

УДК: 519.8

Устойчивость алгоритма квантовой оценки фазы при равномерном распределении собственных значений

М. О. Гордейчук^а, О. М. Киселев^б

Университет Иннополис,
Россия, 420500, г. Иннополис, ул. Университетская, д. 1

E-mail: ^а m.lisnichenko@innopolis.ru, ^б o.kiselev@innopolis.ru

Получено 10.04.2025, после доработки — 30.09.2025.
Принято к публикации 24.11.2025.

В работе получены количественные условия устойчивости алгоритма квантовой оценки фазы (QPE) при равномерном распределении собственных значений унитарного оператора. На основе теории возмущений для линейных операторов показано, что точность определения фазы ограничена логарифмической зависимостью от возмущения: число точно определяемых двоичных разрядов удовлетворяет условию $n = o(-\log_2(\epsilon))$. Установлено, что фазы становятся различимыми при возмущении, не превышающем минимальное расстояние $\frac{1}{m}$ между соседними фазами, т. е. соблюдается условие $m = o(\epsilon^{-1})$. Эти результаты выявляют фундаментальные ограничения разрешающей способности QPE в условиях неточных входных данных и имеют прямое значение при проектировании устойчивых квантовых алгоритмов, использующих QPE в качестве подпрограммы.

Ключевые слова: квантовые вычисления, собственные числа, алгоритм оценки фазы, теория возмущений

UDC: 519.8

Stability of the quantum phase estimation algorithm under uniform distribution of eigenvalues

M. O. Gordeichuk^a, O. M. Kiselev^b

Innopolis University,
1 University st., Innopolis, 420500, Russia

E-mail: ^a m.lisnichenko@innopolis.ru, ^b o.kiselev@innopolis.ru

*Received 10.04.2025, after completion — 30.09.2025.
Accepted for publication 24.11.2025.*

This paper establishes quantitative conditions for the stability of the Quantum Phase Estimation (QPE) algorithm under the assumption of a uniform distribution of eigenvalues of the unitary operator. Using perturbation theory for linear operators, we demonstrate that the accuracy of phase estimation is fundamentally limited by a logarithmic dependence on the perturbation magnitude: the number of reliably recoverable binary digits of the phase satisfies the condition $n = o(-\log_2(\epsilon))$. Furthermore, we show that distinct phases remain resolvable only if the perturbation does not exceed the minimal distance $\frac{1}{m}$ between adjacent phases, which leads to the condition $m = o(\epsilon^{-1})$. These results reveal fundamental limitations on the resolving power of QPE in the presence of imperfect input data and are of direct practical relevance for the design of robust quantum algorithms that employ QPE as a subroutine.

Keywords: quantum, eigenvalues, phase estimation, perturbation

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2026, vol. 18, no. 1, pp. 9–24 (Russian).

Введение

Квантовые вычисления — это направление информатики, использующее законы квантовой механики для обработки информации. Квантовые вычисления базируются на квантовой механике. Здесь основным является уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \widehat{H} |\psi\rangle. \quad (1)$$

Здесь $|\psi\rangle$ — вектор размерностью 2^n , определяющий состояние из n двухэлементных компонент (кубитов). Более подробное описание см. в § 3.

Оператор \widehat{H} строится таким образом, чтобы эволюция, определяемая уравнением (1), приводила к решению поставленной алгоритмической задачи.

В отличие от классических битов, которые могут находиться только в состояниях 0 или 1, квантовые биты (кубиты) способны находиться в суперпозиции этих состояний, а также запутываться друг с другом. Благодаря этим свойствам квантовые алгоритмы в ряде задач (например, факторизации больших чисел, моделирования молекул или решения линейных систем) теоретически способны обеспечить экспоненциальное ускорение по сравнению с лучшими известными классическими методами.

Одним из инструментов квантовых вычислений является алгоритм оценки фазы (Quantum Phase Estimation, QPE) [Китаев, 1997]. Его задача — определить собственное значение унитарного оператора U , записанное в виде фазы ω в выражении $U|\psi\rangle = e^{2\pi i\omega}|\psi\rangle$, где $|\psi\rangle$ — соответствующий собственный вектор. Эта задача может показаться узкоспециальной, однако именно на QPE строятся многие важные квантовые алгоритмы. Например, алгоритм Шора для разложения чисел на множители [Shor, 1994], квантовый алгоритм Харроу – Хассидима – Ллойда (HHL) для решения линейных систем уравнений [Lloyd, 2010], а также методы квантового моделирования химических реакций и материалов — все они используют QPE как ключевую подпрограмму.

Однако практическая реализация QPE сталкивается с рядом трудностей [Buhrman et al., 1999]. Во-первых, число кубитов ограничено на современных квантовых процессорах, что ограничивает разрешающую способность алгоритма. Во-вторых, входные данные (матрица U или ее собственные векторы) могут быть известны с погрешностью, например из-за неточностей в моделировании или шумов в квантовой системе. Эти возмущения могут существенно исказить результат оценки фазы.

В данной работе мы исследуем устойчивость QPE, в случае когда собственные значения унитарного оператора равномерно распределены на единичной окружности комплексной плоскости, например для операторов эволюции в квантовой динамике. Основное внимание уделяется двум аспектам: (1) зависимости точности восстановления фазы от числа используемых кубитов и (2) влиянию малых возмущений входных данных на разрешимость соседних фаз. С использованием теории возмущений для линейных операторов получены количественные условия, при которых фазы остаются различимыми, и показано, что точность QPE ограничена логарифмической зависимостью от амплитуды возмущений.

Результаты работы имеют практическое значение для проектирования квантовых алгоритмов, особенно в условиях ограниченных ресурсов и неточных входных данных, что неизбежно на нынешнем этапе развития квантовых технологий.

В следующем разделе описываем математические преобразования. В § 2 рассматриваем возмущения уравнения Шрёдингера, связанные с возмущениями входных данных, и формулируем основные результаты работы. В § 3 рассматриваем алгоритм как последовательность матричных операторов. В § 4 представлен алгоритм QPE как квантовая схема и ее численная реализация для численной иллюстрации результатов работы.

1. Математические основы формализма QRE

Формально решение уравнения (1) можно записать в виде экспоненты:

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle\Big|_{t=0} e^{-\frac{i\widehat{H}t}{\hbar}}. \quad (2)$$

Оператор \widehat{H} эрмитов, поэтому экспонента (1) представляет собой унитарный оператор. Задача QRE — получить фазы собственных значений этого оператора.

Рассмотрим унитарную матрицу — комплексную квадратную матрицу U размерностью 2^n , удовлетворяющую условию

$$U^\dagger U = I, \quad (3)$$

где U^\dagger обозначает эрмитово-сопряженную матрицу (транспонированную и комплексно-сопряженную), а I — единичная матрица.

Для заданной унитарной матрицы U из формулы (3) размерностью 2^n , где n — число кубитов, представим j -е собственное значение $b_j + i \cdot a_j$, где $a_j, b_j \in \mathbb{R}$. С другой стороны, собственные числа унитарной матрицы имеют следующее представление: $\lambda_j = e^{2i\pi\omega_j}$, где

$$\omega_j = \frac{1}{2\pi} \arg(b_j + i \cdot a_j).$$

Задача на собственные значения и собственные векторы имеет вид

$$U\Psi = \Psi\Lambda, \quad \Lambda = \text{diag}\left(e^{2i\pi\omega_1}, e^{2i\pi\omega_2}, \dots, e^{2i\pi\omega_{2^n}}\right), \quad (4)$$

где Ψ — это матрица, составленная из собственных векторов. Иными словами, каждый вектор-столбец (кет) $|\psi\rangle_j$, где $j \in \{1, 2, \dots, 2^n\}$, является собственным вектором матрицы U . Набор векторов ψ определяет базис в 2^n -мерном векторном пространстве.

Действие матрицы U^t на матрицу собственных векторов можно переписать следующим образом:

$$U^t\Psi = U^{t-1}(U\Psi) = U^{t-1}(\Psi\Lambda) = U^{t-2}\Psi\Lambda\Lambda = \Psi\Lambda^t = \Psi \text{diag}\left(e^{2i\pi\omega_1 t}, e^{2i\pi\omega_2 t}, \dots, e^{2i\pi\omega_{2^n} t}\right). \quad (5)$$

Любой вектор $|x\rangle$ можно представить в виде

$$|x\rangle = \Psi\mathbf{x}, \quad (6)$$

где $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{2^n})^T$ является столбцом координат в базисе Ψ .

Умножим унитарную матрицу U на данный вектор $|x\rangle$:

$$U^t|x\rangle = U^t\Psi\mathbf{x} = \Psi\Lambda^t\mathbf{x}. \quad (7)$$

В явном виде формула (7) может быть представлена как

$$\begin{aligned} U^t|x\rangle &= \begin{pmatrix} \psi_{11}e^{2\pi i\omega_1 t} & \psi_{12}e^{2\pi i\omega_2 t} & \dots & \psi_{1N}e^{2\pi i\omega_N t} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{N1}e^{2\pi i\omega_1 t} & \psi_{N2}e^{2\pi i\omega_2 t} & \dots & \psi_{NN}e^{2\pi i\omega_N t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \psi_{11}e^{2\pi i\omega_1 t}x_1 + \psi_{12}e^{2\pi i\omega_2 t}x_2 + \dots + \psi_{1N}e^{2\pi i\omega_N t}x_N \\ \vdots \\ \psi_{N1}e^{2\pi i\omega_1 t}x_1 + \psi_{N2}e^{2\pi i\omega_2 t}x_2 + \dots + \psi_{NN}e^{2\pi i\omega_N t}x_N \end{pmatrix}, \quad (8) \end{aligned}$$

где $N = 2^n$.

В правой части формулы (8) стоит сумма осциллирующих элементов. Фазы ω_j можно определить через квантовое преобразование Фурье (QFT).

С помощью n кубитов можно аппроксимировать фазу в виде двоичного числа:

$$\omega_j \approx \sum_{z=0}^{n-1} b_z 2^{-(z+1)}, \quad b_z \in \{0, 1\}, \quad (9)$$

здесь каждый b_z соответствует двоичному разряду фазы.

Например, $\omega_j = 0,625_{10}$. Двоичное представление данной фазы $\omega_j = 0,101_2 = 0,5 + 0,125 = \frac{1}{2} + \frac{1}{8}$.

Таким образом, понадобится $\log_2 8 = 3$ кубита для вычисления данной фазы. Каждый кубит соответствует своему разряду в двоичном представлении фазы.

2. Теория возмущений в QPE

Выходной результат алгоритма QPE представляет собой распределение двоичных чисел, соответствующих возможным фазам. Если описание двоичного числа укладывается в заданное число кубитов, результатом работы алгоритма будет гистограмма, указывающая на единственное двоичное число без какого-либо разброса. В противном случае гистограмма выглядит как распределение, где наибольшая вероятность указывает на двоичное значение, близкое к истинной фазе. Аналогичная ситуация возникает, когда исходная матрица и/или собственные векторы возмущены. В результате гистограмма отображает лишь приблизительно вычисленную фазу.

Пусть H — начальная эрмитова матрица. Эта матрица формирует унитарную матрицу U , для которой QPE позволяет вычислить фазы. Матрица H раскладывается на матрицу H_0 и ее возмущение $\epsilon H_1 = H'$ так, что

$$H = H_0 + \epsilon H_1 = H_0 + H', \quad (10)$$

где $0 < \epsilon \ll 1$ [Kato, 2013].

Собственные значения матрицы и соответствующие собственные векторы имеют представление в виде разложения:

$$E_j \sim E_j^{(0)} + \epsilon E_j^{(1)} + \sum_{k=2}^{\infty} \epsilon^k E_j^{(k)}, \quad (11)$$

$$|\psi_j\rangle \sim |\psi_j^{(0)}\rangle + \epsilon |\psi_j^{(1)}\rangle + \sum_{k=2}^{\infty} \epsilon^k |\psi_j^{(k)}\rangle,$$

где j — индекс собственного значения и соответствующего собственного вектора. Теорию такого представления для линейных операторов можно найти в [Kato, 2013].

Предположим, что $E_j^{(1)} \neq E_m^{(1)}$ для всех $j \neq m$. Тогда для отдельного возмущенного собственного значения и собственного вектора получим

$$E_j^{(1)} = \langle \psi_j^{(0)} | H_1 | \psi_j^{(0)} \rangle,$$

$$|\psi_j^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq j} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | H_1 | \psi_j^{(0)} \rangle}{E_j^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_m^{(0)}\rangle. \quad (12)$$

Преобразование из эрмитовой матрицы в унитарную осуществляется следующим образом:

$$U^t = e^{i(H_0 + \epsilon H_1)t}. \quad (13)$$

Согласно алгоритму (QPE) на этапе предвычисления фазы предыдущее уравнение (13) следует рассматривать совместно с экспонированием матрицы U :

$$U^{2^k} = e^{i(H_0 + \epsilon H_1)2^k}, \quad (14)$$

где $k \in \{0, \dots, n\}$. Требуется n кубитов, чтобы описать наибольшее число $2^n - 1$. Следовательно, возмущение ϵ должно быть таким, чтобы разница между возмущенной и исходной фазами оставалась малой (в терминологии \mathcal{O} [Glebov, 2024]):

$$\epsilon 2^n \ll 1. \quad (15)$$

Отсюда следует теорема.

Теорема 1. *Число точно посчитанных двоичных разрядов фазы:*

$$n \ll -\log_2(\epsilon). \quad (16)$$

Если собственные значения равномерно распределены по единичной окружности и m — расстояние между двумя соседними собственными значениями, то связь между точностью оценки фаз и этим расстоянием следующая:

$$\frac{1}{2^n} \gg \frac{1}{m}. \quad (17)$$

Отсюда следует теорема.

Теорема 2. *Если возмущение не превышает разрешение фазы, то в ее окрестности другие фазы становятся различимыми:*

$$m \ll \epsilon^{-1}. \quad (18)$$

Здесь разрешение фазы определяется как расстояние между двумя фазами, вызванное двумя соседними равномерно распределенными собственными значениями.

Из этой теоремы вытекает следствие.

Следствие. *Множество различных фаз ограничено порядком возмущения.*

3. Механика квантовых вычислений

Здесь представлена математическая модель, которая служит основой для построения квантового алгоритма QPE. Приведены формальные определения и ключевые преобразования, лежащие в основе этого алгоритма.

Обозначение $|\cdot\rangle$ — кет, означает вектор-столбец, а также $\langle\cdot|$ — бра, что означает вектор-строку.

В контексте QFT уравнение Шрёдингера можно записать следующим образом:

$$|X\rangle = U|x\rangle,$$

где $|x\rangle$ — входной сигнал, U — унитарный оператор, заключающий в себе QFT, а $|X\rangle$ — это набор частот QFT.

Единичный вектор в двумерном комплексном векторном пространстве называется кубитом. Количество кубитов задает длину $|X|$ как 2^n .

Для того чтобы получить $|v\rangle$ из n кубитов, используется операция \otimes , которая вводится как

$$|v\rangle = \bigotimes_{k=1}^n |k\rangle$$

и известна как кронекерово произведение.

Пусть векторы \vec{a} и \vec{b} имеют размерность 2:

$$\vec{a} = (a_1 \ a_2), \quad \vec{b} = (b_1 \ b_2).$$

Тогда для кронекерова произведения $\vec{c} = \vec{a} \otimes \vec{b}$

$$\vec{c} = (a_1 \ a_2) \otimes (b_1 \ b_2) = (a_1 b_1 \ a_1 b_2 \ a_2 b_1 \ a_2 b_2).$$

Каждый кубит эволюционирует со временем (см. уравнение 2) под действием унитарных операторов. В случае нескольких операторов их кронекерово произведение действует на кронекерово произведение кубитов. Таким образом, уравнение Шрёдингера принимает следующий вид:

$$\bigotimes_{k=1}^n |X\rangle_k = \bigotimes_{k=1}^n U_k \cdot \bigotimes_{k=1}^n |x\rangle_k.$$

С течением времени t оператор $\bigotimes_{k=1}^n |X\rangle_k$ также изменяется вместе с состояниями кета. Общий унитарный оператор определяется произведением операторов Кронекера в каждом отдельном моменте времени (или шаге):

$$U = \prod_{k=1}^n \bigotimes_{m=0}^l U_k^m.$$

Квантовое преобразование Фурье оперирует такими унитарными операторами (или гейтами) [Varenco et al., 1995], как оператор Адамара (H), фазы (P), идентичности (I):

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \\ P &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\pi}{n}} \end{pmatrix}, \\ I &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{19}$$

оператор SWAP (SW) меняет p -й и q -й кубит местами:

$$\begin{aligned} SW_{p,q} &= \sum_{i_1, \dots, i_n} |i_1 \dots i_q \dots i_p \dots i_n\rangle \langle i_1 \dots i_p \dots i_q \dots i_n| = \\ &= \sum_{i_1, \dots, i_n} |i_1\rangle \langle i_1| \otimes \dots \otimes |i_p\rangle \langle i_p| \otimes \dots \otimes |i_q\rangle \langle i_q| \otimes \dots \otimes |i_n\rangle \langle i_n|. \end{aligned} \tag{20}$$

Контролируемые операторы расширяют упомянутые. Оператор U , контролируемый кубитом m на кубит n , называется $C - U_n^m$ и выполняет следующее:

$$C - U^n = \bigotimes_{i=0}^{m-1} I \otimes |0\rangle \langle 0| \otimes \bigotimes_{i=m+1}^n I + \bigotimes_{i=0}^{m-1} I \otimes |1\rangle \langle 1| \otimes \bigotimes_{i=m+1}^n I \otimes U \otimes \bigotimes_{i=k+1}^n I. \tag{21}$$

В частности, контролируемый фазовый оператор ($C - P$) имеет эффект фазового отката (phase kickback): передает фазовый сдвиг от одного кубита к другому. Уравнение ниже описывает этот феномен для двухкубитного случая с контролирующим кубитом $|c\rangle$ и целевым $|t\rangle$:

$$\begin{aligned} |c\rangle|t\rangle &\xrightarrow{U_\phi} |c\rangle|t\rangle e^{i\phi}, & \text{если } c = 1, \\ |c\rangle|t\rangle &\xrightarrow{U_\phi} |c\rangle|t\rangle, & \text{если } c = 0. \end{aligned}$$

Также существуют операторы-проекторы на ортогональные подпространства. В общем случае проектор P_j действует на кубит $|\psi\rangle$ следующим образом:

$$P_j|\psi\rangle = |j\rangle\langle j|(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \alpha|j\rangle,$$

где $j \in 0, 1$ для физических квантовых компьютеров:

$$P_0 = |0\rangle\langle 0|, \quad P_1 = |1\rangle\langle 1|.$$

На основе упомянутых операторов следующий раздел описывает алгоритм QFT.

4. Общий вид алгоритма

Исходное состояние

Кубиты, используемые QPE, группируются в два регистра: один — для вычисления и хранения фазы, второй — для хранения входного собственного вектора.

Для вычисления фазы QPE использует двоичную систему счислений, в которой каждый кубит представляет собой бит данных.

Бинарное кодирование позволяет представить числа от 0 до $2^n - 1$ с использованием n кубитов. Таким образом, в первом регистре содержится n кубитов, каждый из которых в состоянии $|0\rangle$. Тогда выходное состояние $|out\rangle$ первого шага следующее:

$$|out\rangle = |0\rangle^{\otimes n}.$$

Рисунок 1 иллюстрирует схематическое представление первого шага.

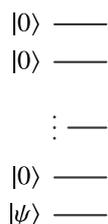


Рис. 1. Схематическое изображение шага инициализации

Перевод регистра, отвечающего за подсчет фазы в суперпозицию

Второй шаг алгоритма заключается в преобразовании каждого кубита регистра подсчета фазы из начального состояния $|0\rangle$ в суперпозицию с использованием n операторов Адамара.

Эволюция состояния следующая:

$$|out\rangle = \bigotimes_{k=0}^n H \cdot |0\rangle^{\otimes n} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle.$$

Рисунок 2 иллюстрирует схематическое представление алгоритма QPE до второго шага включительно.

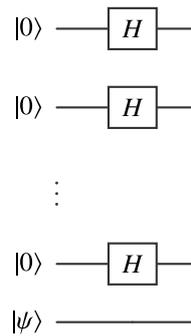


Рис. 2. Схематическое изображение перевода исходного состояния в суперпозицию кубитов собственного значения

Вычисление частот фаз

Операторы фазы из уравнения (19) преобразуют суперпозицию в состояние входного сигнала $e^{2\pi i\theta}$, где θ — это искомая фаза. Результат шага следующий:

$$|out\rangle = \bigotimes_{k=1}^n P(0.b_1 \dots b_k) \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle = \left(\frac{1}{2^{\frac{n}{2}}}\right) \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{2\pi i\theta k} |k\rangle.$$

Рисунок 3 иллюстрирует схематическое представление алгоритма QPE до третьего шага включительно.

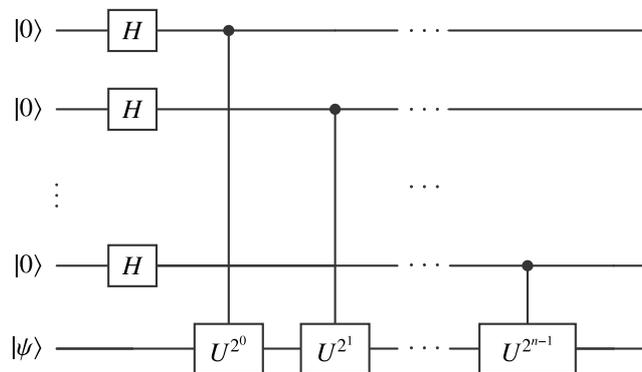


Рис. 3. Схематическое изображение шага вычисления фаз

Квантовое преобразование Фурье

QFT [Varenco et al., 1995] для одного кубита является оператором Адамара:

$$H|x_j\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) (|0\rangle + e^{2\pi i j 2^{-1}} |1\rangle).$$

В случае нескольких кубитов операторы контролируемых поворотов наследуют угол поворота от предыдущих кубитов. Таким образом, входное состояние эволюционирует в следующее:

$$|out\rangle = QFT(|x_1 x_2 \dots x_n\rangle) = \frac{1}{\sqrt{N}} (|0\rangle + e^{2\pi i [0.x_n]} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i [0.x_{n-1}x_n]} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i [0.x_1 x_2 \dots x_n]} |1\rangle).$$

В случае обратного преобразования Фурье шаги выполняются в обратном порядке.

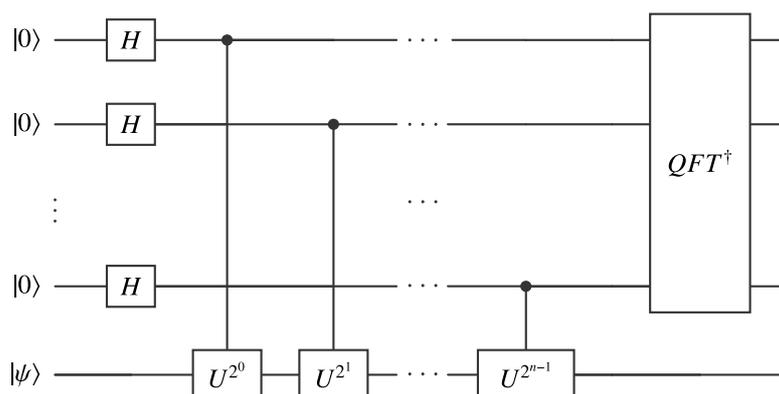


Рис. 4. Схематическое изображение вычисления коэффициентов квантового преобразования Фурье

Рисунок 4 иллюстрирует схематическое представление алгоритма QPE до четвертого шага включительно.

Рисунок 6 иллюстрирует схематическое представление алгоритма QFT, который на рис. 4 представлен блоком QFT^\dagger .

Измерение

Цель измерения — извлечь двоичную форму фазы и интерпретировать результаты.

n кубитов предоставляют 2^n двоичных чисел. Комбинация проекторов позволяет измерить все числа от 0 до $2^n - 1$ в двоичной форме:

$$\tilde{\theta} = \frac{\bigotimes_{k=1}^n P_{i=0,1} \cdot QFT(x)}{2^n}.$$

Каждое из чисел в выходном сигнале имеет десятичную форму и выглядит следующим образом:

$$\theta_k = \frac{\widehat{\theta}_{10}^k}{n},$$

где $\widehat{\theta}_{10}^k$ — это десятичная форма k -го измеренного двоичного значения.

Измерения завершают выполнение алгоритма. В следующем разделе содержатся результаты симуляции QFT.

Рисунок 5 иллюстрирует схематическое представление алгоритма QPE, а рис. 6 приводит схему блока QFT^\dagger — квантового преобразования Фурье.

5. Пример вычислений

Зададим матрицу $H = \text{diag}\left(\left[1, 1, 1\frac{1}{2}, 1\frac{1}{4}\right]\right)$ и получим унитарную матрицу U :

$$U = e^{2\pi i H} = \begin{bmatrix} i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0,707 + 0,707i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0,383 + 0,924i \end{bmatrix}. \quad (22)$$

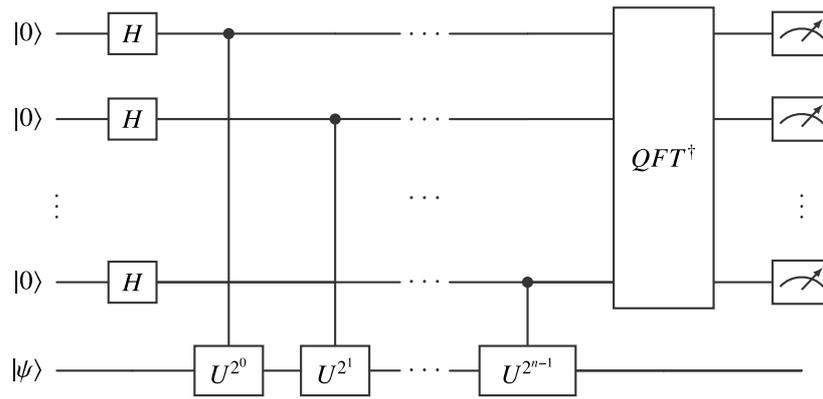


Рис. 5. Схематическое изображение алгоритма QPE

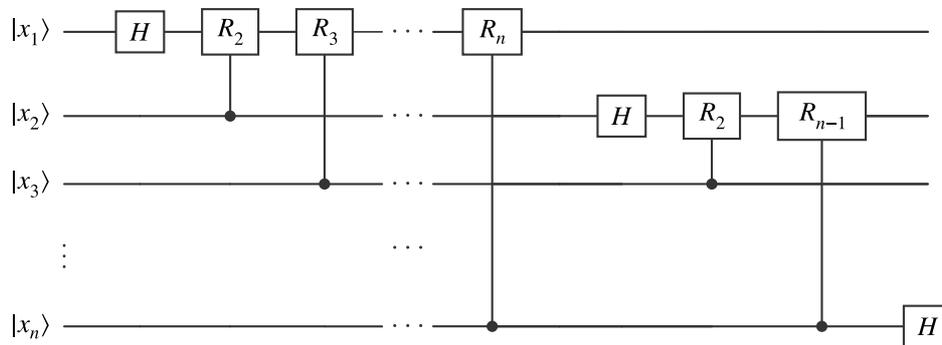


Рис. 6. Схематическое изображение квантового преобразования Фурье

Исходное состояние

Есть 2 кубита для вычисления фазы. Тогда состояние регистра хранения фазы $|0\rangle \otimes |0\rangle$. Регистр хранения входного вектора, соответственно, содержит входной вектор. Рассмотрим для примера собственный вектор с координатами $[0 \ 0 \ 1 \ 0]^T$. В результате начальное состояние хранит в себе тензорное произведение собственного вектора и двух векторов $|0\rangle$:

$$[0 \ 0 \ 1 \ 0]^T \otimes [1 \ 0]^T \otimes [1 \ 0]^T = [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]^T. \quad (23)$$

Рисунок 1 представляет схематическое представление этого шага для n кубитов.

Перевод регистра, отвечающего за подсчет фазы в суперпозицию

Для этого применяется оператор Адамара на каждый кубит данного регистра. При этом необходимо сохранить исходное состояние в регистре, который хранит информацию о собственном векторе: для этого применяется единичный оператор на каждый кубит данного регистра. Тогда унитарное преобразование U_1 шага является блочно-диагональной матрицей 16×16 :

$$U_1 = |I\rangle \otimes |I\rangle \otimes |H\rangle \otimes |H\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B \end{bmatrix}, \quad (24)$$

где блок B имеет следующий вид:

$$B = \begin{bmatrix} 0,5 & 0,5 & 0,5 & 0,5 \\ 0,5 & -0,5 & 0,5 & -0,5 \\ 0,5 & 0,5 & -0,5 & -0,5 \\ 0,5 & -0,5 & -0,5 & 0,5 \end{bmatrix}. \quad (25)$$

Вычисление частот фаз

Часть алгоритма, отвечающая за перевод регистра фаз из начального состояния в состояние с угловым представлением фаз. Здесь особую роль играет оператор контролируемого поворота CU , который получается из оператора U . Контролируемый поворот представляет собой операцию, которая позволяет управлять состоянием одного или нескольких кубитов в зависимости от состояния других кубитов. Для оператора U , действующего на кубит m , существует его контролируемая кубитом n версия $C - U_{n,m}$, которая имеет

$$C - U_{n,m} = \otimes_{i=0}^{m-1} I \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes_{i=m+1}^k I + \otimes_{i=0}^{m-1} I \otimes |1\rangle\langle 1| \otimes_{i=m+1}^{n-1} I \otimes U \otimes_{i=n}^k I, \quad (26)$$

где k — количество кубитов всего.

Пусть даны унитарная матрица U размерностью 2, ее фаза в виде бинарного представления $0.b_1b_2b_3$, собственный вектор e и 3 кубита для вычисления фазы. Тогда контролируемый поворот $CU_{e,1}$ позволяет вычислить значение $0.b_1b_2b_3$, контролируемый поворот $CU_{e,2}$ позволяет вычислить значение $0.b_2b_3$, контролируемый поворот $CU_{e,4}$ позволяет вычислить значение $0.b_3$. Пример можно перенести в раздел выше.

Таким образом, в рамках рассматриваемого примера для двух кубитов требуется два управляемых поворота: $C - U_{e,1}$ и $C - U_{e,1}^2$. Тогда унитарное преобразование для данного шага выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} & (I \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes I + I \otimes |1\rangle\langle 1| \otimes U) \cdot (|0\rangle\langle 0| \otimes I \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes I \otimes U^2) = \\ & = \text{diag} \left[1 \quad j \quad -1 \quad -j \quad 1 \quad j \quad -1 \quad -j \quad 1 \quad -0,707 + 0,707j \quad -j \quad 0,707 + 0,707j \quad 1 \right. \\ & \quad \left. -0,383 + 0,924j \quad -0,707 - 0,707j \quad 0,924 - 0,383j \right]. \quad (27) \end{aligned}$$

Квантовое преобразование Фурье

Этот шаг преобразует фазу в соответствующем регистре из частотного представления в амплитудное. В преобразовании участвуют оператор Адамара, единичный и оператор SWAP, отвечающий за смену порядка кубитов в регистре хранения фазы.

В рамках рассматриваемого двухкубитного примера унитарный оператор этого шага выглядит следующим образом:

$$(H \otimes I \cdot C_{1,2} \cdot I \otimes H \cdot SWAP) \otimes I \otimes I = \begin{bmatrix} B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B \end{bmatrix}, \quad (28)$$

где блок B имеет следующий вид:

$$B = \begin{bmatrix} 0,5 & 0,5 & 0,5 & 0,5 \\ 0,5 & -0,5i & -0,5 & 0,5i \\ 0,5 & -0,5 & 0,5 & -0,5 \\ 0,5 & 0,5i & -0,5 & -0,5i \end{bmatrix}. \quad (29)$$

Итоговая матрица алгоритма представляет собой перемножение всех представленных матриц и выглядит следующим образом:

$$\begin{bmatrix} B_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_3 \end{bmatrix}, \quad (30)$$

где блоки B_j имеют следующий вид:

$$B_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0,5 + 0,5i & 0,5 - 0,5i \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0,5 - 0,5i & 0,5 + 0,5i \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$B_2 = \begin{bmatrix} 0,25 + 0,104i & 0,25 - 0,604i & -0,104 + 0,25i & 0,604 + 0,25i \\ 0,25 + 0,604i & 0,25 - 0,104i & 0,604 - 0,25i & -0,104 - 0,25i \\ 0,25 - 0,604i & 0,25 + 0,104i & 0,604 + 0,25i & -0,104 + 0,25i \\ 0,25 - 0,104i & 0,25 + 0,604i & -0,104 - 0,25i & 0,604 - 0,25i \end{bmatrix}, \quad (31)$$

$$B_3 = \begin{bmatrix} 0,209 - 0,041i & -0,062 - 0,312i & 0,100 + 0,503i & 0,753 - 0,150i \\ 0,753 + 0,503i & 0,100 - 0,150i & 0,209 - 0,312i & -0,062 - 0,041i \\ -0,062 - 0,312i & 0,209 - 0,041i & 0,753 - 0,150i & 0,100 + 0,503i \\ 0,100 - 0,150i & 0,753 + 0,503i & -0,062 - 0,041i & 0,209 - 0,312i \end{bmatrix}.$$

Если умножить данную матрицу на входной вектор (23), сформируется итоговое состояние $|final\rangle$:

$$|final\rangle = \left[0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0,25 + 0,105i \ 0,25 + 0,605i \right. \\ \left. 0,25 - 0,605i \ 0,25 - 0,105i \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \right]^T. \quad (32)$$

Для перехода к последнему шагу необходимо найти матрицу плотности вероятностей ρ . Эта матрица формируется путем умножения вектора состояния из уравнения (32) на эрмитово-сопряженный (комплексно-сопряженный и транспонированный) вектор $|final\rangle^\dagger$:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (33)$$

где блок B имеет следующий вид:

$$B = \begin{bmatrix} 0,073 & 0,125 - 0,125i & 0,177i & 0,052 + 0,052i \\ 0,125 + 0,125i & 0,427 & -0,302 + 0,302i & 0,177i \\ 0,177i & -0,302 - 0,302i & 0,427 & 0,125 - 0,125i \\ 0,052 - 0,052i & 0,177i & 0,125 + 0,125i & 0,073 \end{bmatrix}. \quad (34)$$

Заключительный шаг является измерением квантовых состояний.

Измерение

В процессе измерений участвуют две матрицы — проекторы P_0 и P_1 :

$$P_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (35)$$

Если говорить об однокубитной системе, то умножение матрицы-проектора на состояние системы укажет вероятность измерить ее в состоянии 0 или 1 в зависимости от проектора. В рассматриваемом примере в измерении участвует только регистр с информацией о состоянии фазы, в котором 2 кубита, на остальные кубиты действует оператор I . Соответственно, измерение покажет вероятности нахождения системы в состояниях $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$.

Например, вероятность p_0 нахождения системе в состоянии $|00\rangle$ рассчитывается следующим образом:

$$\begin{aligned} p_0 &= \text{tr}(P_0 \otimes P_0 \otimes I \otimes I \cdot \rho) = \\ &= \text{tr} \begin{bmatrix} B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B \end{bmatrix} \cdot \rho = \text{tr} \begin{bmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & b_{8,11} & b_{9,11} & b_{10,11} & b_{10,11} & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix} = 0,0732, \quad (36) \end{aligned}$$

где блок B имеет следующий вид:

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (37)$$

Коэффициенты $b_{r,c}$, где r — номер строки, c — номер столбца, равны $0,052 - 0,052i$, $-0,177i$, $0,125 + 0,125i$, $0,073$.

Таким образом, вероятность измерения коэффициента $k = 0_2 = 0_{10}$, что соответствует фазе $e^{2\pi i 0/2^2} = 1$, равна $0,0732$. Аналогично процедура измерения проводится для остальных возможных значений коэффициента k . Таким образом, вероятность $0,4268$ соответствует $k = 1$, вероятность $0,4268$ соответствует $k = 2$, вероятность $0,0732$ соответствует $k = 3$.

Также убедиться в правильности вычислений можно просуммировав все найденные вероятности — сумма должна равняться единице: $0,0732 + 0,4268 + 0,4268 + 0,0732 = 1$.

Проделав все шаги с 1 по 5 с остальными собственными векторами, можно аналогично получить вероятности двух оставшихся фаз. А именно, при вычислении со входным вектором $[1 \ 0 \ 0 \ 0]^T$ вероятность 0 соответствует $k = 0$, вероятность 1 соответствует $k = 1$, вероятность 0 соответствует $k = 2$, вероятность 0 соответствует $k = 3$.

При вычислении со входным вектором $[0 \ 1 \ 0 \ 0]^T$ результаты получаются аналогичными предыдущему примеру.

При вычислении со входным вектором $[0 \ 0 \ 0 \ 1]^T$ вероятность $0,0452$ соответствует $k = 0$, вероятность $0,8211$ соответствует $k = 1$, вероятность $0,1012$ соответствует $k = 2$, вероятность $0,0325$ соответствует $k = 3$.

Таким образом, дробный коэффициент k препятствует вычислению собственного числа с точностью 100 %.

Рисунок 7 представляет результирующую гистограмму для алгоритма.

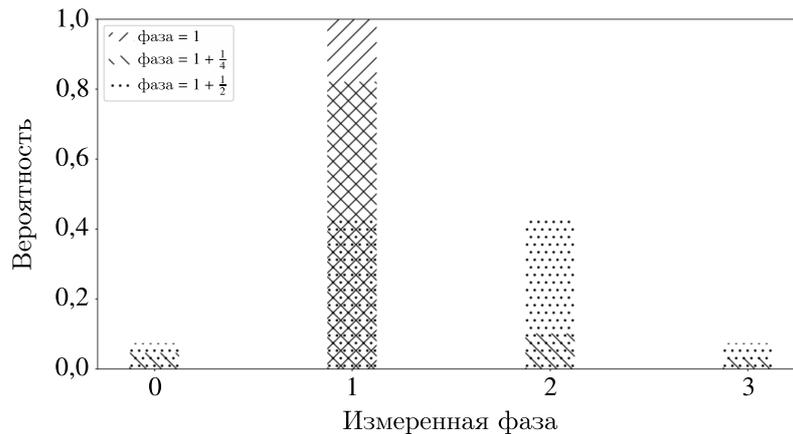


Рис. 7. Гистограмма распределения фаз после измерения результата отработки алгоритма QPE на двух кубитах. Для целочисленных представлений результат оценки фазы отработал однозначно и без погрешности указывает истинную фазу. Для двух других случаев наблюдается распределение вероятностей. В последнем случае фаза находится на равном расстоянии от 1 и 2

Заключение

Проведенное исследование устойчивости алгоритма квантовой оценки фазы (QPE) в условиях равномерного распределения собственных значений унитарного оператора позволило выявить фундаментальные ограничения его разрешающей способности, обусловленные как конечной разрядностью квантового регистра, так и неточностями во входных данных. На основе строгого применения теории возмущений для линейных операторов показано, что точность восстановления фазы не может быть произвольно повышена за счет увеличения числа кубитов: при фиксированном возмущении ϵ число надежно определяемых двоичных разрядов фазы ограничено сверху логарифмической зависимостью $n \ll -\log_2(\epsilon)$. Таким образом, стремление к более высокой точности приводит к усилению чувствительности к малым возмущениям, что в итоге снижает эффективное число достоверных значащих цифр.

Кроме того, установлено, что различимость соседних фаз в спектре унитарного оператора возможна лишь при условии, что амплитуда возмущения не превышает минимального расстояния между фазами, равного $\frac{1}{m}$ для m равномерно распределенных собственных значений. Это условие формализуется как $m \ll \epsilon^{-1}$ и указывает на существование естественного предела плотности спектра, при котором QPE сохраняет свою функциональность. В противном случае возмущения приводят к смешению вероятностных распределений, соответствующих разным фазам, и делают их экспериментальное различие невозможным даже в идеализированных условиях.

Полученные оценки имеют прямое прикладное значение для проектирования практически реализуемых квантовых алгоритмов, использующих QPE в качестве ключевой подпрограммы, в частности алгоритма Харроу – Хассидима – Ллойда (HHL) для решения линейных систем, квантовых алгоритмов химического моделирования и методов спектрального анализа гамильтонианов. В условиях ограниченных ресурсов современных и ближайших квантовых устройств (NISQ-эпоха) такие количественные критерии устойчивости позволяют обоснованно выбирать параметры алгоритма — число кубитов, глубину схемы, допустимый уровень погрешности — с учетом не только вычислительной сложности, но и физической реализуемости.

Список литературы (References)

- Кутаев А. Ю. Квантовые вычисления: алгоритмы и исправление ошибок // Успехи математических наук. — 1997. — Т. 52, № 6 (318). — С. 53–112.

- Kitaev A. Yu.* Quantum computations: algorithms and error correction // Russian Mathematical Surveys. — 1997. — Vol. 52, No. 6. — P. 1191–1249. (Original Russian paper: *Kitaev A. Yu.* Kvantovye vychisleniya: algoritmy i ispravlenie oshibok // Uspekhi matematicheskikh nauk. — 1997. — Vol. 52, No. 6 (318). — P. 53–112.)
- Barenco A., Bennett C. H., Cleve R., DiVincenzo D. P., Margolus N., Shor P., Sleator T., Smolin J. A., Weinfurter H.* Elementary gates for quantum computation // Physical Review A. — 1995. — Vol. 52. — P. 3457.
- Buhrman H., Cleve R., De Wolf R., Zalka C.* Bounds for small-error and zero-error quantum algorithms // Proceedings of the 40th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS'99). — IEEE, 1999. — P. 358–368.
- Coppersmith D.* An approximate Fourier transform useful in quantum factoring // arXiv preprint. — 2002. — arXiv:quant-ph/0201067
- Glebov S. G.* Nonlinear equations with small parameter. — Berlin: De Gruyter, 2024. — Vol. 1–2.
- Kato T.* Perturbation theory for linear operators. — Springer Science & Business Media, 2013. — Vol. 132.
- Lloyd S.* Quantum algorithm for solving linear systems of equations // APS March Meeting Abstracts. — 2010. — Vol. 2010. — P. D4–002.
- Shor P. W.* Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring // Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS'94). — IEEE, 1994. — P. 124–134.