グローバーのアルゴリズム

9BSP1118 村岡海人

2022 年 11 月 20 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 として、

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

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

となる。これを用いると、$|s\rangle$ は、

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

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。

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

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

式 (4) より、U_s を作用させると、

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

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。

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

$$
|w^{\perp}\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} |w\rangle
$$

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。

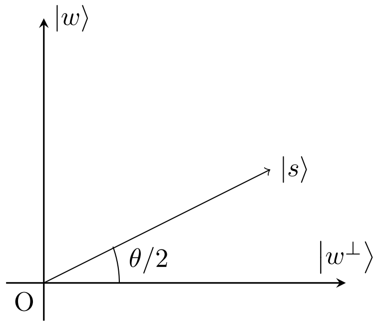

図 1　全ての状態の重ね合わせ状態 $|s\rangle$

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。

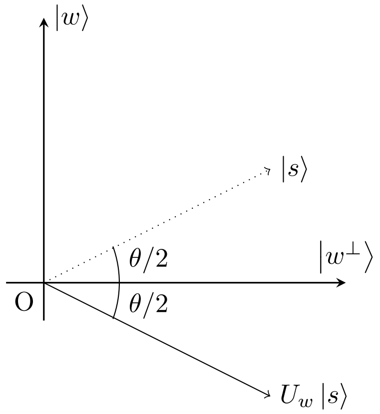

図 2　$|s\rangle$ **に** U_w **を作用**

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。

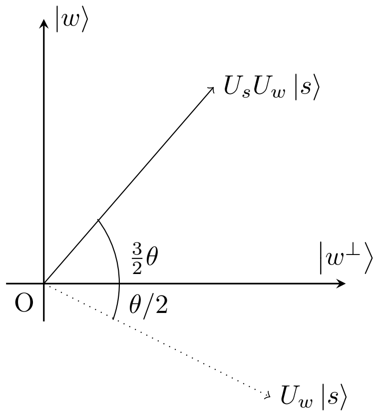

図 3　$U_w|s\rangle$ **に** U_s **を作用**

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、

$$U_s U_w |s\rangle = \cos\frac{3}{2}\theta \left|w^{\perp}\right\rangle + \sin\frac{3}{2}\theta |w\rangle \tag{10}$$

となる。これを k 回施すと、

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

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、

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

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、

$$R = ClosestInteger(\frac{\pi}{2\theta} - \frac{1}{2}) \tag{13}$$

の時である。ここで、$ClosestInteger(...)$ は ... 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、

$$\frac{\theta}{2} \geq \sin\frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{M}{N}} \tag{14}$$

を使うと、以下のように表すことができる。

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

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