arXiv:2602.04700v1 [quant-ph] 4 Feb 2026

决策树中的量子优势：加权图与 L_1 范数方法

Sebastian Alberto Grillo[1, 3*]，Bernardo Daniel D´avalos[1, 2†]，Rodney Fabian Franco Torres[3†]，Franklin de Lima Marquezino[4†]，Edgar L´opezPezoa[2, 3†]

[1*]亚松森自治大学科学与技术学院，Jeju´ı 667，位于 O'leary 与 8 月 15 日街之间，邮编 1255，亚松森，巴拉圭。[2]亚松森国立大学精确科学与自然科学学院，UNA 校区，邮编 1039，圣洛伦索，巴拉圭。[3]亚松森国立大学理工学院，UNA 校区，邮编 2111，圣洛伦索，巴拉圭。[4] PESC-COPPE，里约热内卢联邦大学，Avenida Horacio Macedo 2030，21941-598，里约热内卢，巴西。

*通讯作者。电子邮箱：sgrillo@uaa.edu.py；贡献作者：davalos@facen.una.py；rfrancot@pol.una.py；franklin@cos.ufrj.br；epezoa@facen.una.py；

†这些作者对本研究的贡献相同。

摘要

分析单查询量子算法的计算能力十分重要，因为它们必须从一次预言机调用中提取最大信息，从而揭示量子优势的基本极限，并实现最优且资源高效的量子计算。本文提出将单查询量子决策树表述为加权图。这种表述有助于分析该算法输出的 $\boldsymbol{L_1}$ 谱范数。这一优势基于以下事实：量子决策树输出具有较高的 $\boldsymbol{L_1}$ 谱范数，是其性能超过经典对应算法的必要条件。我们提出了最大化 $\boldsymbol{L_1}$ 谱范数的启发式方法，展示了如何组合加权图以生成范数严格递增的序列，并给出了具有指数级量子优势的函数。最后，我们确立了一项必要条件，将单次查询量子优势与测量投影算子维数的渐近增长联系起来。

关键词：量子算法，图，谱范数

1 引言

图论在量子计算的多个领域中发挥着根本性作用，例如量子纠错与容错、量子密码学与通信，以及量子复杂性理论。在量子算法开发中，图论为问题的表述与求解提供了严谨的数学框架。在量子算法设计中，图论结构为组合优化、搜索和量子模拟问题的表述与分析提供了严谨的数学框架，正如下文所述。

量子游走是量子算法设计的强大框架，尤其适用于搜索问题 [1]。在这一模型中，图的顶点对应给定搜索空间中的状态，而边则编码问题的结构。基于图的连通性，量子游走算法有望突破 Grover 算法的局限 [2]。量子算法，尤其是量子近似优化算法（QAOA）和量子游走优化算法（QWOA）等混合方法，利用基于图的表述，比经典启发式算法更高效地遍历解空间 [3]。另一种重要方法是哈密顿量模拟，它依靠图论方法为量子系统提供结构化表述 [4]。许多物理模型，例如凝聚态物理和量子化学中的模型，都可以表示为图，其中顶点对应量子态或子系统，边则表示由系统哈密顿量决定的相互作用。用于模拟的量子算法，例如基于 Trotter 化或变分方法的算法，会利用图表示来提高计算效率和准确性。图结构能够将复杂哈密顿量分解为局部项，有助于在量子硬件上实现并减少误差。

量子搜索或优化算法可以根据其从输入中提取的信息量进行分析，而不考虑其他计算成本。量子决策树，即量子查询模型，是分析量子算法的有用框架，其复杂度由向预言机的查询次数来衡量 [5]。从这个意义上说，一类值得关注的量子决策树是仅对预言机执行一次查询的量子决策树，因为它们可应用于搜索和优化问题 [6–8]。开发单查询量子算法的相关技术是量子计算中的一项基础性挑战，因为所有相关信息都必须通过与预言机的一次交互来提取。这种极端限制迫使算法设计者将量子叠加、干涉和相位编码发挥到理论极限。同时，这一领域的进展也为设计最优且资源高效的量子过程提供了指导。从这一研究范式中获得的见解通常可以推广到更一般的量子算法

，并且对于计算资源有限的近期量子设备尤其重要 [9, 10]。在这方面，单查询算法能够解决经典决策树与量子决策树之间复杂度差异最大的问题 [11]。

Aaronson等人 [12] 证明了：当且仅当一个函数可以由二次多线性多项式以有界误差逼近时，它才能由单查询算法的输出以有界误差逼近。该多项式逼近涵盖了Nisan和Szegedy的传统概念，并意味着通过分析二次多线性多项式在 $\{1,-1\}^n$ 子集上的最大值和最小值，我们将识别出一个能够由有界误差单查询量子算法计算的布尔函数。在本文中，我们尤其关注识别这样一类函数：它们可以由单查询量子算法计算，但对于经典查询算法而言代价非常高。值得注意的是，当一个问题可以通过量子方式用常数次查询计算时，若其经典复杂度有所增加，就意味着指数增益。

输出具有较高的 L_1 谱范数，是量子决策树在经典查询模型 [13] 中难以模拟的必要条件。因此，如果一个问题用经典方式求解代价高昂，却能通过量子决策树高效求解，那么该问题只能由输出具有较高 L_1 谱范数的算法来求解。为此，本文提出将二次多线性多项式表示为加权动态图（WDG），其中 L_1 谱范数的计算可直接表现为权重之和。因此，我们将多项式的每个单项式表示为一条边，并将每个变量表示为WDG的一个顶点。然而，与任何加权图一样，它还具有一种对称矩阵表示；我们也将其作为一种等价的相关表述加以介绍。WDG与一个函数相关联，该函数除常数项外，等于相应的二次线性多项式。在有界误差条件下 [12]，单查询量子决策树与二次线性多项式之间的等价性，使WDG模型成为单查询量子算法的一种替代模型。然而，根据WDG模型描述的算法，并不意味着能够按照量子查询模型直接表示。

根据加权有向图（WDG）表示，我们提出了两个优化问题，它们等价于通过在有界误差下计算部分函数来最大化 L_1 谱范数。第一个问题是直接最大化加权有向图的谱范数 L_1，并将与加权有向图相关联的函数的最大值与最小值之差不超过 1 作为约束。然而，在维持这一约束的同时分析加权有向图并不容易。为此，我们提出第二个问题：在保持谱范数 L_1 为常数的同时，最小化与加权有向图相关联的函数的最大值与最小值之差。这些优化问题可以通过针对矩阵的经典优化方法求解。然而，我们通过一个下界表明，在每个顶点的各条边之间均匀分配权重，是一种倾向于最大化 L_1 谱范数的启发式方法。此外，我们表明，可以将一个或多个单次查询量子决策树组合起来，生成一系列单次查询量子决策树，其 L_1 谱范数严格递增。因此，

这类序列有望解决量子算法相较于经典算法具有指数优势的问题；我们还给出了一个通过这种方式识别出的函数示例，对于该函数，单次查询量子算法具有超多项式优势。

除了输出多项式的解析性质之外，测量过程也被视为一种独立资源加以研究。关于测量压缩和信息提取的研究结果表明，要复现给定 POVM 的统计特性，可能需要非平凡的经典资源；所需资源取决于结果数量以及相关投影算子的有效维数 [14, 15]。此外，即使底层量子演化很简单，估计或模拟测量统计也可能在计算上很困难，这凸显了仅测量过程的复杂性就可能成为瓶颈 [16]。受这些观点启发，我们分析单查询算法的计算优势与定义测量阶段的投影算子维数之间的关系。我们确定了单查询量子算法要优于经典算法所必须满足的一项条件：该算法的输出数量有限，并且存在一个输出与某个投影算子相关联，该投影算子的维数趋于无穷，同时它与定义算法状态的总维数之差也趋于无穷。这一结果为设计单查询量子算法提供了具体指引。

我们将论文的主要贡献概述如下：
1. 将单查询量子决策树表述为加权动态图。2. 将单查询量子决策树的 L_1 谱范数最大化问题表述为加权图上的问题。3. 提出一种组合加权动态图的技术；迭代应用该技术，可得到一系列加权动态图，用于计算相较于经典算法可能具有优势的函数。此外，文中还给出了一个由迭代加权动态图计算的函数示例，在该示例中，量子算法相较于经典决策树具有指数优势。4. 给出了具有有限个输出的单查询量子算法相较于随机化决策树具有渐近优势的一个必要条件。

尽管先前的工作已揭示多项式近似与量子查询复杂度之间的联系 [12, 13], ，本文提出的图表述提供了一种新颖的组合视角。然而，这种方法与平方和层级或量子通信复杂度等其他框架相比如何，目前仍不清楚。本文仅关注加权图表示及其对单次查询量子优势的解析意义。

本文的组织结构如下。在第2 节中，我们介绍文献中已有的、本文所采用的定义和定理。在第3 节中，我们给出单查询量子决策树的加权有向图（WDG）表述。在第4节中，我们构建最大化 L_1 WDG 谱范数的问题，介绍如何获得谱范数不断增加的 WDG 序列，以及一个相较于经典算法具有指数优势的已计算函数示例。在第 5 节中，我们给出单查询算法在输出数量有限的情况下具有

相较于经典算法的渐近优势。最后，在第6 节中，我们总结该提案的结论。

2 预备知识

本节将介绍量子查询复杂度、多项式逼近和证书复杂度中的符号约定与基础结果。我们遵循标准的量子查询模型（QQM） [5] ，并采用布尔函数的傅里叶分析框架 [17]。

量子查询模型（QQM） [5] 描述了计算定义域为 $\{0,1\}^n$的子集的函数的算法。QQM 算法的状态属于希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ ，其基态为 $|i\rangle|j\rangle$，其中 $i \in [n]$，对于任意的 m， $j \in [m]$ ，且我们记作 $[k] = \{0,1,..,k\}$。定义查询算子如下：

$$O_x|i\rangle|j\rangle = (-1)^{x_i}|i\rangle|j\rangle,$$

其中 $x \equiv x_0x_1\cdots x_n$ 为输入， $x_0 \equiv 1$ 为辅助比特。算法在输入 x 时的最终态记作

$$|\Psi_x^f\rangle = U_tO_xU_{t-1}\cdots O_xU_0|\Psi\rangle,$$

其中 $\{U_i\}$ 是作用于 $\mathcal{H}$ 和 $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$上的一组酉算子。查询次数或步骤数，是 O_x 出现在最终态中的次数。

定义 1 (完备正交投影算子集)。 设 $\mathcal{H}$ 是一个希尔伯特空间。 $\mathcal{H}$ 上的一组投影算子 $\{P_i\}_{i=1}^n$ 称为完备正交投影算子集，若其满足以下性质：

1. $P_i^2 = P_i$ （幂等性）
2. $P_i^\dagger = P_i$ *(self-adjointness)*
3. $P_iP_j = 0$ *for all* $i \neq j$ *(orthogonality)*
4. $\sum_{i=1}^{n} P_i = I$ *(completeness)*

投影算子 $\{P_i\}$ 构成恒等算子的分解，并将希尔伯特空间分解为彼此正交的子空间。

获得输出的概率 $z \in Z$ 为 $\pi_z(x) = \left\|P_z\left|\Psi_x^f\right\rangle\right\|^2$，给定一个 CSOP$\{P_i\}$。一个算法在误差 f： $D \to Z$ 内计算函数 ε，若 $\pi_{f(x)}(x) \geq 1-\varepsilon$对所有输入 $x \in D \subset \{0,1\}^n$ 均成立。定理 2 给出了 QQM 算法最终态的另一种表示方式 [18]。

定理 2. 给定一个 *QQM* 算法，我们还引入以下记号：

- 酉算子的乘积 $U_n = U_nU_{n-1}\ldots\widetilde{U}_0$。
- 一个 *CSOP* $\{\bar{P}_k: \ 0 \leq k \leq n\}$，其中每个 $\bar{P}_i|i\rangle|\psi\rangle = |i\rangle|\psi\rangle$ 和 $\bar{P}_i|j\rangle|\psi\rangle = 0$ 的取值范围为 $i \neq j$，且任意状态 $|\psi\rangle$.
- 给定一个固定的 j，*CSOP* $\left\{\widetilde{P}_{j,\,k}: \ 0 \leq k \leq n\right\}$，其中 $\widetilde{P}_{j,\,i} = \widetilde{U}_j^\dagger\bar{P}_i\widetilde{U}_j$。

如果 *QQM* 算法对 $x = x_0x_1...x_n$ 执行 t 查询，则：

$$\widetilde{U}_{t-1}^{\dagger} O_x U_{t-1} \ldots U_1 O_x U_0 \left|\Psi\right\rangle = \sum_{k_{t-1}=0}^{n} \ldots \sum_{k_0=0}^{n} (-1)^{\sum_{i=0}^{t-1} x_{k_i}} \widetilde{P}_{t-1,k_{t-1}} \widetilde{P}_{t-1,k_{t-1}} \ldots \widetilde{P}_{1,k_1} \widetilde{P}_{0,k_0} \left|\Psi\right\rangle . \tag{1}$$

对于每个 $b \in \{0,1\}^n$，我们定义 $\chi_b \colon \{-1,1\}^n \to \{-1,1\}$ 使得 $\chi_b(x) = \prod b_i x_i, i$ 这一族函数构成形如 $f \colon \{1,-1\}^n \to \mathbb{R}$ 的函数空间的正交归一基，参见 [17]。因此，任意函数 $f \colon \{0,1\}^n \to \mathbb{R}$ 都可以表示为线性组合

$$f = \sum_{b \in \{0,1\}^n} \alpha_b \chi_b,$$

并将 f 的傅里叶1-范数记为

$$L(f) = \sum_{b \in \{0,1\}^n} |\alpha_b|.$$

正如算法的输出概率逼近给定函数那样，定义3 将这一概念推广到多项式。

定义3. 我们称多项式 p 以误差界 ε逼近函数 f ，如果 $|p(x) - f(x)| < \varepsilon$ 对 f的定义域中的所有 x 成立。

定理4. 存在一个 $\varepsilon < 1/2$ 和一个 $\varepsilon' < 1/2$，使得部分布尔函数f 能被误差界为 $\varepsilon < 1/2$的二次多项式逼近，当且仅当 f 可由误差界为$\varepsilon' < 1/2$的一次查询量子算法计算。 *[12]*

定理 4 表明，通过分析二次多项式，我们可以发现可由一次查询量子算法判定的新问题。

证书是变量上可用字符串中长度最短的比特串，用以验证某个算法。其形式化定义如下[19]:

定义5 （证书复杂度）。 设 $f \colon \{-1,1\}^n \to \{0,1\}$ 为一个部分函数，且 $x \in \{-1,1\}^n$。我们定义一个 *0*-证书，记作 $C_0^S(f)$，对于 x，它是子集$S \subseteq \{-1,1\}^n$，使得 $f(x') = 0$对每个 $x' \in S$ 成立，其中 $x' = x_{|S}$。类似地，*1*-证书记作 $C_1^S(f)$，是子集 $S \subseteq \{-1,1\}^n$，使得 $f(x') = 1$对每个$x' \in S$成立。 f 的证书复杂度 定义为

$$C(f) := \min_{k \in [1]} \max_{S \subseteq \{-1,1\}^n} C_k^S(f) \tag{2}$$

在随机化决策树中，要查询的输入位置是以概率方式选择的 [20]。

如果随机化决策树以概率 1 输出 $f(x)$，并以至少 $1 - \varepsilon$ 的概率拒绝，则称其以有界误差计算 f；若对所有 $y \in \{-1,1\}^n$ [21]， $f(x) \neq f(y)$。我们用 $R_\varepsilon(f)$ 表示

误差至多小于 ϵ [21] 的随机化复杂度，即经典算法通过随机化决策树计算 f 时所需的最少查询次数，误差不超过 ε 。 [13]。

Aaronson 的结果 [19]为证明下列等式的正确性提供了有力依据

$$R_{\varepsilon}(f)=\Omega\left(\sqrt{C(f)}\right). \tag{3}$$

定理 6. 考虑 $D \subset \{0,1\}^n$ 和函数 $f\colon D \to \{0,1\}$，它可由多项式 $p\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 进行ε-近似。如果 $\deg(p) \leq 2t$，那么

$$\frac{R_{\varepsilon}(f)}{2t} \in O\left(L(p)^2\right), \tag{4}$$

当 $n \to \infty$ 时。

最后，定理 4 和 6 表明，通过分析可由二次多项式近似的部分布尔函数，只要这些多项式的L范数在渐近意义下随 n 增长，我们就能找到这样的问题：1 次查询量子算法相较于经典算法具有指数优势。

3 次数至多为二的多项式作为加权图

本节中，我们将量子算法表述为加权图，并介绍其矩阵表示。从这里开始，我们保留辅助比特 $x_0 = 1$。以下定理展示了如何将二次多项式作为图进行分析。

定理 7。 如果 $p\colon \{1,-1\}^{n+1} \to [0,1]$ 是次数至多为二的多线性多项式，那么 p具有唯一表示

$$p=\sum_{b\in\{0,1\}^n}\alpha_b\chi_b, \tag{5}$$

使得 $|b| \leq 2$ 与 $\alpha_b \in \mathbb{R}$。

证明。 这由 χ_b的定义可得，详情请参见 [17]。 □

例如，取 $p\colon \{1,-1\}^6 \to [0,1]$ 记作

$$p(x)=\frac{1}{8}\left(x_0x_2+x_0x_5-x_1x_2-x_4x_3\right)+\frac{1}{2}. \tag{6}$$

我们可以看到，每个单项式都是形如 $\chi_b(x) = \prod b_i x_i$ 的函数，其中i $b \in \{0,1\}^{n+1}$。然后，我们可以对每个多项式进行化简，使得两个单项式不会被赋予相同的函数 $\chi_b(x)$，从而为每个形如公式5所给出的多项式提供唯一表示。

以下定义是二次多项式由加权图给出的另一种表示，如定理9 所示。

定义8. 设 $G=(V,E)$ 是一个没有多重边的图，其中 V和 E分别是顶点集和边集。记 $w\colon E\to\mathbb{R}$和 $x\in\{-1,1\}^{n+1}$（将辅助比特 x_0 视为等于*1*），我们称 $D=(G,w)$ 为加权动态图（加权有向图），并定义

$$g_D(x)=\sum_{e\in E}s(e,x)\,w(e) \tag{7}$$

作为 D 与 x 的值，其中若 $e=\{v_i,v_j\}$，则 $s(e,x)=x_ix_j$；若 $e=\{v_i\}$，则 $s(e,x)=x_ix_0$。

这种图表示法使我们能够将多项式的代数结构可视化，并有助于计算其 L_1 范数，即边权绝对值之和；这对我们的量子优势分析至关重要。

我们强调，该图有 $n+1$ 个顶点，其中辅助比特对应的顶点保持为常数。

定理9。 存在唯一的次数至多为二的多线性多项式 $p\colon\ \{1,-1\}^{n+1}\to[0,1]$，当且仅当存在一个加权有向图 D，使得 $p(x)=g_D(x)+K$，其中某个常数为 K。

证明。 注意到

1. 对于 $|b|=2$ 和 $e=\{i,j\}$，若 $b_i=b_j=1$，则 $s(e,x)=\chi_b(x)$和 $\alpha_b=w(e)$；2. 对于 $|b|=1$ 和 $e=\{i\}$，若 $b_i=b_j=1$，则 $s(e,x)=\chi_b(x)$和 $\alpha_b=w(e)$；以及3. 对于 $|b|=0$，有 $K=\chi_b(x)$。

为证明唯一性，假设存在两个多项式 p_1,p_2 :$\{-1,1\}^{n+1}\to[0,1]$以及常数 K_1, K_2，使得 $p_1(x)=g_D(x)+K_1$和$p_2(x)=g_D(x)+K_2$在 $x'\in\{-1,1\}^{n+1}$处相等，即 $p_1(x')=p_2(x')$，那么$g_D(x')+K_1=g_D(x')+K_2$推出 $K_1=K_2$。 □

定理9 所确立的等价关系，使得我们能够将多项式的解析性质（例如 L_1 范数）转化为加权图的组合性质。这种联系对于第4节中表述的优化问题至关重要。

.

例如，对于方程6 中的多项式，我们取 $G=(V,E)$，使得

$$V=\{v_0,v_1,v_2,v_3,v_4,v_5\},$$

$$E=\{\{v_0,v_2\},\{v_0,v_5\},\{v_1,v_2\},\{v_3,v_4\}\}$$

且 $w:E\to\mathbb{R}$ 在表1中记为。接着取方程7，可得

$$g(x)=\frac{1}{8}\left(x_0x_2+x_0x_5-x_1x_2-x_4x_3\right).$$

定理9给出了2阶多项式的一种加权图表示。沿用原来的示例，方程6中的多项式具有加权图表示，如图1所示。

Edge	值为 w
$\{v_0, v_2\}$	$\frac{1}{8}$
$\{v_0, v_5\}$	$\frac{1}{8}$
$\{v_1, v_2\}$	$-\frac{1}{8}$
$\{v_3, v_4\}$	$-\frac{1}{8}$

表 1 方程6中的加权有向图的每条边的权重。

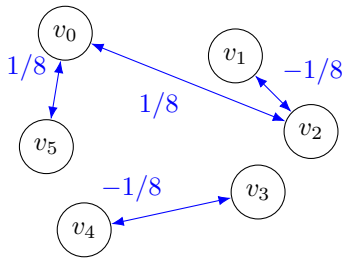


图 1 方程6的加权图。

WGD D 的一个重要性质是 g_D的最大值与最小值之差，我们将在下文对此进行形式化定义。

定义 10。设 $D = (G, w)$ 为一个 *WDG*。我们将 D 的最大差值记作 $\delta(D)$，其值定义为

$$\delta(D) := \max_{x \in \{-1,1\}^{n+1}} g_D(x) - \min_{x \in \{-1,1\}^{n+1}} g_D(x). \tag{8}$$

以图 1 为例，可以看出 g_D 的最大值为 1 2，对应 $(1, -1, 1, 1, -1, 1)$，最小值为 $-\frac{1}{2}$，对应 $(1, -1, -1, 1, 1, -1)$，因此$\delta(D) = 1$。

最后，我们注意到，WGD D 具有矩阵表示，可以让我们以直接明了的方式计算其对应的函数 g_D。

定义 11。令 $D = (G, w)$ 为一个具有 n 个顶点的加权有向图。我们将与 D相关联的矩阵定义为一个 $(n+1) \times (n+1)$ 实矩阵 $M^D = \left(M^D_{ij}\right)$，其中 $0 \le i, j \le n$，满足：

- 如果 $ij = 0$ 且 $k =$最大值为 $\{i, j\} > 0$，那么 $M^D_{ij} = w(\{v_k\})$。
- 如果 $i = j$，那么 $M^D_{ij} = 0$。
- 如果 i、$j > 0$ 且 $i \neq j$，那么 $M^D_{ij} = M^D_{ji} = w(\{v_i, v_j\})$。

根据定义 11 我们可以观察到，对于 $x \in \{1, -1\}^{n+1}$ 有 $g_D(x) = \frac{1}{2} x M^D x^t$。例如，图 1 中的 WGD 意味着与$D$ 相关联的矩阵为：

$$M^D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1/8 & 0 & 0 & 1/8 \\ 0 & 0 & -1/8 & 0 & 0 & 0 \\ 1/8 & -1/8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/8 & 0 & 0 \\ 1/8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

特别地，如果 $\mathbf{1} = (x_0,\ x_1,\ \ldots\ldots,\ x_n)$ 满足 $x_i = 1$ 对每个 $i = 0,\ \mathbf{1},\ \ldots\ldots,\ n$ 均成立，则 D 的总权重由 $w(M^D) = g_D(\mathbf{1})$ 确定。

4 L_1 谱范数最大化问题。

根据定理 4 和 6，我们可以发现一些量子算法可能优于经典算法的新问题。具体而言，可以寻找二次线性多项式或取值介于 0 和 1 之间的 WGD，并使其具有较大的 L_1 范数。通过定义需要计算的部分函数，可以对搜索范围加以限制。因此，这一搜索问题可表述为：在最大化 L_1 范数的条件下，确定哪些包含第一个部分函数的部分函数可以计算。我们在下文定义这一优化问题。

定义 12。设 f 是一个函数，使得 $f\colon\ S \to [0,1]$ 且 $S \subset \{1,-1\}^n$。考虑一个 *WDG* $D = (G, w)$，其中 $G = (V, E)$，并给定某个 $\varepsilon > 0$:

- 求使下式最大化的 C 和 w

$$\sum_{e\in E} |w(e)|. \tag{9}$$

- 满足以下条件:

i) 对每个 $x \in S$，约束 $|g_D(x) - f(x) + C| < \varepsilon$；以及

ii) 约束 $\delta(D) = 1$.

定义12 中的优化问题可以表述为一个等价的最小化问题：我们用另一种约束替换约束 ii)，从而简化问题。如下所示。

定义 13. 设 f 是一个函数，使得 $f\colon\ S \to [0,1]$ 且 $S \subset \{1,-1\}^n$。考虑一个加权有向图 $D = (G, w)$，其中 $G = (V, E)$，并给定某个 $\varepsilon > 0$:

- 求使 $\delta(D)$ 最小的 C 和 w 。
- 满足以下条件:

i) 约束 $|g_D(x)/\delta(D) - f(x) + C| < \varepsilon$ 对每个 $x \in S$ 均成立;

ii) 约束

$$\sum_{e\in E} |w(e)| = 1. \tag{10}$$

这些优化问题在形式上等价，但从算法角度来看，可以采用不同的方法求解：前者是带有界差值约束的最大化问题，后者是具有固定范数的最小化问题。在实践中，最小化形式可能数值稳定性更好。定义12 和13 中的优化问题等价性

这一等价性源于以下观察。若我们通过求得 w 来求解 $\delta(D)$ 的最小化问题，那么只需将 $w' = w/(\min \delta(D))$ 定义为新 WGD 的权重函数，即可求解最大化问题。我们也可以通过将权重 w 乘以一个因子，把最大化问题的解转化为最小化问题的解。不过，我们只关心如何将最小化问题转化为最大化问题。根据哪种情形更易于分析，我们将基于上述等价关系给出最大化问题或最小化问题的结果。

可以注意到，任何满足定义12 或13 对于 $\varepsilon = 0$之约束的解，都意味着存在一个单查询算法，用以计算函数 f，且在有界误差 ε' 下，依据定理4。

最小化 $\delta(D)$的问题也可以从权重函数 w 为保持有界所必须满足的必要性质来研究。因此，这些性质可作为设计相对经典算法具有潜在优势的单查询量子算法的指导。

在下一个定理之前，我们引入如下记号。给定图 $G=(V,E)$，我们将 $E(v)$记为 $v \in V$ 的底层边集。**定理14** （下界）。 设 $G=(V,E)$ 为一个图，且 $D=(G,w)$，如果

$$\max_{v \in V} \left\{ \sum_{e \in E(v)} |w_e| \right\} = \epsilon \tag{11}$$

则 $\delta(D) \geq 2\epsilon$。
证明。 设 $v_0 \in V$ 使得$\sum_{e \in E(v_0)} |w_e| = \epsilon$ 是满足方程11的值，且 x^+、 $x^- \in \{-1,1\}^n$ 使得对于$e \in E(v_0)$有 $|w_e| = w_e s(e,x^+)$与 $-|w_e| = w_e s(e,x^-)$。由于 $E(v) \subset E$，则 $\sum_{e \in E(v)} |w_e| \leq \sum_{e \in E} |w_e|$。 于是，

$$\begin{aligned}
\delta(D) &= \max_{x \in \{-1,1\}^n} \sum_{e \in E} w_e s(e,x) - \min_{x \in \{-1,1\}^n} \sum_{e \in E} w_e s(e,x) \\
&\geq \sum_{e \in E} w_e s(e,x^+) - w_e s(e,x^-) \\
&= 2 \sum_{e \in E(v_0)} |w_e| + \underbrace{\sum_{e \in E \setminus E(v_0)} w_e s(e,x^+) - w_e s(e,x^-)}_{\geq 0} \\
&\geq 2 \sum_{e \in E(v_0)} |w_e| \\
&= 2\epsilon
\end{aligned}$$

□

定理 14 表明，如果分配给边的权重趋于常数，那么 $\delta(D)$ 将趋于更小。请注意，该定理针对的是最小化问题。对于最大化问题，它等价地表明，如果

分配给边的权重趋于常数，那么 L_1 范数将趋于更大。

接下来，我们将展示如何组合两个加权有向图，从而得到一个具有更高 L_1 范数的加权有向图。不过，首先我们通过引理 L_1 的性质来介绍15。对于两个阶数相同的矩阵 A 和 B，哈达玛积 $A \odot B$ 定义为 $(A \odot B)_{ij} = (A_{ij} \cdot B_{ij})$。对于矩阵 A 和 $a \in \mathbb{R}$，我们将哈达玛幂记为，其中 $E = A^{\circ a}$ 意味着 $E_{ij} := A_{ij}^a$。

引理 15 （L_1 范数性质）。设 $D = (G, w)$ 为一个加权有向图，M^D 其关联矩阵为 K，且 K 为常数。则

(i) $L(g_D) = w((M^D \odot M^D)^{\circ 1/2})$ (ii) $L(g_D + K) = L(g_D) + |K|$ (iii) $L(g_{D' \otimes D''}) = 2L(g_{D'})L(g_{D''})$ 若 $M^D = M' \otimes M''$ (iv) $L(g_D \cdot g_{D'}) = L(G_D)L(g_{D'})$ (v) $L(K \cdot g_D) = |K| \cdot L(g_D)$

其中 K 是一个常数。

证明。 (i) 设 $M_{abs} = (M^D \odot M^D)^{\circ 1/2}$ 且 $M^D = (w(v_{ij}))$ 如同定义11则 $M_{abs\ ij} = w\ v_{ij} \cdot w\ v_{ij}\ ^{1/2} = |w\ v_{ij}|$ $w\ M_{abs} = \sum_{i<j} |w\ v_{ij}| =) (( ) ( )) ( )$。因此，$( ) ( ) ( )$ 是的范数 $g_{D'}\ \mathbf{1}_{L_1}$。

(ii) 由于(i)，我们可以将 $g_{D'}(x) = g_D(x) + K$ 改写，则

$$L(g_D + K) = \sum_{i<j} |w(v_{ij})| + |K| = L(g_D) + |K|$$

(iii) 根据构造与定义，

$$\begin{aligned}
L(g_{D'} \otimes g_{D''}) &= w\left((M^{D'} \otimes M^{D''}) \odot (M^{D'} \otimes M^{D''})\right)^{\circ(1/2)}\Big) \\
&= w\left((M^{D'} \odot M^{D'}) \otimes (M^{D''} \odot M^{D''})\right)^{\circ(1/2)}\Big) \\
&= w\left((M^{D'} \odot M^{D'})^{\circ(1/2)} \otimes (M^{D''} \odot M^{D''})^{\circ(1/2)}\right) \\
&= \frac{1}{2}(\mathbf{1}' \otimes \mathbf{1}'')\left((M^{D'} \odot M^{D'})^{\circ(1/2)} \otimes (M^{D''} \odot M^{D''})^{\circ(1/2)}\right)(\mathbf{1}' \otimes \mathbf{1}'')^t \\
&= 2\left(\frac{1}{2}\mathbf{1}'(M^{D'} \odot M^{D'})^{\circ(1/2)}\mathbf{1}'^t\right)\left(\frac{1}{2}\mathbf{1}''(M^{D''} \odot M^{D''})^{\circ(1/2)}\mathbf{1}''^t\right) \\
&= 2w\left((M^{D'} \odot M^{D'})^{\circ(1/2)}\right) w\left((M^{D''} \odot M^{D''})^{\circ(1/2)}\right) \\
&= 2L(g_{D'})L(g_{D''})
\end{aligned}$$

其中，哈达玛积和张量积的性质可在 [22] 中使用。

(iv) 对于 $G=(V,E)$ 和 $G'=(V',E')$，假设 E 与 E' 互不相交。如果 M^D 和 $M^{D'}$ 分别是 D 和 D' 的矩阵表示，那么

$$\begin{aligned} L(g_D \cdot g_{D'}) &= \sum_{e\in E \wedge e' \in E'} |w(e)\cdot w(e')| \\ &= \sum_{e\in E}\sum_{e\in E'} |w(e)|\cdot|w(e')| \\ &= \left(\sum_{e\in E}|w(e)|\right)\left(\sum_{e\in E'}|w(e')|\right) \\ &= L(g_D)\cdot L(g_{D'}) \end{aligned}$$

(v) (iv) 的特殊情况：如果 $g_D(x)=K$ 是常函数，那么我们可以得到 $M^D=(2|K|/n(n-1))(\mathbf{1}\cdot\mathbf{1}^t-\mathbb{I}_n)$ 是其 $n\times n$ 矩阵表示。因此 $L(g_D)=n(n-1)w(M^D)=\frac{2|K|}{n(n-1)}\binom{n}{2}=|K|$。 □

引理 15 提供了用于在图运算下处理 L_1 范数的代数工具。特别是，性质 (iii) 表明，WDG 矩阵的克罗内克积会使 L_1 范数按乘法增长；定理 16 利用这一点构造出范数呈指数增长的序列。接下来，我们考虑二元函数，其中一类输入对应于 WDG 取最大值的情形，另一类输入对应于 WDG 取最小值的情形。设有两个 WDG 及其对应的二元函数。我们可以构造第三个 WDG，其函数的定义域为 D，由前述二元函数定义域的克罗内克积组成。对于这个新函数，第一类由那些使前述函数取第一类情形的输入的克罗内克积组成，第二类则由其余的 D 组成。这个新的布尔函数可以看作定义在张量克罗内克积上的与运算。定理 16 展示了如何构造这个 WDG，以及它必须满足哪些条件，才能使 L_1 范数相对于先前的 WDG 增长。考虑以下各项：

- 设 D 与 D' 为 WGDs，使得对 $K,K'\in\mathbb{R}$、$S\subset\{1,-1\}^n$ 与 $T\subset\{1,-1\}^m$，有 $f(x)=\binom{1}{2}xM^Dx^t+K$ 与 $f'(x)=\binom{1}{2}xM^{D'}x^t+K'$，其中分别为 f：$S\to[0,1]$ 与 f'：$T\to[0,1]$。

- 记 $S^+=\{x\in S:\ f(x)=1\}$，$S^-=\{x\in S:\ f(x)=0\}$，$T^+=\{x\in T:\ f'(x)=1\}$ 与 $T^-=\{x\in T:\ f'(x)=0\}$。

定理 16. *存在一个 WGD D''，使得*

(i) $L(g_{D''})=(L(g_D)+|K|)(L(g_{D'})+|K'|)-|KK'|$；*以及 (ii)* $g_{D''}(x)=f''(x)+K''$ *对于* $x\in((S^+\otimes T^+)\cup(S^-\otimes T^-)\cup(S^+\otimes T^-)\cup(S^-\otimes T^+))$ *和某个* $K''\in\mathbb{R}$，*其中函数* f'' *满足：a)* $f''(\omega)=1$ *对于* $\omega\in(S^+\otimes T^+)$，*以及 b)* $f''(\omega)=0$ *对于* $\omega\in((S^+\otimes T^-)\cup(S^-\otimes T^+)\cup(S^-\otimes T^-))$。

证明。记 $M^{D''} = \frac{1}{2}\left(\left(M^D + 2K \cdot \frac{I_n}{n}\right) \otimes \left(M^{D'} + 2K' \cdot \frac{I_m}{m}\right)\right) - \left(2KK' \cdot I_n \otimes \frac{I_m}{mn}\right)$ 为与某个 WGD D''相关联的矩阵，其中 $\alpha =$。注意，取 $x'' = x \otimes x' \in \{1, -1\}^{nm}$,

$$\begin{aligned} g_{D''}(x'') &= \tfrac{1}{2}(x \otimes x')M^{D''}(x \otimes x')^t \\ &= \left(\tfrac{1}{2}xM^Dx^t + \tfrac{K}{n}xI_nx^t\right)\left(\tfrac{1}{2}x'M^{D'}x'^t + \tfrac{K'}{m}x'I_mx'^t\right) - \tfrac{KK'}{mn}(xI_nx^t)(x'I_mx'^t) \\ &= (g_D + \tfrac{K}{n}\|x_D\|^2)(g_{D'} + \tfrac{K'}{m}\|x_{D'}\|^2) - \tfrac{KK'}{mn}(\|x_D\|^2)(\|x_{D'}\|^2) \\ &= (g_D + \tfrac{K}{n}n)(g_D + \tfrac{K'}{m}m) - \tfrac{KK'}{mn}nm \\ &= f(x)f'(x) - KK' \end{aligned}$$

那么，

$$f''(x \otimes x') = f(x)f'(x') \tag{12}$$

(i) 根据引理 15 以及上述方程，我们有

$$\begin{aligned} L(g_{D''}) + |KK'| &= L(g_{D''} + KK') \\ &= L(f \cdot f') \\ &= L(f)L(f') \\ &= L(g_D + K)L(g_{D'} + K') \\ &= (L(g_D) + |K|)(L(g_{D'}) + |K'|) \end{aligned}$$

这证明了该结论。

(ii) 由于方程 12,

a) 如果 $x'' \in (S^+ \otimes T^+)$，那么 $f(x) = 1$与 $f'(x') = 1$，因此 $f''(x \otimes x') = 1$意味着$g_{D''}(x'') = 1 - K''$。 b) 如果 $x'' \in ((S^+ \otimes T^-) \cup (S^- \otimes T^+) \cup (S^- \otimes T^-))$，我们有 $f(x) = 0$ 或 $f'(x') = 0$，那么 $f''(x \otimes x') = 0$.

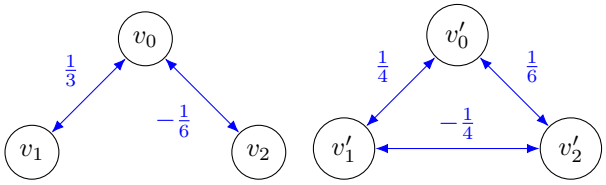
因此，取 $K'' = -KK'$，即可证明该命题。 □

注记17。一个 *WGD* $D = (G, w)$ 可以具有任意宽度，不过我们希望 $g_D \in [-K, 1 - K]$，使得 $f\colon S \to [0, 1]$。为了保证这一点始终成立，我们重新定义 $D_\delta = (G, w_\delta)$，使其矩阵被指定为 $M^{D_\delta} = \delta^{-1}{}_{(D)}M^D$。

让我们来看一个例子，以说明定理16。令 D 和 D' 为图 2中所示的两个 WGD。

它们的矩阵表示是

$$M^D = \begin{bmatrix} 0 & 1/3 & -1/6 \\ 1/3 & 0 & 0 \\ -1/6 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad , \quad M^{D'} = \begin{bmatrix} 0 & 1/4 & 1/6 \\ 1/4 & 0 & -1/4 \\ 1/6 & -1/4 & 0 \end{bmatrix}$$



(a) $D = (G,\ w)$ (b) $D' = (G',\ w')$

图 2 两个加权图。

并且它们的 L_1 范数分别为 $L(g_D) = \frac{1}{2}$ 和 $L(g_{D'}) = \frac{2}{3}$。于是 $f(x) = \frac{1}{3}x_1x_0 - \frac{1}{6}x_2x_0 + \frac{1}{2}$ 和 $f'(x) = \frac{1}{4}x_1x_0 + \frac{1}{6}x_2x_0 - \frac{1}{4}x_1x_2 + \frac{2}{3}$。

此外，$(1,\ 1,\ -1) \in S^+$ 以及 $(1,\ 1,\ 1) \in T^+$。

根据定理 16 的证明构造，定义 D'' 为

$$
\begin{aligned}
M^{D''} &= \frac{1}{2}\left(\begin{bmatrix} 0 & 1/3 & -1/6 \\ 1/3 & 0 & 0 \\ -1/6 & 0 & 0 \end{bmatrix} + 2\cdot\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}/3\right) \otimes \left(\begin{bmatrix} 0 & 1/4 & 1/6 \\ 1/4 & 0 & -1/4 \\ 1/6 & -1/4 & 0 \end{bmatrix} + 2\cdot\frac{2}{3}\begin{bmatrix} 1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}/3\right) \\
&\quad - 2\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{2}{3}\left(\begin{bmatrix} 1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\right)/9 \\
&= \left(\begin{bmatrix} 1/6 & 1/3 & -1/6 \\ 1/3 & 1/6 & 0 \\ -1/6 & 0 & 1/6 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 4/9 & 1/4 & 1/6 \\ 1/4 & 4/9 & -1/4 \\ 1/6 & -1/4 & 4/9 \end{bmatrix}\right) - \frac{2}{27}\mathbb{I}_9 \\
&= \begin{bmatrix}
0 & \frac{1}{24} & \frac{1}{36} & \frac{1}{27} & \frac{1}{24} & \frac{1}{36} & -\frac{1}{27} & -\frac{1}{24} & -\frac{1}{72} \\
\frac{1}{24} & 0 & -\frac{1}{24} & \frac{1}{24} & \frac{1}{27} & -\frac{1}{24} & -\frac{1}{48} & -\frac{1}{27} & \frac{1}{48} \\
\frac{1}{36} & -\frac{1}{24} & 0 & \frac{1}{36} & -\frac{1}{24} & \frac{2}{27} & -\frac{1}{72} & \frac{1}{48} & -\frac{1}{27} \\
\frac{2}{27} & \frac{1}{24} & \frac{1}{36} & 0 & \frac{1}{24} & \frac{1}{36} & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{24} & \frac{2}{27} & -\frac{1}{24} & \frac{1}{24} & 0 & -\frac{1}{24} & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{36} & -\frac{1}{24} & \frac{2}{27} & \frac{1}{36} & -\frac{1}{24} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-\frac{1}{27} & -\frac{1}{48} & -\frac{1}{72} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{24} & \frac{1}{36} \\
-\frac{1}{48} & -\frac{1}{27} & \frac{1}{48} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{24} & 0 & -\frac{1}{24} \\
-\frac{1}{72} & \frac{1}{48} & -\frac{1}{27} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{36} & -\frac{1}{24} & 0
\end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

其 L_1 范数为 $L(g_{D''}) = 1$。

定理16 中的条件 (i) 已得到验证：

$$(L(g_D) + \frac{1}{2})(L(g_{D'}) + \frac{2}{3}) - \frac{1}{2}\cdot\frac{2}{3} = 1\cdot\frac{4}{3} - \frac{1}{3} = 1 = L(g_{D''})$$

对于条件 (ii)，我们有 $x = (1,\ 1,\ -1)\otimes(1,\ 1,\ -1) = (1,\ 1,\ -1,\ 1,\ 1,\ -1 - 1,\ -1,\ 1)$，则 $f''(x) = f'(1,\ 1,\ -1)f(1,\ 1,\ -1) - \frac{1}{3} = 1 - \frac{1}{3} = -\frac{2}{3}$，且 $g_{D''}(x) = \frac{2}{3}$。因此，$x \in (S^+ \otimes T^+)$。

与定理 16 基于克罗内克积定义与运算类似，定理 18 基于克罗内克积定义或运算。首先，我们定义以下术语：

- $K_R = (1-K)I_n/n$,
- $M_R^D = K_R - \frac{1}{2}M^D$。

定理 18. 存在一个 *WGD* D'' 使得

i) $L(g_{D''}) = |1-K'|L(g_D) + |1-K|L(g_{D'}) + L(g_D)\cdot L(g_{D'})$ 与 *ii)* $g_{D''}(x) = f''(x) + K''$ 对于 $x \in ((S^+\otimes T^+)\cup(S^-\otimes T^-)\cup(S^+\otimes T^-)\cup(S^-\otimes T^+))$ 以及某个 $K''\in\mathbb{R}$。其中 $f'': \{1,-1\}^{nm}\to[0,1]$ 满足

(a) $f''(\omega) = 1$ *if* $\omega \in ((S^+\otimes T^-)\cup(S^-\otimes T^+)\cup(S^+\otimes T^+))$, *and*
(b) $f''(\omega) = 0$ *if* $\omega\in(S^-\otimes T^-)$

证明。 将 $M = 2(K_R\otimes K_R' - M_R^D\otimes M_R^{D'})$ 记为与某个 WGDD''相关联的矩阵，并注意到 $\frac{1}{2}x''Mx''^t = f(x) + f'(x') - f(x)f'(x') - (K+K'-KK')$，因此:

- 如果 $x\in((S^+\otimes T^-)\cup(S^-\otimes T^+)\cup(S^+\otimes T^+))$，那么 $g''(x) = 1-(K+K'-KK')$。
- 如果 $x\in(S^-\otimes T^-)$，那么 $g''(x) = -(K+K'-KK')$。

因此，通过取 $K'' = (K+K'-KK')$，我们证明了这个命题。

为证明该范数，我们首先注意到

$$\begin{aligned} g_{D''} &= (g_D+K)+(g_{D'}+K')-(g_D+K)(g_{D'}+K') \\ &= (1-K')g_D + (1-K)g_{D'} - g_Dg_{D'}, \end{aligned}$$

应用该范数，我们得到

$$\begin{aligned} L(g_{D''}) &= L((1-K')g_D + (1-K)g_{D'} - g_Dg_{D'}) \\ &= L((1-K')g_D) + L((1-K)g_{D'}) + L(-g_Dg_{D'})) \\ &= |1-K'|L(g_D) + |1-K|L(g_{D'}) + L(g_D)\cdot L(g_{D'}) \end{aligned}$$

□

同时考虑图 D 和 D'（如图2所示），并根据定理18证明中的构造，可得到以下矩阵表示

$$M^{D''} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{24} & \frac{1}{36} & \frac{1}{27} & -\frac{1}{24} & \frac{1}{36} & -\frac{1}{54} & \frac{1}{48} & \frac{1}{72} \\ \frac{1}{24} & 0 & -\frac{1}{24} & \frac{1}{24} & \frac{1}{27} & -\frac{1}{24} & -\frac{1}{48} & -\frac{1}{54} & \frac{1}{48} \\ \frac{1}{36} & -\frac{1}{24} & 0 & \frac{1}{36} & -\frac{1}{24} & \frac{2}{27} & -\frac{1}{72} & \frac{1}{48} & -\frac{1}{54} \\ \frac{2}{27} & \frac{1}{24} & \frac{1}{36} & 0 & \frac{1}{24} & \frac{1}{36} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{24} & \frac{1}{54} & -\frac{1}{24} & \frac{1}{24} & 0 & -\frac{1}{24} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{36} & -\frac{1}{24} & \frac{2}{27} & \frac{1}{36} & -\frac{1}{24} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{54} & -\frac{1}{48} & -\frac{1}{72} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{24} & \frac{1}{36} \\ \frac{1}{48} & -\frac{1}{54} & \frac{1}{48} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{24} & 0 & -\frac{1}{24} \\ \frac{1}{72} & \frac{1}{48} & -\frac{1}{54} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{36} & -\frac{1}{24} & 0 \end{bmatrix}$$

Then

$$L(g_{D''}) = \frac{5}{6} = \frac{1}{2}\cdot\frac{2}{3} + \frac{1}{3}\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cdot\frac{2}{3} = |1-\frac{1}{2}|L(g'_D) + |1-\frac{2}{3}|L(g_D) + L(g_D)L(g_{D'}),$$

且条件 i) 成立。

此外，如果 $x = x' = \ 1\ 1\ -1$ $f\ x\ = g_D\ x\ + \frac{1}{2} = 1$ $f'\ x'\ = g_{D'}\ x'\ + (,,)$, $\frac{2}{3} = 1$ $x \in S^+$ $x' \in T^+$ $x'' = x \otimes x' = \ 1\ 1\ -1\ 1\ 1\ -1\ -1\ -1\ 1$ 那么 ( ) ( ) 和 ( ) ( )，所以 和 。取 (,,,,,,,,) 和 $g_{D''}(x'') = \frac{1}{6}$，其中

$$f''(x'') = f(x) + f'(x) - f(x)f'(x') = 1.$$

由于 $K'' = -(K + K' - KK') = -\left(\frac{1}{2} + \frac{2}{3} - \frac{1}{2}\cdot\frac{2}{3}\right) = -\frac{5}{6}$，根据定理 18 我们有

$$g_{D''}(x'') = f''(x'') + K'' = 1 + (-\tfrac{5}{6}) = \tfrac{1}{6}$$

并满足条件 ii)。

推论19。 设 D 是一个规模为 $n \times n$ 的加权有向图。如果 $L(g_D) > 1$，那么存在一个由规模为 $n^i \times n^i$ 的加权有向图组成的序列 D_i，使得 $L(g_{D_i}) = \Omega\left(L(g_D)^i\right)$。

证明。 取 $D_1 = D$ 并利用归纳法得到 $D_{i+1} = D''$ 通过应用定理 16（或定理 18）并令 $D' = D$。 □

推论 19 表明，迭代应用定理 16 或 18 可以得到一系列规模呈指数增长的 WGD，其谱范数 L_1 也呈指数增长。由定理 6 可知，如果 $L(g_{D_i})$ 相对于 n是递增函数，那么这系列量子算法可能比经典算法具有指数优势，因为 $t = 1$。一种开发量子算法的可行策略是，首先使用通用优化方法 [23], 求解定义 12或13中的优化问题，以便通过应用定理 16 或 18所得到的一系列 WGD 来推广该算法。

下面给出一个函数序列的示例，该序列由一系列 WDG 构成，而这些 WDG 是通过在克罗内克积上迭代应用与运算构造的。我们还将在推论 22 中证明，这些函数的证书复杂度（见定义 5）随着输入规模的增大而趋于无穷，因此其经典随机化复杂度也趋于无穷。因此，这些迭代过程会产生这样的函数：由于 WDG 表示单查询量子算法，量子算法相较于经典算法具有指数优势。

下文给出一个特定加权有向图类的定义，即 $\mathcal{G}_F^n$。该类由所有加权动力图 g_D 刻画： $\{-1,1\}^n \to \mathbb{R}$满足 $g_D(x) = 2F(x) - 1$，其中 F由递归函数 F_i：$\{-1,1\}^* \to \{1,0\}$ 定义如下：

$$F\left(\bigotimes_{j=1}^{i}(1,x_j)\right) = \begin{cases} 1 & \text{if } i = 1 \\ F\left(\bigotimes_{j=1}^{i-1}(1,x_j)\right)\cdot\left(\dfrac{x_i+1}{2}\right) & \text{if } i > 1 \end{cases} \tag{13}$$

注记 20. 注意， F_i 的行为类似于与函数，因为当且仅当对所有 $i \geq 1$ 均有 $x_i \neq -1$ 时， F_i 才返回 *1*。因此，$g_D = g_{D|P_S^n}$ 与笛卡尔积的集合

$$P_S^n = \bigcup_{(i_1,\ldots,i_n)\in\{+,-\}^n} (S^{i_1} \times \cdots \times S^{i_n})$$

与 $S^{\pm} = \{x \in \{-1,1\}^n \mid F(x) = \pm 1\}$.

引理 21。 对于每个 $g_D \in \mathcal{G}_F^n$，那么 $g_D(x) = 2F(x) - 1$，其中 $F(x) = 2^{-n}\prod_j^n (x_i + 1)$，其中 $x = \bigotimes_{j=1}^n(1, x_j)$。此外，它们的证书复杂度为 $C(F(x)) = \Omega(\log(|x|))$。

证明。 递归性质可以通过对 $n \in \mathbb{N}$ 使用归纳法，并利用以下事实来证明:

$$F((1,x_1)\otimes(1,x_2)) = F(1,x_1)\left(\frac{x_1+1}{2}\right)F(1,x_2)\left(\frac{x_2+1}{2}\right) = 2^{-2}(x_1+1)(x_2+1)$$

根据公式 13 的定义。对于第 2 节中定义的证书复杂度，我们利用 F 的性质，并搜索 F 树以得到 0 或 1。由于函数 F 当且仅当每个 $i \geq 1$ 都满足 $x_i = 1$ 时返回 1（见图 3），因此只需进行一次查询来获得 0-证书，并进行 n 次查询来获得 1-证书；因此 $C(F(x)) = \Omega(n)$。但是，根据变量 x 的构造，我们可以通过取 $X = \{x_1, \ldots, x_n\}$ 中的变量集合来获得张量积 $x = \bigotimes_{i=1}^n(1, x_i) = (prod(S))_{S\in 2^X}$ 上的运算积，其中若 $S \neq \emptyset$，则 $prod(S) = \prod_{y\in S} y$，否则 $prod(S) = 1$。显然，$|x| = 2^n$，因此 $n = \log(|x|)$——这就是证书复杂度所需的查询次数。由于可以用更少的时间进行查询，因此 $C(F) \in \Omega(\log(|x|))$。

□

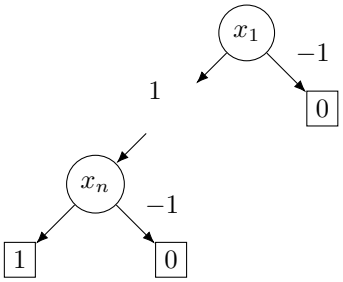


图 3 证书复杂度证明的示意图。

推论 22. 对于每个 $\varepsilon < 1/2$，则 $R_\varepsilon(F) = \Omega\left(\sqrt{\log(|x|)}\right)$。由方程 3 和引理 21可立即得出。

5 L_1 谱范数与测量

量子算法的测量阶段本身也可能是计算复杂性的来源 [16]。这里我们引入一种基于维数的测量“容 量”度量（定义23），并将其与单查询算法的 L_1 范数联系起来。定理 24 表明，这种容量无界增长是实现渐近量子优势的必要条件，这一结果凸显了测量复杂性作为一种基础资源的重要性。

本节介绍一种用于量子算法测量阶段的容量度量，并将其与单次查询量子查询模型（QQM）算法输出的 L_1 范数联系起来。因此，我们建立了单次查询 QQM 算法要获得相对于经典算法的渐近优势所必须满足的条件。

在量子优势的背景下，量子算法中测量阶段的复杂度研究不足。本文介绍一种基于投影算子维数的容量度量，用以刻画单次测量所能提取的信息量。

定义 23。设 $\mathcal{H}$ 为一个 n维希尔伯特空间，且 $\mathcal{H}$. 上有一个 *CSOP* P。那么，我们将 P 的阶定义为

$$order\left(P\right)=\max_{i}\left\{\min\left\{\dim\left(P_i\right),n-\dim\left(P_i\right)\right\}\right\}, \tag{14}$$

其中，$\dim(Q)$ 是由投影算子 Q投影得到的 $\mathcal{H}$ 子空间的维数。

定义 23 给出了一种容量度量，该度量应用于 CSOP，但由维数最接近零或最接近定义 CSOP 的空间维数的投影算子决定。

我们用以下符号表示：

- 对每个 $i\in\mathbb{N}$ 有限希尔伯特空间 $\mathcal{H}_i$。
- 对每个 $i\in\mathbb{N}$ 量子查询算法 $\mathcal{A}_i$，其状态分别属于$\mathcal{H}_i$，并执行一次查询。
- $\mathcal{A}_i$ 在输入 x 上的最终态记为 $\left|\Psi^{f,\ x}{}^{i}\right\rangle\in\mathcal{H}_i$。
- 有限集 Z。
- 对每个 i，一个 CSOP $P^i=\left\{P_z^i\colon\ z\in Z\right\}$。
- 对于每个 $\mathcal{A}_i$，通过对输入 x 进行测量而获得各个输出 $z\in Z$ 的概率为：$\pi_x^i\left(z\right)=\left\|P_z^i\left|\Psi^{f,}\right._{x}^{i}\right\rangle\right\|^2$.

每个 $\mathcal{A}_i$ 都能在误差 ε范围内计算函数 f_i。

于是，我们可以陈述如下定理。

定理 24。若 $R_\varepsilon\left(f_i\right)=\omega(1)$ 则

$$\lim_{i\to\infty}order\left(P_z^i\right)=\infty \tag{15}$$

对于某个 $z\in Z$。

证明。对于每个 QQM 算法 $\mathcal{A}_i$，我们记 i) U_j^i 为第j次查询后的酉算子，与 ii) P_z^i为输出 z的投影算子，iii) $\widetilde{U}_n^i=U_n^iU_{n-1}^i\ldots U_0^i$与$\widetilde{P}_{j,\ k}^i=\left(\widetilde{U}_j^i\right)^\dagger\bar{P}_k\widetilde{U}_j^i$（其中 $\bar{P}_k$如第2节所定义）。对于每个 i与 $z\in Z$，记 $\mathcal{B}_z^i$

作为由 P_z^i 投影的子空间的一组基，则：

$$P_z^i = \sum_{b \in \mathcal{B}_z^i} |b\rangle \langle b| . \tag{16}$$

对于每个 i、 z、 x、 $k \in [n]$ 和 $b \in \mathcal{B}_z^i$，存在系数 $\alpha^{i,\ k^{z},\ b}$，使得

$$P_z^i U_1^i \bar{P}_k U_0^i |\Psi\rangle = \sum_{b \in \mathcal{B}_z^i} \alpha_{k,b}^{i,z} |b\rangle . \tag{17}$$

根据定理2 和等式17 ，可得

$$P_z^i \left|\Psi_x^{f,i}\right\rangle = \sum_{k \in [n]} (-1)^{x_k} \left(\sum_{b \in \mathcal{B}_z^i} \alpha_{k,b}^{i,z} |b\rangle \right), \tag{18}$$

这意味着

$$\left\| P_z^i \left|\Psi_x^{f,i}\right\rangle \right\|^2 = \sum_{k \in [n]} \sum_{h \in [n]} \left(\sum_{b \in \mathcal{B}_z^i} (-1)^{(x_k + x_h)} \alpha_{k,b}^{i,z} \alpha_{h,b}^{i,z} \right) \tag{19}$$

我们定义 $\mathcal{R}$ in $\mathcal{S} = [n] \times [n]$ 上的一个等价关系，使得对于所有 x，$(k,\ h)$ 和 $(k',\ h')$ 等价，当且仅当 $(-1)^{(x_k + x_h)} = (-1)^{(x_{k'} + x_{h'})}$ ；并将等价类集合 $[(k,\ h)]$ 记作 $\mathcal{S}/\mathcal{R}$。因此：

$$L\left(\pi_x^i(z)\right) = \sum_{[(k,h)] \in \mathcal{S}/\mathcal{R}} \left| \sum_{(k',h') \in [(k,h)]} \sum_{b \in \mathcal{B}_z^i} \alpha_{k',b}^{i,z} \alpha_{h',b}^{i,z} \right|, \tag{20}$$

这意味着

$$L\left(\pi_x^i(z)\right) \leq \sum_{b \in \mathcal{B}_z^i} \sum_{[(k,h)] \in \mathcal{S}/\mathcal{R}} \sum_{(k',h') \in [(k,h)]} \left| \alpha_{k',b}^{i,z} \alpha_{h',b}^{i,z} \right| = \sum_{b \in \mathcal{B}_z^i} \left(\sum_{k \in [n]} \left| \alpha_{k,b}^{i,z} \right| \right)^2 . \tag{21}$$

设 $|\alpha\rangle$ ， $|\beta\rangle \in \mathcal{H}$，以及希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 中一个 1 阶 CSOP $P = \{P_k\}$ ；注意，若 $\||\beta\rangle\| = 1$ ，则

$$\sum_k |\langle\beta| P_k |\alpha\rangle| \leq \||\alpha\rangle\| . \tag{22}$$

由方程17 可得

$$\langle b| U_1^i \bar{P}_k U_0^i |\Psi\rangle = \alpha_{k,b}^{i,z}, \tag{23}$$

并将等式 22 应用于等式23 ，可得

$$\sum_{k \in [n]} \left| \alpha_{k,b}^{i,z} \right| \leq 1. \tag{24}$$

根据定理 6，等式 23 和等式24；如果存在某个 K 以及一个严格递增的无穷整数序列 c_i 满足

$$order\left(P_z^{c_i}\right) < K \tag{25}$$

对所有 z，则

$$R_\varepsilon\left(f_{c_i}\right) < K' \tag{26}$$

对于某些 K'。

由于 Z 是有限的，并且根据方程 26，每个 $z \in Z$ 的概率都可以由经典算法高效计算，因此经典算法可以在有限次查询内重现完整的输出分布。

□

我们强调，定理24 仅适用于可能输出数量有限的单查询算法。该结果表明，每个输出对应的投影算子的适当维数，是单查询量子算法相较于经典算法获得指数优势的必要条件。

6 结论

本文提出了一个计算上可处理的框架，用于研究单查询量子算法优于经典决策树的问题搜索。这是因为单查询量子算法与对称矩阵或加权图之间存在直接联系。因此，可以采用组合分析和矩阵分析技术来解决该问题。该方案基于最大化多线性二次多项式的输出作为加权图时的 L_1 谱范数，因为较高的 L_1 谱范数是此类输出难以通过经典决策树模拟的必要条件。因此，该方案可以表述为带约束的最大化问题，以及与之等价的最小化问题。不过，倾向于增大谱范数 L_1 的非最优解也值得关注。作为未来工作，我们建议开发一种模拟技术，将加权有向图转换为量子查询模型算法，使得如果加权有向图在计算某个函数时的误差趋于零，那么量子查询模型算法的误差也趋于零。

为最大化二次多线性多项式的 L_1 范数而提出的策略，依赖于两个多项式的矩阵表示之间的克罗内克积表达式。正如我们在分析最大化 L_1 范数的多项式的最大值和最小值时所看到的，我们找到了这样的布尔函数：单查询量子算法的表现优于经典算法。一个尚待解答的问题是，我们可以提出哪些策略来最大化涉及其他类型复合、甚至完全不依赖任何复合的 L_1 范数?

最后，我们给出了一个必要条件：具有有限个可能输出的单查询量子算法，若要在计算函数时相较于经典查询算法取得渐近优势，就必须满足该条件。该条件基于一种度量，该度量取决于输出投影的维数，并体现了

测量阶段的复杂度作为 QQM 算法的一种计算资源，并为量子算法的设计提供了指导。关于这一结果，一个显而易见的问题是：对于查询次数有上界且该上界为大于 1 的常数的算法序列，测量复杂度会产生什么影响？更一般地，如果查询次数由一个取决于输入大小的函数所限制，又会产生什么影响？

尽管加权图表述为分析单查询量子优势提供了一种新颖的方法，但仍有若干方向值得进一步研究。首先，该方法假设采用有界误差近似；如何将其扩展到零误差或精确计算仍有待解决。其次，目前这一框架仅适用于二次多项式；将其推广到更高次数的多项式可能需要采用超图表示。最后，加权有向图优化与可实现量子电路之间的联系尚未形成构造性方案，这是实际应用中一个亟待弥补的关键空白。

致谢。本研究获巴拉圭 CONACYT 资助，项目编号 PINV01-397；并获伊比利亚美洲科技发展计划（CYTED）通过 RIPAISC——伊比利亚美洲量子软件工程发展网络（525RT0174）资助。F.L.M. 感谢 CNPq 项目编号 407296/2021-2、CNPq 项目编号 306049/2025-2，以及国家应用量子计算科学技术研究所通过 CNPq 项目编号 408884/2024-0 提供的经费支持。

参考文献

[1] Portugal, R.：《量子漫步与搜索算法》。施普林格，???（2013年）

[2]Aharonov, D., Ambainis, A., Kempe, J., Vazirani, U.：图上的量子游走。载于：第三十三届 ACM 计算理论年会论文集。STOC '01，第 50–59 页。计算机协会，纽约，纽约州，美国（2001年）。https://doi.org/10.1145/380752.380758。https://doi.org/10.1145/380752.380758

[3] Abbas, A., Ambainis, A., Augustino, B.，等：量子优化中的挑战与机遇。《自然·物理评论》**6**（12），718–735（2024年）[4]Lloyd, S.：通用量子模拟器。《科学》**273**（5278），1073–1078（1996年）
h
t
t
p
s://
doi.org/10.1126/science.273.5278.1073https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.273.5278.1073
[5] Barnum, H.、Saks, M.、Szegedy, M.：量子查询复杂度与半定规划。载于：第18届IEEE计算复杂性年度会议，2003年。会议录，第179–193页（2003年）。IEEE[6] Grover, L.K.：量子计算机能够通过单次查询搜索任意大型数据库。《物理评论快报》**79**（23），4709（1997年）[7] Terhal, B.M.、Smolin, J.A.：数据库的单次量子查询。《物理评论A辑》**58**（3），1822（1998年）

[8] Grosshans, F.、Lawson, T.、Morain, F.、Smith, B.：通过单次量子查询分解安全半素数。arXiv预印本 arXiv:1511.04385（2015年）[9] Deutsch, D.、Jozsa, R.：通过量子计算快速解决问题。《伦敦皇家学会会刊：A辑》439（1907），553–558（1992年）[10] Beals, R.、Buhrman, H.、Cleve, R.、Mosca, M.、Wolf, R.：基于多项式的量子下界。《ACM期刊》48（4），778–797（2001年）[11] Aaronson, S.、Ambainis, A.：Forrelation：一种将量子计算与经典计算实现最优区分的问题。载于：第四十七届ACM计算理论研讨会年会会议录，第307–316页（2015年）[12] Aaronson, S.、Ambainis, A.、Iraids, J.、Kokainis, M.、Smotrovs, J.：多项式、量子查询复杂度与格罗滕迪克不等式。arXiv预印本 arXiv:1511.08682（2015年）[13]Grillo, S.A.、Lima Marquezino, F.：傅里叶1-范数与量子加速。《量子信息处理》18（4），99（2019年）[14] Winter, A.、Massar, S.：量子测量操作的压缩。《物理评论A辑》64（1），012311（2001年）[15] Massar, S.、Popescu, S.：量子测量所获取的信息量。《物理评论A辑》61（6），062303（2000年）[16] Gharibian, S.、Yirka, J.：模拟量子系统上局域测量的复杂性。《Quantum》3，189（2019年）[17] O’Donnell, R.：布尔函数分析。剑桥大学出版社，???（2014年）[18]Grillo, S.A.、Marquezino, F.L.：作为态分解的量子查询。《理论计算机科学》736，62–75（2018年）[19] Aaronson, S.：量子证书复杂度。《计算机与系统科学杂志》74（3），313–322（2008）[20] Arora, S.、Barak, B.：计算复杂性：一种现代方法。普林斯顿大学，???（2007年）[21] Buhrman, H.、De Wolf, R.：复杂性度量与决策树复杂度：综述。《理论计算机科学》288（1），21–43（2002年）[22]Styan, G.P.H.：哈达玛积与多元统计分析。《线性代数及其应用》6，217–240（1973年） https://doi.org/10.1016/ 0024-3795(73)90023-2

[23]Absil, P.-A., Mahony, R., Sepulchre, R.: 《矩阵流形上的优化算法》。普林斯顿大学出版社，???（2008）