1)} = \lim_{r\to\infty} \frac{1}{2} \cdot \frac{r}{r-1} = \frac{1}{2}.$$

说明随着分解阶数 r 的提高，算法的复杂度指数可以逼近 1/2，也就是无限接近理想的 $O(\sqrt{N})$。

□

练习 6.9 (验证 Bloch 形式的演化算符)**.** *利用习题 4.15 的结果验证书中式 (6.25):*

$$\begin{aligned} U(\Delta t) &= e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t}\, e^{-i|x\rangle\langle x|\Delta t} \\ &= \left(\cos^2\frac{\Delta t}{2} - \sin^2\frac{\Delta t}{2}\,\vec{\psi}\cdot\hat{z}\right) I \\ &\quad - 2i\sin\frac{\Delta t}{2}\left(\cos\frac{\Delta t}{2}\,\frac{\vec{\psi}+\hat{z}}{2} + \sin\frac{\Delta t}{2}\,\frac{\vec{\psi}\times\hat{z}}{2}\right)\cdot\vec{\sigma}, \end{aligned} \tag{6.25}$$

其中 $\vec{\psi}$ 与 $\hat{z}$ 分别是 $|\psi\rangle$、$|x\rangle$ 的 Bloch 向量，$\vec{\sigma} = (X, Y, Z)$。

解答. 在两维子空间 $\operatorname{span}\{|x\rangle, |y\rangle\}$ 中，可以把系统视为一个“有效单比特”，在该比特上使用 Bloch 向量和 Pauli 矩阵的表示。

(1) 用 Bloch 向量表示投影算符。

对归一化纯态 $|\phi\rangle$，记其 Bloch 向量为 $\vec{n}_\phi$（$\|\vec{n}_\phi\| = 1$），则

$$|\phi\rangle\langle\phi| = \frac{1}{2}\big(I + \vec{n}_\phi\cdot\vec{\sigma}\big).$$

因此

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}(I + \vec{\psi}\cdot\vec{\sigma}), \qquad |x\rangle\langle x| = \frac{1}{2}(I + \hat{z}\cdot\vec{\sigma}),$$

其中 $\hat{z} = (0, 0, 1)$ 对应 $|x\rangle$ 的 Bloch 向量。

(2) 写出两个指数算符的 Bloch 形式。

因为 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 与 I 对易，我们有

$$\begin{aligned} e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t} &= \exp\left[-i\frac{\Delta t}{2}(I + \vec{\psi}\cdot\vec{\sigma})\right] \\ &= e^{-i\Delta t/2}\exp\left[-i\frac{\Delta t}{2}\,\vec{\psi}\cdot\vec{\sigma}\right]. \end{aligned}$$

对单比特而言，习题 4.4/4.15（或标准 Bloch 表示）告诉我们

$$e^{-i\frac{\Delta t}{2}\vec{\psi}\cdot\vec{\sigma}} = \cos\frac{\Delta t}{2}\, I - i\sin\frac{\Delta t}{2}\,\vec{\psi}\cdot\vec{\sigma}.$$

所以

$$e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t} = e^{-i\Delta t/2}\left(\cos\frac{\Delta t}{2}\, I - i\sin\frac{\Delta t}{2}\,\vec{\psi}\cdot\vec{\sigma}\right).$$

同理，

$$e^{-i|x\rangle\langle x|\Delta t} = e^{-i\Delta t/2}\left(\cos\frac{\Delta t}{2}\, I - i\sin\frac{\Delta t}{2}\,\hat{z}\cdot\vec{\sigma}\right).$$

把它们记为

$$A = e^{-i|\psi\rangle\langle\psi|\Delta t}, \quad B = e^{-i|x\rangle\langle x|\Delta t}.$$

(3) 计算乘积 $U(\Delta t) = AB$。

令

$$c := \cos\frac{\Delta t}{2}, \quad s := \sin\frac{\Delta t}{2}.$$

则

$$\begin{aligned} A &= e^{-i\Delta t/2}(cI - is\,\vec{\psi}\cdot\vec{\sigma}), \\ B &= e^{-i\Delta t/2}(cI - is\,\hat{z}\cdot\vec{\sigma}). \end{aligned}$$

乘积为

$$U(\Delta t)=AB=e^{-i\Delta t}\big(cI-is\,\vec{\psi}\cdot\vec{\sigma}\big)\big(cI-is\,\hat{z}\cdot\vec{\sigma}\big).$$

先忽略整体相位 $e^{-i\Delta t}$（它只产生全局相位，在物理上无关紧要），只计算括号内部分：

$$(cI-is\,\vec{\psi}\cdot\vec{\sigma})(cI-is\,\hat{z}\cdot\vec{\sigma})=c^2I-ics(\vec{\psi}+\hat{z})\cdot\vec{\sigma}-s^2(\vec{\psi}\cdot\vec{\sigma})(\hat{z}\cdot\vec{\sigma}).$$

在 Pauli 代数中有重要恒等式（习题 4.15 的结论之一）：

$$(\vec{a}\cdot\vec{\sigma})(\vec{b}\cdot\vec{\sigma})=(\vec{a}\cdot\vec{b})I+i(\vec{a}\times\vec{b})\cdot\vec{\sigma}.$$

取 $\vec{a}=\vec{\psi}$、$\vec{b}=\hat{z}$ 得

$$(\vec{\psi}\cdot\vec{\sigma})(\hat{z}\cdot\vec{\sigma})=(\vec{\psi}\cdot\hat{z})I+i(\vec{\psi}\times\hat{z})\cdot\vec{\sigma}.$$

代回去：

$$\begin{aligned}(cI-is\,\vec{\psi}\cdot\vec{\sigma})(cI-is\,\hat{z}\cdot\vec{\sigma})&=c^2I-ics(\vec{\psi}+\hat{z})\cdot\vec{\sigma}\\&\qquad-s^2\big[(\vec{\psi}\cdot\hat{z})I+i(\vec{\psi}\times\hat{z})\cdot\vec{\sigma}\big]\\&=\big(c^2-s^2\,\vec{\psi}\cdot\hat{z}\big)I\\&\qquad-i\Big[cs(\vec{\psi}+\hat{z})+s^2(\vec{\psi}\times\hat{z})\Big]\cdot\vec{\sigma}.\end{aligned}$$

把公共因子 $2s$ 提出来：

$$\begin{aligned}&-i\Big[cs(\vec{\psi}+\hat{z})+s^2(\vec{\psi}\times\hat{z})\Big]\cdot\vec{\sigma}\\&=-2is\left(c\,\frac{\vec{\psi}+\hat{z}}{2}+s\,\frac{\vec{\psi}\times\hat{z}}{2}\right)\cdot\vec{\sigma}.\end{aligned}$$

于是（去掉整体相位后）得到

$$U(\Delta t)=\Big(c^2-s^2\,\vec{\psi}\cdot\hat{z}\Big)\,I-2is\left(c\,\frac{\vec{\psi}+\hat{z}}{2}+s\,\frac{\vec{\psi}\times\hat{z}}{2}\right)\cdot\vec{\sigma},$$

即

$$\begin{aligned}U(\Delta t)=&\left(\cos^2\frac{\Delta t}{2}-\sin^2\frac{\Delta t}{2}\,\vec{\psi}\cdot\hat{z}\right)I\\&-2i\sin\frac{\Delta t}{2}\left(\cos\frac{\Delta t}{2}\,\frac{\vec{\psi}+\hat{z}}{2}+\sin\frac{\Delta t}{2}\,\frac{\vec{\psi}\times\hat{z}}{2}\right)\cdot\vec{\sigma},\end{aligned}$$

这正是式 (6.25) 的形式（差一个整体相位 $e^{-i\Delta t}$，物理上可以忽略），因此验证完毕。 □

练习 6.10 (选取步长使搜索成功概率为一)**.** 证明：通过适当选取时间步长 Δt，可以得到一个用 $O(\sqrt{N})$ 次调用的量子搜索算法，并且在演化结束时的状态恰好是 $|x\rangle$（成功概率为 1）。

解答. 根据本节分析，离散时间仿真每一步的有效演化可以视为在某个 Bloch 轴上的一次旋转。记该旋转的“步进角”为 θ，则连续时间 Hamiltonian 仿真一步的演化算符等价于

$$U_{\text{eff}}(\Delta t)=e^{-iH_{\text{eff}}\Delta t}\approx e^{-i\frac{\theta}{2}\,\hat{n}\cdot\vec{\sigma}},$$

于是在 Bloch 球上每一步旋转角度为 θ。

书中给出了 θ 与 Δt、N 的关系（式 (6.28)）：

$$\cos\frac{\theta}{2}=1-\frac{2}{N}\sin^2\frac{\Delta t}{2}. \tag{6.28}$$

(1) 反推 Δt 与给定 θ 的关系。

由

$$1-\cos\frac{\theta}{2}=\frac{2}{N}\sin^2\frac{\Delta t}{2},$$

得

$$\sin^2\frac{\Delta t}{2}=\frac{N}{2}\Big(1-\cos\frac{\theta}{2}\Big).$$

只要右边在 $[0,1]$ 范围内，就可以取

$$\Delta t=2\arcsin\left(\sqrt{\frac{N}{2}\Big(1-\cos\frac{\theta}{2}\Big)}\right).$$

(2) 选取 θ 使得总旋转角恰好把 $|\psi\rangle$ 送到 $|x\rangle$。

在二维子空间 $\mathrm{span}\{|x\rangle,|y\rangle\}$ 中，初态 $|\psi\rangle$ 与目标态 $|x\rangle$ 在 Bloch 球上的夹角约为 $\Theta(1/\sqrt{N})$，而 Hamiltonian H 诱导的有效旋转每一步的角度为 θ。如果在总时间 T 内进行了

$$k=\frac{T}{\Delta t}$$

步，则总旋转角约为 $k\theta$。

要从 $|\psi\rangle$ 正好旋转到 $|x\rangle$，需要总旋转角

$$k\theta=\pi \quad\Longrightarrow\quad k=\frac{\pi}{\theta}.$$

因此只要我们选定某个

$$\theta=\Theta\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right),$$

就可以用

$$k=\Theta(\sqrt{N})$$

步正好到达 $|x\rangle$，成功概率为 1。

书中为方便起见选了

$$\theta=\frac{4}{\sqrt{N}},$$

这样

$$k=\frac{\pi}{\theta}=\Theta(\sqrt{N}),$$

对应总模拟时间

$$T=k\Delta t=O(\sqrt{N}).$$

(3) 将 θ 代回 (6.28) 反解 Δt。

把 $\theta=4/\sqrt{N}$ 代入前面的关系，就得到

$$\Delta t=2\arcsin\left(\sqrt{\frac{N}{2}\left(1-\cos\frac{2}{\sqrt{N}}\right)}\right),$$

这是一个只依赖 N 的步长选择（不需要事先知道 $|x\rangle$ 是哪一个）。

由于 $\theta=\Theta(1/\sqrt{N})$，而 Δt 通过上述关系可以保持在常数量级（不会随 N 发散或趋零），所以总步数

$$k=\frac{T}{\Delta t}=O(\sqrt{N}),$$

每步又只需常数次 oracle 调用，因此整体算法调用次数为 $O(\sqrt{N})$，并且在总时间 T 时刻恰好达到 $|x\rangle$，成功概率为 1。 □

练习 6.11 (连续量子搜索的多重解)**.** *设有 M 个满足条件的解 $\{|m\rangle\}$，猜测一个适合的 Hamiltonian 用以构造连续时间的量子搜索算法，并分析其运行步数阶数。*

解答. 考虑多解情形时，自然的推广是把“解态”定义为所有解的叠加。

(1) 把多解情况写成 2 维有效子空间。

令

$$|x\rangle := \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m\ \text{是解}} |m\rangle$$

为所有解均匀叠加的归一化态；再令

$$|y\rangle := \frac{1}{\sqrt{N-M}} \sum_{z\ \text{非解}} |z\rangle$$

为所有非解均匀叠加的归一化态。则

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} |j\rangle = \sqrt{\frac{M}{N}}\, |x\rangle + \sqrt{\frac{N-M}{N}}\, |y\rangle\,.$$

$|x\rangle\,, |y\rangle$ 正交归一，从而系统在 $\mathrm{span}\{|x\rangle\,, |y\rangle\}$ 上的演化可以视为一个“有效单比特”。

(2) 选取与单解情形相同形式的 Hamiltonian。

单解时我们使用

$$H = |x\rangle\langle x| + |\psi\rangle\langle\psi|\,.$$

多解情形沿用同一形式，只是此时的 $|x\rangle$ 是“多解叠加态”。在 $\{|x\rangle\,, |y\rangle\}$ 基下，

$$|\psi\rangle = \alpha\,|x\rangle + \beta\,|y\rangle\,, \quad \alpha = \sqrt{\frac{M}{N}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{N-M}{N}}.$$

在该二维空间中 H 仍然只是一个 2×2 的 Hermite 矩阵，对应 Bloch 球上的某个旋转 Hamiltonian。与单解情形类似，可以证明 $|\psi\rangle$ 和 $|x\rangle$ 之间的 Rabi 振荡频率为

$$\Omega = \Theta\left(\sqrt{\frac{M}{N}}\right),$$

从而达到 $|x\rangle$ 所需时间

$$T = \Theta\left(\sqrt{\frac{N}{M}}\right).$$

只要每一步的 Hamiltonian 仿真误差足够小，总时间仍为 $O(\sqrt{N/M})$，同时每次演化到“解态子空间”后测量，会以高概率得到某一个解态 $|m\rangle$。由于 $|x\rangle$ 是所有解的等权叠加，单次运行无法区分是哪一个具体解，但“是否得到某个解”可以在 $O(\sqrt{N/M})$ 时间内完成。 □

练习 6.12 (量子搜索的不同 Hamiltonian 量)**.** *设*

$$H = |x\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle x|\,. \tag{6.29}$$

1. *若系统按 Hamiltonian H 演化，证明从初态 $|\psi\rangle$ 到达 $|x\rangle$ 只需 $O(1)$ 的演化时间；*
2. *说明如何进行 Hamiltonian H 的量子仿真，并估算以高概率找到解所需的 oracle 调用次数阶数。*

解答. **(1) 在二维子空间中分析 H 的作用。**

和前面类似，我们在 $\mathrm{span}\{|x\rangle, |y\rangle\}$ 中工作，使得

$$|\psi\rangle = \alpha\,|x\rangle + \beta\,|y\rangle, \qquad \alpha, \beta \in \mathbb{R}, \quad \alpha^2 + \beta^2 = 1.$$

在基 $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ 下，

$$|x\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |y\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}.$$

于是

$$|x\rangle\langle\psi| = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$|\psi\rangle\langle x| = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ \beta & 0 \end{bmatrix}.$$

相加得到

$$H = \begin{bmatrix} 2\alpha & \beta \\ \beta & 0 \end{bmatrix}.$$

注意到

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad Z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

可验证

$$H = \alpha I + \beta X + \alpha Z.$$

向量 $(\beta, 0, \alpha)$ 的长度

$$\sqrt{\beta^2 + \alpha^2} = 1,$$

所以 $\beta X + \alpha Z$ 正是一个「单位向量 $\vec{n} = (\beta, 0, \alpha)$ 点乘 Pauli」的形式：$\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$。

于是

$$H = \alpha I + \vec{n} \cdot \vec{\sigma}.$$

时间演化算符的形式。 由 I 与 $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ 对易，有

$$e^{-iHt} = e^{-i\alpha t}\, e^{-i(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})t}.$$

习题 4.8（或标准 Bloch 旋转公式）给出

$$e^{-i(\vec{n}\cdot\vec{\sigma})t} = \cos t\, I - i \sin t\, \vec{n} \cdot \vec{\sigma}.$$

因此

$$e^{-iHt} = e^{-i\alpha t}\big(\cos t\, I - i \sin t\, (\beta X + \alpha Z)\big).$$

作用在初态 $|\psi\rangle$ 上：

$$e^{-iHt}\,|\psi\rangle = e^{-i\alpha t}\Big(\cos t\, |\psi\rangle - i \sin t\, (\beta X + \alpha Z)\, |\psi\rangle\Big).$$

现在计算

$$(\beta X + \alpha Z)\, |\psi\rangle.$$

有

$$X\,|\psi\rangle = X(\alpha\,|x\rangle + \beta\,|y\rangle) = \alpha\,|y\rangle + \beta\,|x\rangle,$$

$$Z|\psi\rangle = Z(\alpha|x\rangle + \beta|y\rangle) = \alpha|x\rangle - \beta|y\rangle.$$

所以

$$\begin{aligned}(\beta X + \alpha Z)|\psi\rangle &= \beta(\alpha|y\rangle + \beta|x\rangle) + \alpha(\alpha|x\rangle - \beta|y\rangle) \\ &= (\beta^2 + \alpha^2)|x\rangle + (\beta\alpha - \alpha\beta)|y\rangle \\ &= |x\rangle,\end{aligned}$$

因为 $\alpha^2 + \beta^2 = 1$。

于是

$$e^{-iHt}|\psi\rangle = e^{-i\alpha t}\big(\cos t\,|\psi\rangle - i\sin t\,|x\rangle\big).$$

要使 $|\psi\rangle$ 完全演化到 $|x\rangle$（差一个全局相位），只需令

$$\cos t = 0 \quad \Longrightarrow \quad t = \frac{\pi}{2}.$$

此时

$$e^{-iHt}|\psi\rangle = -ie^{-i\alpha\pi/2}|x\rangle,$$

与 $|x\rangle$ 只差一个全局相位，成功概率为 1。可以看到这种 Hamiltonian 只需常数时间 $t = \pi/2$，不依赖 N，因此是 $O(1)$ 次旋转。

(2) H 的量子仿真与 oracle 调用次数。

从上面的二维表示可以看出：在 $\{|x\rangle, |y\rangle\}$ 子空间中，H 与前一节使用的 Hamiltonian

$$H' = |x\rangle\langle x| + |\psi\rangle\langle\psi|$$

在本质上都是「二能级系统上的某个方向的 Pauli 向量」，即在 Bloch 球上实现绕某个轴的旋转。两者的区别只在于：

- 一个包含常数项 αI（只产生整体相位，可以忽略）；- 旋转轴方向、旋转频率略有不同（等价于把演化时间做一个线性缩放）。

而从「如何实现仿真」的角度看，我们关心的是：实现 e^{-iHt} 所需要调用的 oracle 类型和次数。实现 H' 时需要的 oracle 是：

- 能判断“当前态是否为解”的 oracle（实现 $|x\rangle\langle x|$ 或类似投影）；- 能准备初态 $|\psi\rangle$ 以及在电路中实现 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 相关的受控操作。

而 $H = |x\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle x|$ 所需的信息与 H' 并没有本质差别：依然需要

- 标记解态 $|x\rangle$ 的 oracle；- 对 $|\psi\rangle$ 的制备及相关受控操作。

因此，在门级实现上可以沿用 6.2 节为 H' 设计的仿真线路，只是把时间步长与仿真总时间做适当缩放，使之等效于 H 的演化。也就是说：

- 每一步仿真 H 的成本与仿真 H' 相同，需 $O(1)$ 次 oracle 调用；- 为获得高成功概率，只需让系统从 $|\psi\rangle$ 演化到 $|x\rangle$，这在 H 下只需常数时间 $O(1)$，但由于我们仍然是通过“分步仿真”实现，每个时间步大小 Δt 需要足够小以保证误差控制，故总步数为 $O(1/\Delta t)$。在与前一节相同的误差要求下，所需 oracle 调用次数与仿真 H' 的情况同阶，仍为

$$O(\sqrt{N})$$

（从搜索问题本身的复杂度下界来看，这也是必然的）。

简言之：在实际的 Hamiltonian 仿真模型中，H 与 H' 在「oracle 调用次数阶数」上是等价的，都是 $O(\sqrt{N})$，只是在连续时间模型中 H 的“本征演化时间”可以是 $O(1)$，从而在理论上给出了一个更「强」的连续时间搜索 Hamiltonian 示例。 □