

# 量子均值估计算法研究进展



冯世光, 高诚伸, 李绿周\*

(中山大学 计算机学院, 广州 510006)

**摘要** 随机变量的均值估计问题一直是经典数据分析中研究的热点, 均值估计算法的目的是通过对随机变量尽可能少地采样从而获得尽可能准确的均值估计值。量子计算作为一项革命性的技术, 在一些问题上具有超越经典计算的优势。量子算法在均值估计问题上相对于经典算法具有平方加速, 展现了量子计算的优越性。该文系统梳理了量子均值估计算法的发展历程, 详细介绍了各阶段的算法流程及其优缺点, 并对其主要应用场景进行了展示, 最后讨论了量子均值估计算法的潜在发展方向。

**关键词** 随机变量; 均值估计; 量子算法; Grover 算法

中图分类号 TP301.6 文献标志码 A DOI 10.12178/1001-0548.2024012

## Research Advances of Quantum Mean Estimation Algorithms

FENG Shiguang, GAO Chengshen, and LI Lyvzhou\*

(School of Computer Science and Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510006, China)

**Abstract** The problem of estimating the mean of a random variable has long been a focal point of research in classical data analysis. The objective of mean estimation algorithms is to obtain an accurate estimate of the mean with as few samples of the random variable as possible. Quantum computing, as a revolutionary technology, offers advantages over classical computing in certain problems. Quantum algorithms provide a quadratic speedup in the problem of mean estimation, demonstrating the superiority of quantum computing in this aspect. This paper systematically reviews the development of quantum mean estimation algorithms, providing a detailed introduction to the algorithmic processes at each stage, along with their advantages and disadvantages. Furthermore, the primary application scenarios of these algorithms are presented. Finally, potential future directions for the development of quantum mean estimation algorithms are discussed.

**Key words** random variables; mean estimation; quantum algorithms; Grover's algorithm

统计学在科学研究中扮演着至关重要的角色, 它提供了丰富的数据分析方法和技术。均值估计<sup>[1-3]</sup>是统计学的基本方法之一, 其目的是获得满足某一分布的随机变量的均值估计值, 通常的做法是对随机变量进行多次采样, 利用样本获得均值估计值。以尽可能少的采样获得尽可能准确的均值估计值是均值估计算法的关键。随着均值估计问题的深入研究<sup>[4-5]</sup>, 出现了许多基于均值估计的应用, 如回归<sup>[6-9]</sup>、经验风险最小化<sup>[10-11]</sup>、赌博机问题<sup>[12-14]</sup>。

量子计算作为一项革命性的技术, 为解决某些经典计算难以处理的问题提供了新的途径。量子计算在一些特定问题上具有超越传统计算的优势, 如

因数分解<sup>[15]</sup>、优化问题<sup>[16-17]</sup>、量子系统模拟<sup>[18]</sup>、搜索问题<sup>[19-20]</sup>等。随着量子计算理论和实践的不断深化, 学者们提出了许多在经典计算中难以实现的算法和技术。其中, 量子均值估计 (Quantum Mean Estimation, QME) 作为一个引人注目的研究方向, 为量子计算的应用提供了新的可能性。文献 [21] 提出了一般情况下的量子均值估计算法, 其相比于相同条件下的经典算法具有平方加速。量子计算的许多研究工作也基于此结果得到了推动和拓展, 如量子金融<sup>[22]</sup>、随机优化<sup>[23-24]</sup>、元素查找问题<sup>[25]</sup>等。

为了更好地了解量子均值估计的研究现状和进

收稿日期: 2024-01-09; 修回日期: 2024-04-15

基金项目: 国家自然科学基金 (62272492); 广东省基础与应用基础研究基金 (2020B1515020050)

作者简介: 冯世光, 副研究员, 主要从事可计算理论与计算复杂性理论、量子算法、计算机逻辑等方面研究。

\*通信作者 E-mail: lilvzh@mail.sysu.edu.cn

展, 为未来的研究提供参考, 本文对量子均值估计算法的重要研究成果和发展脉络进行了梳理和总结。首先介绍了量子随机变量模型和涉及的基本量子算法, 进而系统阐述量子均值估计算法的研究历程, 详细介绍了各阶段的算法流程及其优缺点, 并展示了一些算法的主要应用场景, 最后总结存在的问题和未来的研究方向。

## 1 背景

### 1.1 量子随机变量模型

在量子计算中, 使用叠加态表示一个有限概率空间上的随机变量。有限概率空间由  $(\Omega, p)$  表示, 其中  $\Omega$  表示有限集合,  $p$  表示有限集合中各个点的概率, 满足  $\sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) = 1$ , 其中  $\omega \in \Omega$ ,  $p(\omega) \geq 0$ 。在  $(\Omega, p)$  上的随机变量  $X$  满足:

$$\Pr[X = x(\omega)] = p(\omega) \quad (1)$$

随机变量  $X$  可以由两个酉操作来实现, 分别为合成酉操作  $\mathcal{P}$  和采样酉操作  $\mathcal{X}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}|\theta\rangle &= \sum_{\omega \in \Omega} \sqrt{p(\omega)}|\omega\rangle|\text{Gar}_\omega\rangle \\ \mathcal{X}|\theta\rangle|\theta\rangle &= |\omega\rangle|x_\omega\rangle|\theta\rangle \end{aligned} \quad (2)$$

对于特殊情况  $p(\omega) = \frac{1}{\sqrt{N}}$ , 随机变量  $X$  可以视为有限集  $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  上的均匀分布, 酉操作  $\mathcal{P}$  为  $H^{\otimes \lceil \log N \rceil}$ 。算法允许使用  $\mathcal{P}, \mathcal{P}^\dagger, \mathcal{X}, \mathcal{X}^\dagger$  4 种操作, 采样复杂度表示为  $\mathcal{X}, \mathcal{X}^\dagger$  的使用次数。

### 1.2 基础算法

量子均值估计算法通常是在一些基础算法上进行拓展, 这些基础算法包括 Grover 算法、量子相位估计算法和量子振幅估计算法。

#### 1) Grover 算法

搜索问题可以进行如下描述, 在  $N$  个元素的空间中有  $M$  个元素是搜索的目标 ( $1 \leq M \leq N$ ), 存在一个函数  $f$ , 对于这  $N$  个元素中的任意一个元素  $x$ , 若  $x$  是搜索的目标, 那么  $f(x) = 1$ , 否则  $f(x) = 0$ 。量子计算中实现函数  $f$  作用的是一个酉操作  $O_f$ , 满足:

$$O_f|x\rangle|q\rangle = |x\rangle|q \oplus f(x)\rangle \quad (3)$$

式中,  $\oplus$  表示模 2 加。Grover 算法通过调用  $O\left(\sqrt{\frac{N}{M}}\right)$  次  $O_f$  便可以获得一个目标, 这相比于经典算法具有平方加速。

#### 2) 量子相位估计算法

酉矩阵  $U$  的一个特征向量  $|u\rangle$ , 其对应的特征值是  $e^{i2\pi\varphi}$ 。量子相位估计算法通过调用  $2^t$  次酉矩阵  $U$ , 可以获得具有一定误差的  $\varphi$  估计值  $\varphi'$ , 满足:

$$t = n + \left\lceil \log\left(2 + \frac{1}{2\epsilon}\right) \right\rceil, \Pr\left[|\varphi - \varphi'| \leq \frac{1}{2^n}\right] \geq 1 - \epsilon \quad (4)$$

#### 3) 量子振幅估计算法

现有酉操作  $A$  满足:

$$A|0\rangle = \sqrt{\alpha}|\Psi_0\rangle + \sqrt{1-\alpha}|\Psi_1\rangle \quad (5)$$

式中,  $\alpha \in [0, 1]$  是需要估计的振幅;  $\langle \Psi_0 | \Psi_1 \rangle = 0$ 。量子振幅估计算法结合了 Grover 算法和量子相位估计算法, 对振幅  $\alpha$  进行估计。算法通过调用  $O(n)$  次  $A$  输出振幅的估计值  $\alpha'$ , 满足:

$$\Pr\left[|a - a'| \leq \frac{\sqrt{a(1-a)}}{n} + \frac{1}{n^2}\right] \geq \frac{8}{\pi^2} \quad (6)$$

特别地, 当  $\alpha = 0$  或  $\alpha = 1$  时, 该算法输出  $a' = 0$  或  $a' = 1$  的概率为 1。

这 3 个算法的思想相似, 均包含了对同一个酉矩阵模块的重复调用。这一过程会使得最后的态包含需要的某些信息, 通过多次测量等手段可以将信息进行提取, 如相位、振幅等。

## 2 发展历程

量子均值估计的发展历程可以分为 3 个阶段:

- 1) 初期阶段, 随机变量较为简单, 通常  $X \in \{0, 1\}$  或  $X \in [0, 1]$ , 量子均值估计算法以 Grover 算法为基础进行拓展;
- 2) 完善阶段, 随机变量模型得到了规范化, 随机变量更为复杂, 同时量子均值估计算法以更复杂的量子振幅估计算法为基础进行设计。
- 3) 拓展阶段, 量子均值估计算法基于更复杂的量子游走<sup>[26]</sup>和量子动力学<sup>[27]</sup>, 发展出了最优的量子均值估计算法和多维量子均值估计算法。

### 2.1 初期阶段

在初期阶段中, 随机变量表现为有限集  $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  上的均匀分布, 其中  $x_i \in \{0, 1\}$  或  $x_i \in [0, 1]$ 。当  $x_i \in \{0, 1\}$  时, 利用 Grover 算法<sup>[28]</sup>可以对均值  $\mu$  的大小进行判断, 判断  $\mu = 0$  或  $\mu \geq \frac{1}{N}$ 。此算法的采样复杂度为  $O(\sqrt{N})$ , 这是第一个考虑均值估计问题的量子算法。

之后, Grover 利用 Grover 算法的框架提出了振幅放大算法<sup>[29]</sup>。现有初始态  $|s\rangle$  和酉操作  $U$  满足:

$$U|s\rangle = \sqrt{a}|t\rangle + \sqrt{1-a}|t_\perp\rangle \quad (7)$$

振幅放大算法通过调用  $O\left(\sqrt{\frac{1}{a}}\right)$  次酉操作  $U$  可以以高概率获得目标态  $|t\rangle$ 。当  $x_i \in [0, 1]$ ,  $N = 2^n$  时, Grover 利用振幅放大算法设计了均值  $\mu$  的量子均值估计算法, 其具体做法如下描述。利用  $n+2$  个量子比特构建了一个含有  $2^{n+1} + 1$  个计算基的量子系统, 构建方法为:

$$\begin{aligned} S_0, S_1, \dots, S_{N-1} &: |00A_\alpha\rangle \\ R_0, R_1, \dots, R_{N-1} &: |01A_\alpha\rangle \\ Q &: |1\underbrace{0\dots 0}_{n+1}\rangle \end{aligned} \quad (8)$$

式中,  $A_\alpha = \{0, 1\}^n$ ,  $\alpha \in \{0, \dots, N-1\}$ 。之后设计了 4 个酉矩阵  $M_1, M_2, Y_1, W_1$  用来联系  $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  和  $R_\alpha, S_\alpha, Q$ 。构建酉操作  $U = M_1 W_1 Y_1 W_1 M_2$  满足:

$$U|S_0\rangle = \frac{i\mu}{\sqrt{2}}|S_0\rangle + |\perp\rangle, \langle S_0|\perp\rangle = 0 \quad (9)$$

对  $|S_0\rangle$  进行振幅放大, 使其振幅变为  $\frac{i\mu}{\sqrt{2}}$ , 因此测量后得到  $|S_0\rangle$  的概率为  $\frac{(m\mu)^2}{2}$ , 算法共调用了  $O(m)$  次  $U$  和  $U^\dagger$ 。通过不断地测量, 得到  $|S_0\rangle$  的次数  $F$  来估计  $\frac{(m\mu)^2}{2}$ 。这一系列过程调用  $U$  和  $U^\dagger$  的次数为  $O(m \cdot \text{polylog}(m))$ 。在  $U$  的构建中,  $Y_1$  利用  $O(1)$  次  $X$ , 因此此算法的采样复杂度为  $O(m \cdot \text{polylog}(m))$ 。

这一阶段的量子均值估计算法比较简单, 对输入的随机变量限制较大, 算法的效果较差且代价较高, 但为之后的算法提供了参考。

## 2.2 完善阶段

文献 [30] 基于量子计数提出了量子振幅估计算法<sup>[31]</sup>, 并利用此算法估计了  $x_i \in \{0, 1\}$  时的均值。当  $x_i \in \{0, 1\}$  且  $\Pr[x_i = 1] = p$  时, 有:

$$\begin{aligned} \mu &= p \\ \sigma &= \sqrt{p(1-p)} = \sqrt{\mu(1-\mu)} \\ \mathcal{X}\mathcal{P}|\theta\rangle &= \sqrt{p}|\psi_1\rangle|1\rangle + \sqrt{1-p}|\psi_0\rangle|0\rangle \end{aligned} \quad (10)$$

对  $|\psi_1\rangle|1\rangle$  进行振幅估计, 使用  $O(m)$  次  $X$  和  $X^\dagger$  可以得到:

$$\Pr\left[|\mu' - \mu| \leq \frac{\sqrt{\mu(1-\mu)}}{m} + \frac{1}{m^2}\right] \geq \frac{8}{\pi^2} \quad (11)$$

当  $\sigma \ll \frac{1}{m}$  时,  $\mu \ll \frac{1}{m^2}$  或  $1-\mu \ll \frac{1}{m^2}$ , 算法会输出 0 或 1, 误差在  $\frac{\sigma}{m}$  范围内。反之  $\frac{1}{m^2} \leq \frac{\sigma}{m}$ , 误差在  $\frac{\sigma}{m}$  范围内。因此算法的采样复杂度为  $O(m)$ , 误差为  $\frac{\sigma}{m}$ 。

文献 [32] 将此结果拓展到  $x_i \in [0, 1]$ , 其做法为增加了旋转  $R$  满足:

$$R|i\rangle|x_i\rangle|0\rangle = |i\rangle|x_i\rangle\left(\sqrt{x_i}|1\rangle + \sqrt{1-x_i}|0\rangle\right) \quad (12)$$

此时  $|1\rangle$  的振幅为  $\sqrt{\mu}$ 。利用量子振幅估计算法得到振幅的估计值  $\mu'$ , 采样复杂度为  $O(m)$ , 误差为  $\frac{\sqrt{\mu}}{m}$ 。

文献 [33] 基于量子振幅估计算法和文献 [32] 将  $x_i$  拓展到  $(-\infty, +\infty)$  且  $\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \leq 1$ , 其做法为对于  $\{x_i \notin [0, 1]\}$ , 对集合  $\left\{\frac{x_i}{2^l} | 2^{l-1} \leq x_i < 2^l\right\}$  和  $\left\{\frac{-x_i}{-2^l} | -2^l \leq x_i < -2^{l-1}\right\}$  进行均值估计。但以上的算法仅考虑了有限集合, 缺乏对更复杂的随机变量的讨论。文献 [34] 借鉴了文献 [33] 的做法, 将有限集  $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  拓展为随机变量  $X$ , 并且将  $\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \leq 1$  拓展到  $\sigma \leq \sigma_0$  ( $\sigma_0$  已知)。文献 [34] 的做法有 3 处改善:

1) 通过重复  $O\left(\log \frac{1}{\delta}\right)$  次均值估计使得算法的成功概率常数变为  $1-\delta$ ;

2) 当  $X \geq 0$  时, 进行了更清晰地划分:

$$\begin{aligned} k &= \lceil \log m \rceil \quad l = 0, \dots, k \\ X_0 &= X \mathbb{I}_{[0,1]} \quad X_l = X \mathbb{I}_{[2^{l-1}, 2^l)} \end{aligned} \quad (13)$$

3) 当  $\sigma \leq \sigma_0$  时, 利用一次采样值  $t$  重新构建随机变量  $X' = \frac{X-t}{\sigma_0}$ , 对  $X'$  进行均值估计即可得到  $X$  的均值估计值  $\mu'$ , 满足  $|\mu' - \mu| \leq \frac{\sigma_0}{m}$ , 算法的采样复杂度为  $O\left(m \log^{\frac{3}{2}} m \cdot \log(\log m)\right)$ 。文献 [34] 的算法放宽了随机变量的限定条件, 但没有讨论更一般的情况。

文献 [35] 考虑了一般情况, 即仅已知  $\sigma$  有限下的量子均值估计算法, 其算法的主要创新为利用 Grover 算法估计出了随机变量  $X$  的分位数  $Q_p$ :

$$\Pr[X \geq Q_p] = p \quad p \in [0, 1] \quad (14)$$

由于  $\sigma$  是有限的, 因此:

$$\Pr[X \rightarrow \infty] = 0 \quad (15)$$

所以当  $X$  的取值趋近于  $\infty$ , 概率趋近于 0。考虑如下量子态:

$$|\varphi\rangle = \sqrt{p}|1\rangle \sum_{x \geq Q_p} |x\rangle|\phi_1\rangle + \sqrt{1-p}|0\rangle \sum_{x < Q_p} |x\rangle|\phi_0\rangle \quad (16)$$

执行  $O\left(\frac{1}{\sqrt{p}}\right)$  次 Grover 迭代后能以高概率得到  $x$  满足  $x \geq Q_p$ , 并且通过限制 Grover 迭代的次数,

使得  $x \leq Q_{cp}$ , 其中  $c < 1$  是常数。  $x$  作为分位数的估计值  $Q'_p$  满足  $Q_p \leq Q'_p \leq Q_{cp}$ , 此算法采样复杂度为  $O\left(\frac{1}{\sqrt{p}}\right)$ 。

$Q'_p$  的作用是确定估计随机变量均值时的边界。由  $Q_p \leq Q'_p \leq Q_{cp}$  可得  $cp \leq \Pr[X \geq Q'_p] \leq p$ , 并且满足:

$$\begin{aligned} Q'_p &\leq \frac{s}{\sqrt{cp}} \\ \mathbb{E}[X \mathbb{1}_{X \geq Q'_p}] &\leq s\sqrt{p} \\ s^2 &= \mathbb{E}[X^2] \end{aligned} \quad (17)$$

得到  $Q'_p$  后, 文献 [35] 做法参考了文献 [34] 的做法, 利用采样值  $t$  重新构建随机变量  $X' = \frac{X-t}{Q'_p}$ , 其中  $p = O\left(\frac{1}{m}\right)^2$ , 对  $X'$  进行均值估计即可有效地得到  $X$  的均值估计值  $\mu'$ , 满足  $|\mu' - \mu| \leq \frac{\sigma}{m}$ , 算法的采样复杂度为  $O(m \log^{\frac{3}{2}} m \cdot \log(\log m))$ 。

### 2.3 拓展阶段

随着量子计算的发展, 越来越多的量子算法被提出。量子游走技术和哈密顿量模拟技术被应用在量子均值估计问题上, 发展出了最优一维量子均值估计算法和近最优的多维量子均值估计算法。

文献 [21] 参考量子游走提出了最优的一维量子均值估计算法。此算法的核心是构建了可区分  $|\mu| \leq \frac{1}{2m}$  和  $|\mu| \geq \frac{1}{m}$  的子过程, 其主要做法是构建了如下酉矩阵:

$$\begin{aligned} A &= \mathcal{P}(2|\theta\rangle\langle\theta| - I)\mathcal{P}^\dagger \\ B|\omega\rangle &= \frac{1 - ix_\omega}{1 + ix_\omega} |\omega\rangle \\ U = AB &= \sum_j e^{i\theta_j} |u_j\rangle\langle u_j| \end{aligned} \quad (18)$$

式中,  $|u_j\rangle$  是  $U$  的特征值为  $e^{i\theta_j}$  的特征向量。而当  $s \leq 1$  时,  $U\mathcal{P}|\theta\rangle$  的  $e^{i\theta_j}$  具有如下分布:

$$\Pr\left[\frac{8}{5}|\mu| \leq |\theta_j| \leq \frac{5}{2}|\mu|\right] \geq \frac{7}{9} \quad (19)$$

因此通过判断  $\theta_j$  可以间接地获取  $|\mu|$ 。利用量子相位估计算法, 以  $O(m)$  的采样复杂度和  $\frac{2}{3}$  的概率区分  $|\mu| \leq \frac{1}{2m}$  和  $|\mu| \geq \frac{1}{m}$ 。

之后利用二分查找将条件拓展到  $s \leq s_0$ 。令  $X^\dagger = \frac{X}{s_0}$ , 其均值为  $\mu^\dagger$ , 通过二分法判断  $\mu^\dagger$  的大小, 以  $O(m)$  的采样复杂度, 得到估计值  $\tilde{\mu}$  满足

$|\tilde{\mu} - \mu| \leq \frac{s_0}{m}$ 。最后拓展至仅已知  $\sigma$  有限的情况, 其做法与文献 [35] 的算法相似。在仅已知  $\sigma$  有限的情况下, 文献 [21] 的算法以  $O(m)$  的采样复杂度, 得到误差为  $\frac{\sigma}{m}$  的估计值  $\mu'$ 。此算法的采样复杂度达到了最优的  $\Theta(m)$ , 对一维量子均值估计问题进行了完整地解答。

次最优高维量子均值估计算法<sup>[36]</sup> 将多维均值在各个方向上的分量加载到相位上, 之后通过逆傅里叶变换将多维均值提取出来。首先构建了集合:

$$G = \left\{ \frac{j}{n} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2n} : j \in \{0, \dots, n-1\} \right\}^d \quad (20)$$

式中,  $d$  表示维度。当  $\|X\|_2 \leq 1$  且  $\mathbb{E}[\|X\|_2] \leq 1$  时, 构建酉变换  $V$  满足  $V|\theta\rangle = e^{im\mathbb{E}[\alpha(u, X_\omega)]} |\theta\rangle$  并且此量子态接近于  $e^{im\alpha(u, \mathbb{E}[X])} |\theta\rangle$ 。  $|u\rangle$  的傅里叶变换满足:

$$Q: |u\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{n^d}} \sum e^{i2\pi n\langle u|v\rangle} |v\rangle \quad (21)$$

因此构建  $|G\rangle = \frac{1}{\sqrt{n^d}} \sum |u\rangle$  并作用  $Q^\dagger V$ , 可得到  $\mathbb{E}[X]$ 。之后类似于文献 [35] 的做法, 将限定条件进行放松, 最后得到估计值  $\mu'$  满足:

$$\begin{aligned} \|\mu' - \mu\| &\leq \\ &\begin{cases} \sqrt{\frac{\text{Tr}(\Sigma)}{m}} + \sqrt{\frac{\|\Sigma\| \log(1/\delta)}{m}} & (m \leq d) \\ \frac{\sqrt{d \text{Tr}(\Sigma) \log(d/\delta)}}{m} & (m > d) \end{cases} \end{aligned} \quad (22)$$

式中,  $\Sigma$  是协方差矩阵;  $\text{Tr}(\Sigma)$  是  $\Sigma$  的迹, 算法采样复杂度为  $O(m \cdot \text{polylog} m)$ 。

次最优高维量子均值估计算法<sup>[36]</sup> 虽然考虑了高维随机变量, 但流程过于复杂, 并且其做法与文献 [35] 的方法相似, 没有利用高维随机变量的特性, 因此算法的采样复杂度在  $m \leq d$  时并不具备加速优势。

## 3 应用

### 3.1 估计配分函数

量子均值估计可以用来估计配分函数。现有一个经典的物理系统, 具有状态空间  $\Omega$ , 对应一个哈密顿量  $H: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  表示每一层级  $\omega \in \Omega$  的能量。假设  $H$  的取值在  $\{0, 1, \dots, n\}$  这个整数集内。核心问题是计算如下的配分函数:

$$Z(\beta) = \sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta H(\omega)} \quad (23)$$

式中,  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ;  $T$  表示温度;  $k_B$  表示玻尔兹曼常

数。估计 $\beta$ 较大的 $Z(\beta)$ 十分困难, 但当 $\beta=0$ , 估计 $Z(\beta)=|\mathcal{Q}|$ 十分容易。估计配分函数的目标是以相对小的误差 $\epsilon$ 估计出 $Z(\beta)$ 。经典算法<sup>[37-38]</sup>基于如下表述:

$$Z(\beta_l) = Z(\beta_0) \frac{Z(\beta_1)}{Z(\beta_0)} \cdots \frac{Z(\beta_l)}{Z(\beta_{l-1})} \quad (24)$$

式中,  $0 = \beta_0 < \beta_1 < \cdots < \beta_l = \infty$ 。通过计算 $Z(\beta_0)$ 和估计 $\alpha_i = \frac{Z(\beta_{i+1})}{Z(\beta_i)}$ 可以估计出 $Z(\beta_l)$ 。令 $\pi_i$ 表示关于 $\beta_i$ 的分布:

$$\pi_i(x) = \frac{1}{Z(\beta_i)} e^{\beta_i H(x)} \quad (25)$$

并定义如下随机变量:

$$Y_i(x) = e^{-(\beta_{i+1} - \beta_i)H(x)} \quad (26)$$

此时 $\mathbb{E}_{\pi_i}[Y_i] = \alpha_i$ 。所以从分布 $\pi_i$ 采样便可以估计 $\alpha_i$ 。此种方法要求 $\frac{\mathbb{E}[Y_i^2]}{\mathbb{E}[Y_i]^2}$ 较小, 而切比雪夫冷却法<sup>[37]</sup>设计出一系列 $\beta_i$ 使得 $\frac{\mathbb{E}[Y_i^2]}{\mathbb{E}[Y_i]^2} = O(1)$ 。对于 $|\mathcal{Q}| = A$ , 存在一个切比雪夫冷却方法满足 $l = O(\sqrt{\log A} \log(\log A))$ 。量子均值估计在估计 $\alpha_i$ 时量子算法的采样复杂度为 $O(lm)$ , 误差为 $O(\frac{1}{ml})$ 。

### 3.2 区分概率分布

假设 $q$ 和 $r$ 是在 $[D]$ 上的概率分布, 并且存在算法可以从 $[D]$ 上的未知概率分布 $p$ 上采样, 区分概率分布的目的是区分 $p=q$ 或 $p=r$ 。目前最优的经典算法<sup>[39]</sup>的采样复杂度为 $O(\frac{1}{H(q,r)^2})$ , 其中 $H^2(q,r) = \sum_{i=1}^D (\sqrt{q_i} - \sqrt{r_i})^2$ 表示 $q$ 和 $r$ 的 Hellinger 距离。文献<sup>[40]</sup>表明如果拥有对 $p$ 的量子编码, 那么存在量子算法用 $O(\frac{1}{H(q,r)})$ 次采样便可以区分 $p=q$ 或 $p=r$ 。

令 $H = H(q,r)$ , 定义如下随机变量 $Y: [D] \rightarrow \mathbb{R}$ 满足:

$$y(i) = \frac{\sqrt{q_i} - \sqrt{r_i}}{\sqrt{q_i} + \sqrt{r_i}} \quad (27)$$

令 $\mu_q = \mathbb{E}_q[Y]$ ,  $\sigma_q^2 = \text{Var}_q[Y]$ ,  $\mu_r$ 和 $\sigma_r$ 同理, 其满足:

$$\begin{aligned} \mu_q - \mu_r &= H^2 \\ \sigma_q^2 + \sigma_r^2 &\leq H^2 \end{aligned} \quad (28)$$

因此以 $\frac{H^2}{2}$ 的误差估计 $\mathbb{E}_q[Y]$ 可以区分 $p=q$ 或 $p=r$ 。经典算法为了确保 $\frac{\sigma_p}{\sqrt{m}} \leq \frac{H}{\sqrt{m}} < \frac{H^2}{2}$ , 其采样

复杂度为 $O(\frac{1}{H^2})$ 。但量子算法只需要确保 $\frac{H}{m} < \frac{H^2}{2}$ , 因此其采样复杂度为 $O(\frac{1}{H})$ 。

## 4 结束语

本文对量子均值估计算法的输入模型和涉及的基本算法进行了描述, 详细描述了各阶段算法流程及其优缺点, 并且展示了量子均值估计算法的一些主要应用。量子均值估计是量子计算的一个重要研究方向, 其旨在高效地估计期望值。目前一维随机变量均值估计问题已经被完美解决, 但当维度大于采样次数时目前的量子算法相比于经典算法在采样复杂度上不具有加速优势。如何获得最优多维次高斯量子均值估计是今后值得深入研究的问题。与此同时, 量子均值估计已经在量子信息处理、量子机器学习和凸优化等领域展现出巨大的潜力, 未来可以进一步研究利用量子均值估计去解决上述领域中的一些问题, 如最大似然估计、位置估计等。

### 参考文献

- [1] ALON N, MATIAS Y, SZEGEDY M. The space complexity of approximating the frequency moments [C]//Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on Theory of Computing. New York: ACM, 1996: 20-29.
- [2] JERRUM M R, VALIANT L G, VAZIRANI V V. Random generation of combinatorial structures from a uniform distribution[J]. *Theoretical Computer Science*, 1986, 43: 169-188.
- [3] HUBER P J. Robust estimation of a location parameter [M]. *Breakthroughs in Statistics*. New York: Springer, 1992.
- [4] CATONI O. Challenging the empirical mean and empirical variance: A deviation study[J]. *Annales De L'Institut Henri Poincaré, Probabilités et Statistiques*, 2012, 48(4): 1148-1185.
- [5] LEE J C, VALIANT P. Optimal sub-Gaussian Mean Estimation in  $\mathbb{R}[C]$ // 2021 IEEE 62nd Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS). Piscataway, NJ: IEEE, 2022: 672-683.
- [6] AUDIBERT J Y, CATONI O. Robust linear least squares regression[EB/OL]. [2023-05-10]. <https://arxiv.org/pdf/1010.0074v1>.
- [7] CATONI O, GIULINI I. Dimension-free PAC-Bayesian bounds for matrices, vectors, and linear least squares regression[EB/OL]. [2023-06-10]. <http://arxiv.org/abs/1712.02747v2>.
- [8] CHICHIGNOUD M, LEDERER J. A robust, adaptive M-estimator for pointwise estimation in heteroscedastic regression[J]. *Bernoulli*, 2014, 20(3): 1560-1599.
- [9] FAN J Q, LI Q F, WANG Y Y. Estimation of high dimensional mean regression in the absence of symmetry and light tail assumptions[J]. *Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology*, 2017, 79(1):

- 247-265.
- [10] BROWNLEES C, JOLY E, LUGOSI G. Empirical risk minimization for heavy-tailed losses[J]. *The Annals of Statistics*, 2015, 43(6): 2507-2536.
- [11] LECUÉ G, LERASLE M, MATHIEU T. Robust classification via MOM minimization[J]. *Machine Learning*, 2020, 109(8): 1635-1665.
- [12] BUBECK S, CESA-BIANCHI N, LUGOSI G. Bandits with heavy tail[J]. *IEEE Transactions on Information Theory*, 2013, 59(11): 7711-7717.
- [13] LU S, WANG G, HU Y, et al. Optimal algorithms for Lipschitz bandits with heavy-tailed rewards[C]// *International Conference on Machine Learning*. New York: PMLR, 2019: 4154-4163.
- [14] DUBEY A, PENTLAND A. Cooperative multi-agent bandits with heavy tails[C]// *Proceedings of the 37th International Conference on Machine Learning*. New York: ACM, 2020: 2730-2739.
- [15] SHOR P W. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer[J]. *SIAM Journal on Computing*, 1997, 26(5): 1484-1509.
- [16] BARITOMPA W P, BULGER D W, WOOD G R. Grover's quantum algorithm applied to global optimization[J]. *SIAM Journal on Optimization*, 2005, 15(4): 1170-1184.
- [17] AMARO D, MODICA C, ROSENKRANZ M, et al. Filtering variational quantum algorithms for combinatorial optimization[J]. *Quantum Science and Technology*, 2022, 7(1): 015021.
- [18] BAUER B, BRAVYI S, MOTTA M, et al. Quantum algorithms for quantum chemistry and quantum materials science[J]. *Chemical Reviews*, 2020, 120(22): 12685-12717.
- [19] LONG G L. Grover algorithm with zero theoretical failure rate[J]. *Physical Review A*, 2001, 64(2): 022307.
- [20] YODER T J, LOW G H, CHUANG I L. Fixed-point quantum search with an optimal number of queries[J]. *Phys Rev Lett*, 2014, 113(21): 210501.
- [21] KOTHARI R, O'DONNELL R. Mean estimation when you have the source code; or, quantum Monte Carlo methods[M]// BANSAL N, NAGARAJAN V, eds. *Proceedings of the 2023 Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms (SODA)*. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2023: 1186-1215.
- [22] HERMAN D, GOOGIN C, LIU X Y, et al. Quantum computing for finance[J]. *Nature Reviews Physics*, 2023, 5(8): 450-465.
- [23] LI T Y, ZHANG R Z. Quantum speedups of optimizing approximately convex functions with applications to logarithmic regret stochastic convex bandits[C]// *Proceedings of the 36th International Conference on Neural Information Processing Systems*. New York: ACM, 2022: 3152-3164.
- [24] SIDFORD A, ZHANG C. Quantum speedups for stochastic optimization[EB/OL]. [2023-06-15]. <https://arxiv.org/pdf/2308.01582>.
- [25] VAN APELDOORN J, GRIBLING S, NIEUWBOER H. Basic quantum subroutines: Finding multiple marked elements and summing numbers[J]. *Quantum*, 2024, 8: 1284.
- [26] KADIAN K, GARHWAL S, KUMAR A. Quantum walk and its application domains: A systematic review[J]. *Computer Science Review*, 2021, 41: 100419.
- [27] MIESSEN A, OLLITRAULT P J, TACCHINO F, et al. Quantum algorithms for quantum dynamics[J]. *Nature Computational Science*, 2023, 3: 25-37.
- [28] GROVER L K. A fast quantum mechanical algorithm for database search[C]// *Proceedings of the 28th annual ACM symposium on Theory of Computing*. New York: ACM, 1996: 212-219.
- [29] GROVER L K. A framework for fast quantum mechanical algorithms[C]// *Proceedings of the thirtieth annual ACM symposium on Theory of computing*. New York: ACM, 1998: 53-62.
- [30] BRASSARD G, HØYER P, TAPP A. Quantum counting [M]// LARSEN K G, SKYUM S, WINSKEL G, eds. *Automata, Languages and Programming*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1998.
- [31] BRASSARD G, HØYER P, MOSCA M, et al. Quantum amplitude amplification and estimation[J]. *Contemporary Mathematics*, 2002, 305: 53-74.
- [32] TERHAL B. Quantum algorithms and quantum entanglement[D]. Amsterdam: University of Amsterdam, 1999.
- [33] HEINRICH S. Quantum summation with an application to integration[J]. *Journal of Complexity*, 2002, 18(1): 1-50.
- [34] MONTANARO A. Quantum speedup of Monte Carlo methods[J]. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2015, 471(2181): 20150301.
- [35] HAMOUDI Y. Quantum sub-gaussian mean estimator [EB/OL]. [2023-08-21]. <https://arxiv.org/pdf/2108.12172.pdf>.
- [36] CORNELISSEN A, HAMOUDI Y, JERBI S. Near-optimal Quantum algorithms for multivariate mean estimation[C]// *Proceedings of the 54th Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*. New York: ACM, 2022: 33-43.
- [37] ŠTEFANKOVIČ D, VEMPALA S, VIGODA E. Adaptive simulated annealing: A near-optimal connection between sampling and counting[J]. *Journal of the ACM*, 2009, 56(3): 18.
- [38] BEŽÁKOVÁ I, ŠTEFANKOVIČ D, VAZIRANI V V, et al. Accelerating simulated annealing for the permanent and combinatorial counting problems[J]. *SIAM Journal on Computing*, 2008, 37(5): 1429-1454.
- [39] BAR-YOSSEF Z. The complexity of massive data set computations[M]. Berkeley: University of California, 2002.
- [40] BELOVS A. Quantum algorithms for classical probability distributions[EB/OL]. [2023-08-25]. <http://arxiv.org/abs/1904.02192v1>.