

グローバーのアルゴリズム

9BSP1118 村岡海人

2022 年 11 月 17 日

1 概要

このグローバーのアルゴリズムは以下のような流れで行う。 N 個のデータに対して、 $\Omega(\sqrt{N})$ 回の計算量で回を見出すことができる。古典的な探索アルゴリズムにも同じ計算量を持つ 2 分探索があるが、2 分探索アルゴリズムは事前にソートされているデータを扱うため、ソートされていないデータの探索アルゴリズムではグローバーのアルゴリズムの方が高速である。

このグローバーのアルゴリズムは以下のような流れで行う。 n を量子ビット数とすると、 $N = 2^n$ の要素からなるデータベースから M 個の解を探索する問題を考え、要素のラベルを n 桁のビット列 $x = x_1 \cdots x_n$ とする。

- 全ての状態の重ね合わせ状態 $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_x |x\rangle$ を用意する
- 演算子 U_w (解に対する反転操作) を作用させる
- 演算子 U_s ($|s\rangle$ を対称軸にした反転操作) を作用させる
- 2、3 を k 回繰り返す

2 アルゴリズムの流れ

まず初めに、全ての状態の重ね合わせ状態 $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_x |x\rangle$ を用意する。初期状態 $|0\rangle^{\otimes n}$ に対して全ての量子ビットにアダマール演算をかけると、

$$\begin{aligned}
|s\rangle &= H^{\otimes n} |0\rangle^{\otimes n} \\
&= (H \otimes \cdots \otimes H) |0 \cdots 0\rangle \\
&= \frac{1}{(\sqrt{2^n})} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes \cdots \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|00 \cdots 00\rangle + |00 \cdots 01\rangle + \cdots + |11 \cdots 10\rangle + |11 \cdots 11\rangle) \\
|s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle
\end{aligned} \tag{1}$$

のように計算できる。

次に解に対する反転操作を作用させる。入力 $|x\rangle$ に対して x が解なら、 -1 を掛けて位相を反転し、解でないなら 1 を掛ける。つまり、ゲートを以下のように定義する。検索したい値を w とし、

$$\begin{cases} U_w |x\rangle = |x\rangle & (x \neq w) \\ U_w |w\rangle = -|w\rangle \end{cases} \tag{2}$$

$$U_w = I - 2 \sum_{w \in \text{解}} |w\rangle \langle w| \tag{3}$$

となる。これを用いると、 $|s\rangle$ は、

$$\begin{aligned}
U_w |s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0, x \neq w}^{2^n-1} U_w |x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2^n}} U_w |w\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0, x \neq w}^{2^n-1} |x\rangle - \frac{1}{\sqrt{2^n}} |w\rangle \\
&= \left(|s\rangle - \frac{1}{\sqrt{2^n}} |w\rangle \right) - \frac{1}{\sqrt{2^n}} |w\rangle \\
U_w |s\rangle &= |s\rangle - \frac{2}{\sqrt{2^n}} |w\rangle
\end{aligned} \tag{4}$$

のように計算できる。

最後に $|s\rangle$ を対称軸にした反転操作 U_s を定義する。

$$U_s = 2 |s\rangle \langle s| - I = H^{\otimes n} (2 |0 \cdots 0\rangle \langle 0 \cdots 0| - I) H^{\otimes n} \tag{5}$$

$$\begin{cases} U_s |x\rangle = 2 \langle s | x \rangle |s\rangle - |x\rangle = \frac{2}{\sqrt{2^n}} |x\rangle \\ U_s |s\rangle = 2 \langle s | s \rangle |s\rangle - |s\rangle = |s\rangle \end{cases} \tag{6}$$

式 (4) より、 U_s を作用させると、

$$\begin{aligned}
U_s |s\rangle - \frac{2}{\sqrt{2^n}} U_s |w\rangle &= |s\rangle - \frac{2}{\sqrt{2^n}} \left(\frac{2}{\sqrt{2^n}} |s\rangle - |w\rangle \right) \\
&= \frac{2^n - 4}{2^n} |s\rangle + \frac{2}{\sqrt{2^n}} |w\rangle \\
&= \frac{2^n - 4}{2^n \sqrt{2^n}} \sum_{x=0, x \neq w}^{2^n - 1} |x\rangle + \left(\frac{2^n - 4}{2^n \sqrt{2^n}} + \frac{2}{\sqrt{2^n}} \right) |w\rangle \\
&= \frac{2^n - 4}{2^n \sqrt{2^n}} \sum_{x=0, x \neq w}^{2^n - 1} |x\rangle + \frac{3 \cdot 2^n - 4}{2^n \sqrt{2^n}} |w\rangle
\end{aligned} \tag{7}$$

ように計算できる。

$|s\rangle$ の時の状態では、 $|w\rangle$ を測定すると、確率は $\frac{1}{2^n}$ となる。式 (2.7) から確率が上昇していることがわかる。この確率を増幅させる操作のことを、振幅増幅と呼ぶ。グローバーのアルゴリズムは、この振幅増幅を複数回行うことにより、 $|w\rangle$ の確率を 1 に近づける。

3 図を使用しての説明

$|w\rangle$ に直行するベクトル $|w^\perp\rangle$ を用いた平面を考えると、以下のような状態が得られる。

$$\begin{aligned}
|w\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N-M}} \sum_{x=0, x \neq 0}^{2^n - 1} |x\rangle \\
|w^\perp\rangle &= \frac{1}{\sqrt{M}} |w\rangle
\end{aligned}$$

全ての状態の重ね合せ状態 $|s\rangle$ は次のように表すことができるので、2次元平面ベクトルであることがわかる。

$$|s\rangle = \sqrt{\frac{N-M}{N}} |w^\perp\rangle + \sqrt{\frac{M}{N}} |w\rangle \tag{8}$$

全ての状態の重ね合わせ状態 $|s\rangle$ は次のように表せるので、この2次元平面内ベクトルであることがわかる。式 (3.1) より、 $\cos \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{N-M}{N}}$, $\sin \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{M}{N}}$ を満たす角 θ を用いれば、

$$|s\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |w^\perp\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |w\rangle \tag{9}$$

と表すことができる。これを図示すると、図 1 のようになる。

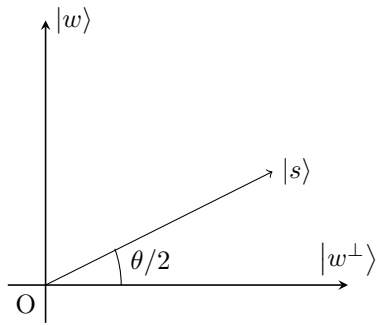


図1 全ての状態の重ね合わせ状態 $|s\rangle$

次に、 $|s\rangle$ に U_w をかけることにより、 $|w^\perp\rangle$ を軸に反転すると、図2 のようになる。

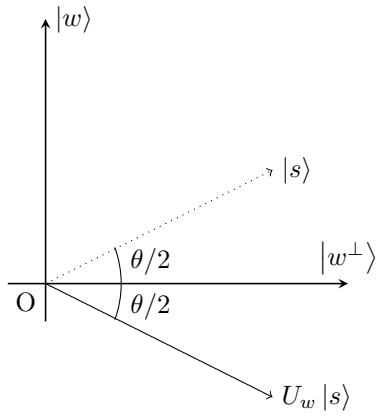


図2 $|s\rangle$ に U_w を作用

最後に、 U_s を作用させることにより、 $|s\rangle$ を軸に $U_w |s\rangle$ を反転させると、図3 のようになる。

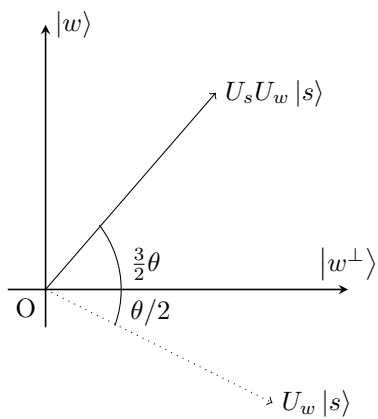


図3 $U_w |s\rangle$ に U_s を作用

以上より、平面ベクトル内で、角度 θ だけの回転が行われ、 $|w\rangle$ を測定する確率が上昇することがわかる。

4 最適な k の見積もり

最後に、 $U_s U_w$ を作用させる回数 k について、最適な回数が幾つなのか調べる。式 (3.2) より、グローバーのアルゴリズムを 1 回施すと、

$$U_s U_w |s\rangle = \cos \frac{3}{2}\theta |w^\perp\rangle + \sin \frac{3}{2}\theta |w\rangle \quad (10)$$

となる。これを k 回施すと、

$$(U_s U_w)^k |s\rangle = \cos \frac{2k+1}{2}\theta |w^\perp\rangle + \sin \frac{2k+1}{2}\theta |w\rangle \quad (11)$$

となる。これを用いて、最終的に $|w\rangle$ の確率振幅を 1 にしたいので、

$$\begin{aligned} \sin \frac{2k+1}{2}\theta &= 1 \\ \Leftrightarrow \frac{2k+1}{2}\theta &= \frac{\pi}{2} \\ \therefore k &= \frac{\pi}{2\theta} \end{aligned} \quad (12)$$

となる。よって、 $\frac{2k+1}{2}\theta$ が $\frac{\pi}{2}$ にもっとも近くなるときは、

$$R = \text{ClosestInteger}\left(\frac{\pi}{2\theta} - \frac{1}{2}\right) \quad (13)$$

の時である。ここで、 $\text{ClosestInteger}(\dots)$ は \dots に最も近い整数を表す。

最後に、 R の上限を評価する。 $\theta > 0$ について成り立つ式、

$$\frac{\theta}{2} \geq \sin \frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{M}{N}} \quad (14)$$

を使うと、以下のように表すことができる。

$$R \leq \left(\frac{\pi}{2\theta} - \frac{1}{2}\right) + 1 = \frac{\pi}{2\theta} + \frac{1}{2} \leq \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{N}{M}} + \frac{1}{2} \quad (15)$$

つまり、 R は $O(\sqrt{N/M})$ である。これにより、グローバーのアルゴリズムが $O(\sqrt{N})$ で動作することがわかる。

参考文献

- [1] https://dojo.qulacs.org/ja/latest/notebooks/8.2_Grovers_algorithm.html
- [2] 秀和システム：IBM Quantum で学ぶ量子コンピュータ