glover 計算

2021 年 4 月 16 日

1　グローバーのアルゴリズムの計算

アルゴリズムの詳細については下記を参照のこと。

https://dojo.qulacs.org/ja/latest/notebooks/8.2_Grovers_algorithm.html

正解 ω のときだけ 1、他は 0 になる関数 $f_\omega(x)(x0\quad)$ を考える。正解の個数を K 個とする。

また、M 個のインデックスされた固有状態を持つ直行基底 $\mathscr{M} = \{|m\rangle\,(0 \leq m < M)\}$ に対して、オラクル U_ω を以下の様に定義する。

$$U_\omega |m\rangle = (-1)^{f_\omega(m)} |m\rangle\,(0 \leq m < M)$$

これは ω 基底の成分のみ符号を反転させるため、下記のように表現できる。

$$U_\omega = 1 - 2\sum_\omega |\omega\rangle\langle\omega|$$

次に、$\mathscr{M}$ の均一な混合状態を $|s\rangle$ とする。

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_i^N |i\rangle$$

また下記を定義する。

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-K}}\sum |m\rangle \tag{1}$$

$$|\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{K}}\sum |m\rangle \tag{2}$$

$$(\langle\alpha|\alpha\rangle = 1, \langle\beta|\beta\rangle = 1) \tag{3}$$

$|\alpha\rangle$ は $|s\rangle$ の不正解の成分、$|\beta\rangle$ は正解の成分である。すると $|s\rangle$ は

$$
\begin{aligned}
|s\rangle &= \frac{\sqrt{N-K}}{\sqrt{N}}|\alpha\rangle + \frac{\sqrt{K}}{\sqrt{N}}|\beta\rangle && (4)\\
&= \cos\frac{\theta}{2}|\alpha\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\beta\rangle && (5)
\end{aligned}
$$

と書くことができる。

拡散演算子 U_s を下記として定義する。

$$
U_s = 2|s\rangle\langle s| - 1
$$

各種計算。正解 ω の固有状態を $|\omega\rangle$ と記載する。

$$
\begin{aligned}
\hat{s} &= |s\rangle\langle s| && (6)\\
\hat{\omega} &= \sum |\omega\rangle\langle\omega| && (7)\\
\hat{s}|\alpha\rangle &= |s\rangle\langle s|\alpha\rangle && (8)\\
&= \cos\frac{\theta}{2}(\cos\frac{\theta}{2}|\alpha\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\beta\rangle) && (9)\\
&= \cos^2\frac{\theta}{2}|\alpha\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}|\beta\rangle && (10)\\
\hat{s}|\beta\rangle &= \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}|\alpha\rangle + \sin^2\frac{\theta}{2}|\beta\rangle && (11)\\
\hat{\omega}|\alpha\rangle &= 0 && (12)\\
\hat{\omega}|\beta\rangle &= |\beta\rangle && (13)\\
U_s &= 2\hat{s} - 1 && (14)\\
U_\omega &= 1 - 2\hat{\omega} && (15)\\
U_\omega|\alpha\rangle &= |\alpha\rangle && (16)\\
U_\omega|\beta\rangle &= -|\beta\rangle && (17)\\
U_s|\alpha\rangle &= (2\cos^2\frac{\theta}{2} - 1)|\alpha\rangle + 2\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}|\beta\rangle && (18)\\
&= \cos\theta|\alpha\rangle + \sin\theta|\beta\rangle && (19)\\
U_s|\beta\rangle &= 2\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}|\alpha\rangle - (1 - \sin^2\frac{\theta}{2})|\beta\rangle && (20)\\
&= \sin\theta|\alpha\rangle - \cos\theta|\beta\rangle && (21)\\
U_sU_\omega(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) &= U_s(a|\alpha\rangle - b|\beta\rangle) && (22)\\
&= (a\cos\theta - b\sin\theta)|\alpha\rangle + (a\sin\theta + b\cos\theta)|\beta\rangle && (23)\\
&= r(\cos\phi\cos\theta - \sin\phi\sin\theta)|\alpha\rangle + r(\cos\phi\sin\theta + \sin\phi\cos\theta)|\beta\rangle && (24)\\
&(r = \sqrt{a^2+b^2}, \phi = \arccos(a/r)) && (25)\\
&= r\cos(\phi+\theta)|\alpha\rangle + r\sin(\phi+\theta)|\beta\rangle && (26)
\end{aligned}
$$

a, b については波動関数が規格化されていることを要請すると、$r = 1$ としてよい。また実数であることを前

提としてしまっているが、三角関数の合成が複素数で成立するかはわからない。また初期状態の係数が必ず実数にできるかもわからない。

上記から U_sU_ω をかけるごとに θ だけ位相が回ることがわかる。初期の角度は $\frac{\theta}{2}$ なので、

$$(U_sU_\omega)^k |s\rangle = \cos(\frac{1+2k}{2}\theta)|\alpha\rangle + \sin(\frac{1+2k}{2}\theta)|\beta\rangle$$

本題は $|\beta\rangle$ が ±1 になることなので例えば 1 を取ると、$k = \frac{\pi-\theta}{2\theta}$ がほぼ成立する場合では $|\beta\rangle$ の発生確率が高くなる。

2 係数が複素数の場合

アダマール演算ができれば実数として良いのであまり意味がないが、念の為計算してみる。

複素数の位相の全体値はくくり出せるので、自由度としては 1 つになる。大きさ $r = 1$ とする。

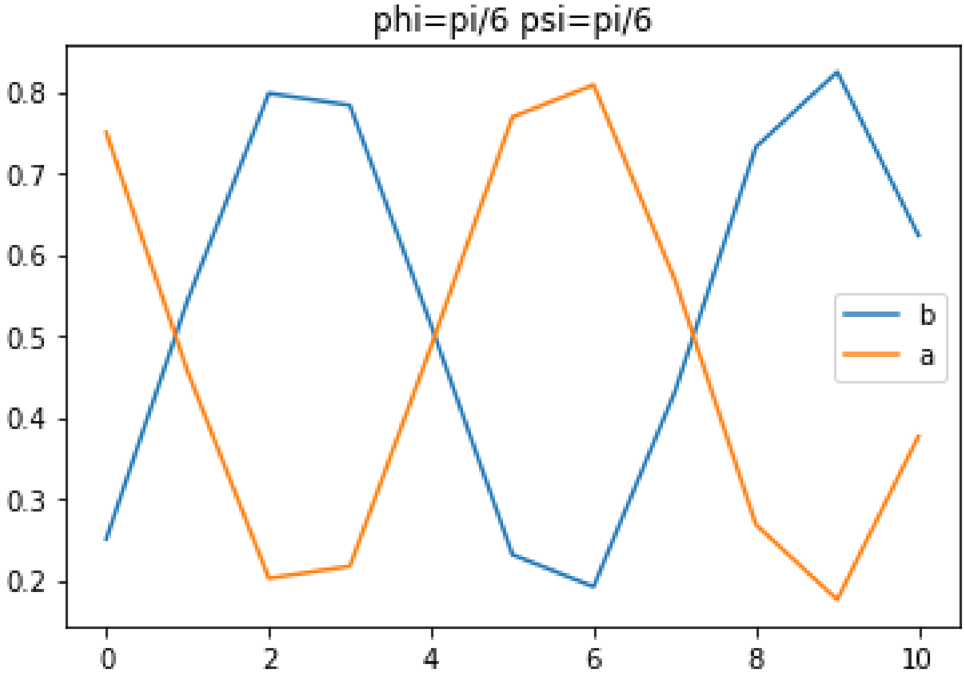
```
\begin{align}
a &= e^{i\psi}\cos\phi\\
b &= e^{-i\psi}\sin\phi\\
a'=&a\cos\theta - b\sin\theta \\
=& \cos\psi(\cos\phi\cos\theta - \sin\phi\sin\theta) \\
&+ i\sin\psi(\cos\phi\cos\theta + \sin\phi\sin\theta) \\
=& \cos\psi\cos(\phi+\theta) + i \sin\psi\cos(\phi - \theta) \\
b'=&a\sin\theta + b\cos\theta \\
=& \cos\psi(\cos\phi\sin\theta + \sin\phi\cos\theta) \\
&+ i\sin\psi(\cos\phi\sin\theta - \sin\phi\cos\theta) \\
=& \cos\psi\sin(\phi+\theta) - i \sin\psi\sin(\phi - \theta)
\end{align}
```

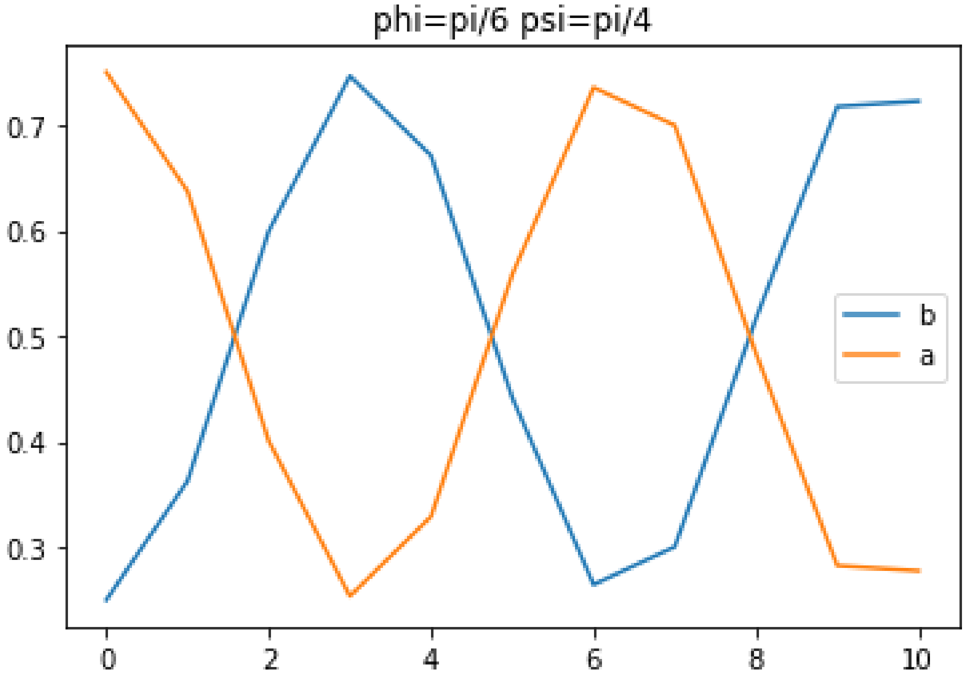
$$
\begin{aligned}
|a'| &= \sqrt{\cos^2\psi\cos^2(\phi+\theta) + \sin^2\psi\cos^2(\phi-\theta)} && (27)\\
&= \cos\phi' && (28)\\
\psi' &= (argc(b') - argc(a'))/2 && (29)
\end{aligned}
$$

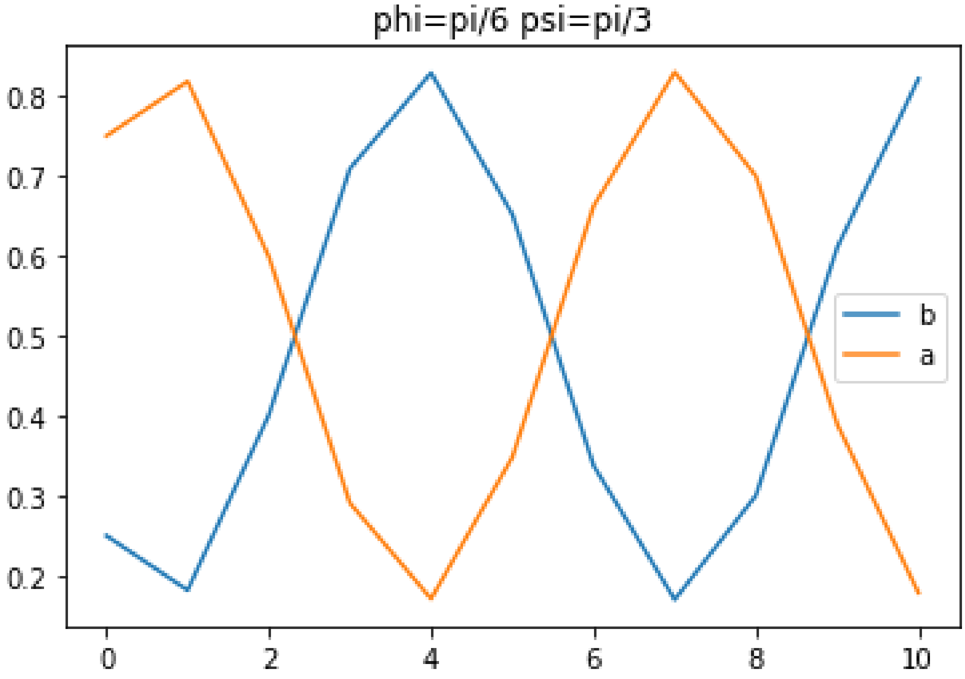
これ以上は難しそう。ちょっと手計算が大変なので数値計算してみる。計算自体は角度というより a, b を使ったほうが楽。

[ ]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import cmath
%matplotlib inline
```

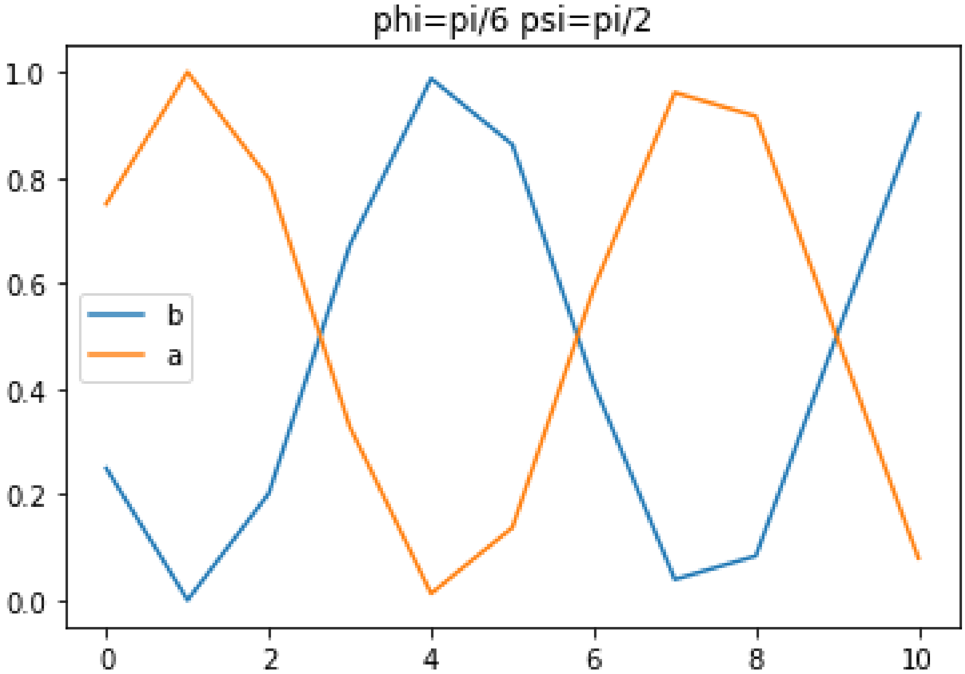
```
[ ]: N = 50
K = 3
theta = 2 * np.arccos(np.sqrt(N-K) / np.sqrt(N))

def plot_amps(theta, phi, psi, title):
    a = cmath.rect(np.cos(phi), psi)
    b = cmath.rect(np.sin(phi), -psi)
    a_r_list = [abs(a)**2]
    b_r_list = [abs(b)**2]
    for _ in range(10):
        new_a = a * np.cos(theta) - b * np.sin(theta)
        new_b = a * np.sin(theta) + b * np.cos(theta)
        a_r_list.append(abs(new_a)**2)
        b_r_list.append(abs(new_b)**2)
        a = new_a
        b = new_b
    plt.title(title)
    plt.plot(b_r_list, label="b")
    plt.plot(a_r_list, label="a")
    plt.legend()
    plt.show()

# phi = np.pi / 8  # 状態 s の場合は theta/2 だが今回は色々変えて確認する。
# psi = np.pi / 3
# plot_amps(theta, phi, psi, "phi={} psi={}".format("pi/8", "pi/3"))

phis = [np.pi/ 6, np.pi/4, np.pi / 3, np.pi / 2, np.pi * 2/3, np.pi * 3/ 4, np.pi *␣
 ↪5/6, np.pi]
phi_names = ["pi/6", "pi/4", "pi/3", "pi/2", "pi2/3", "pi3/4", "pi5/6", "pi"]
psis = [np.pi/ 6, np.pi/4, np.pi / 3, np.pi / 2, np.pi * 2/3, np.pi * 3/ 4, np.pi *␣
 ↪5/6, np.pi]
psi_names = ["pi/6", "pi/4", "pi/3", "pi/2", "pi2/3", "pi3/4", "pi5/6", "pi"]
for phi, phi_name in zip(phis, phi_names):
    for psi, psi_name in zip(psis, psi_names):
        plot_amps(theta, phi, psi, "phi={} psi={}".format(phi_name, psi_name))
```


phi=pi/6 psi=pi/6
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

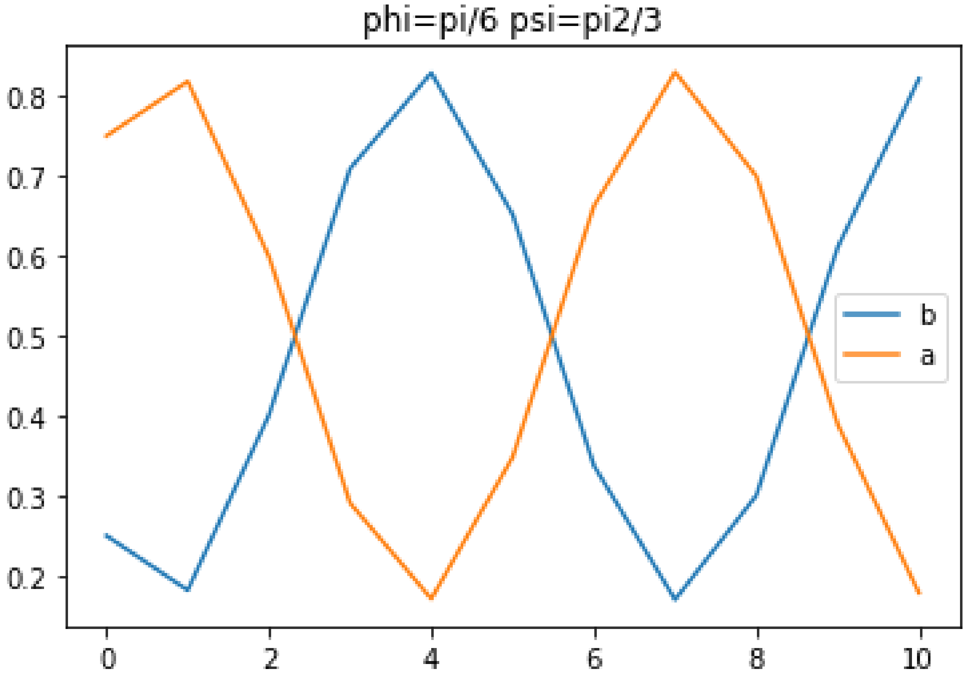

phi=pi/6 psi=pi/4
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10
b
a

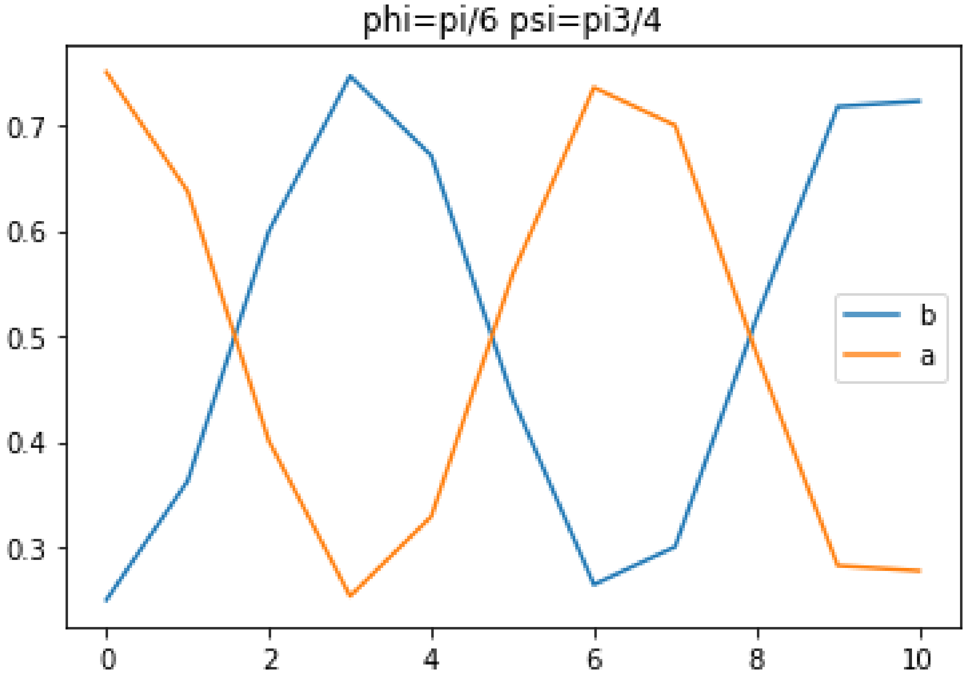


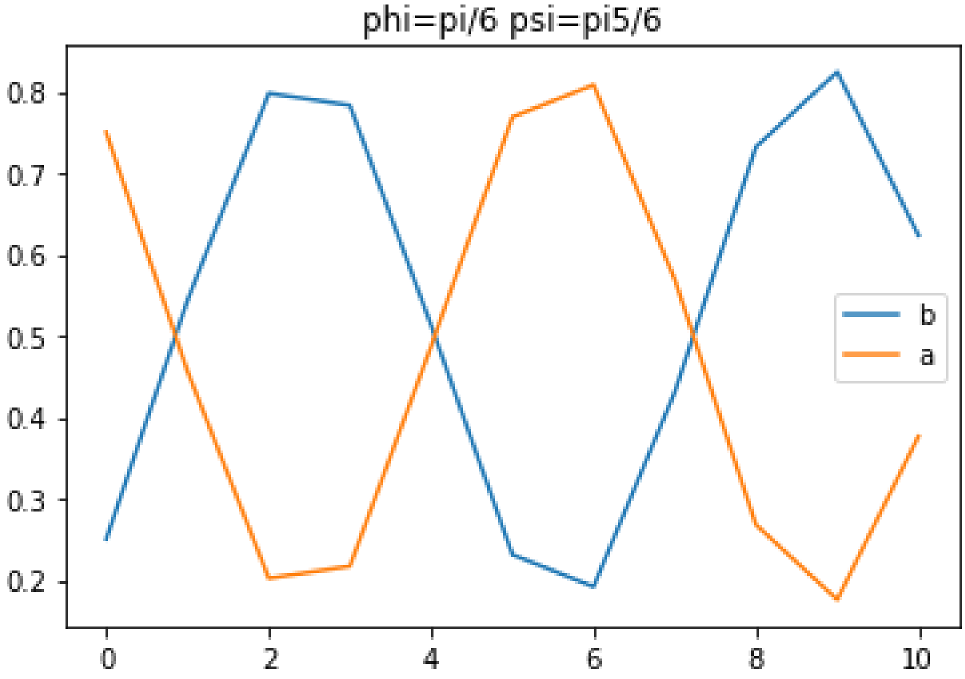
phi=pi/6 psi=pi/3
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

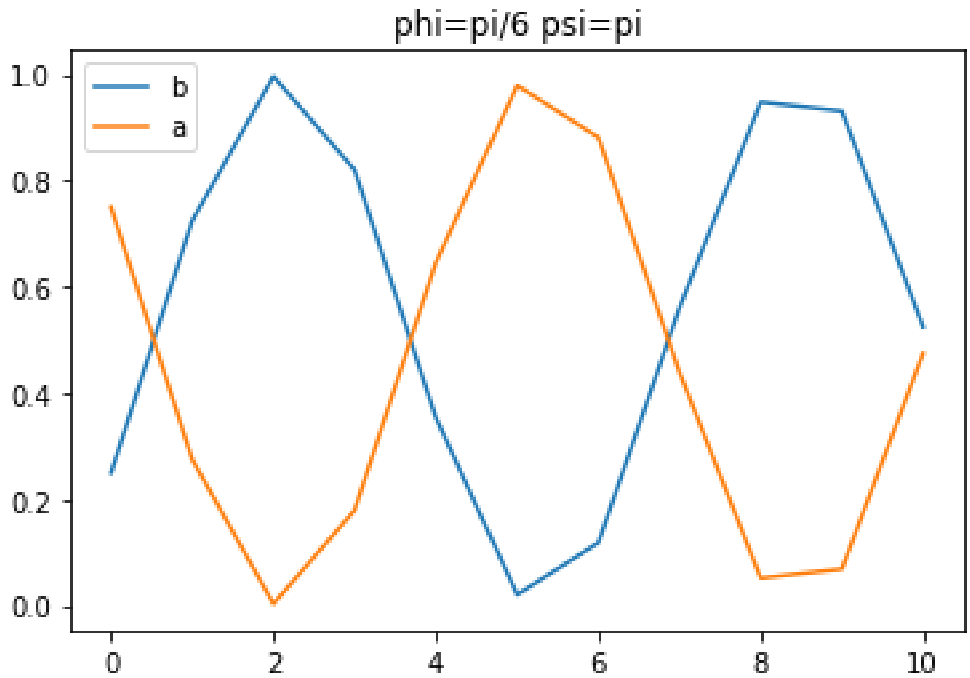


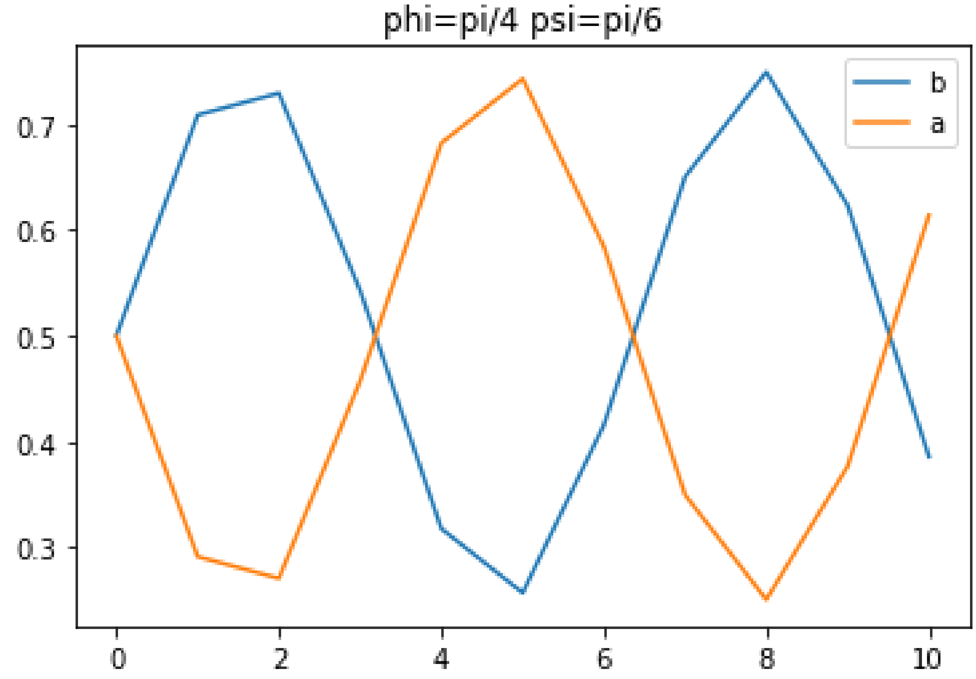
phi=pi/6 psi=pi/2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

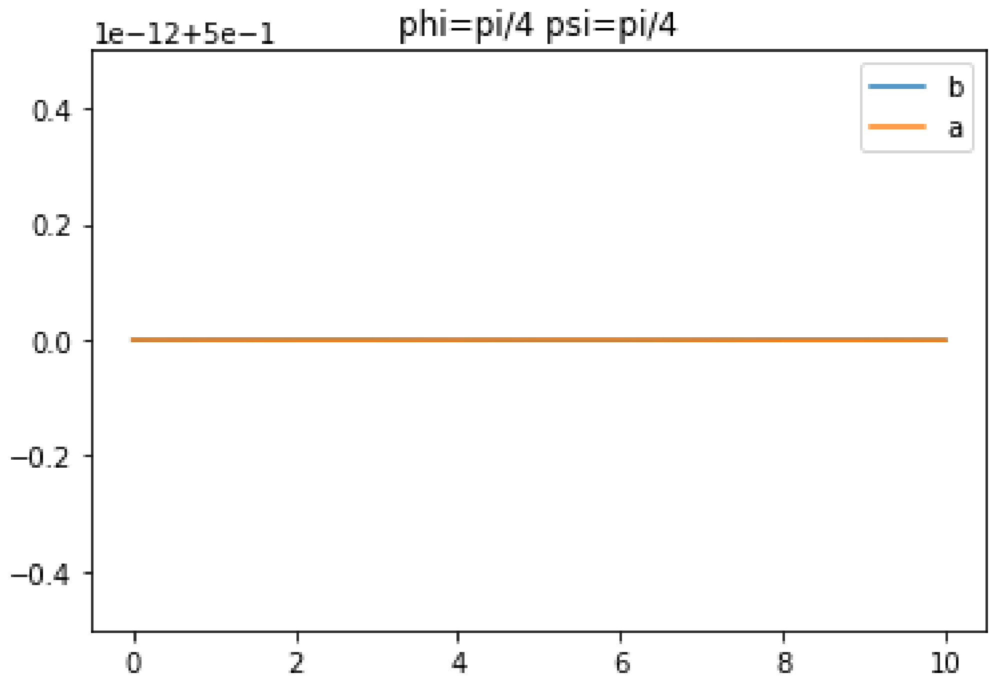

phi=pi/6 psi=pi2/3
b
a
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10

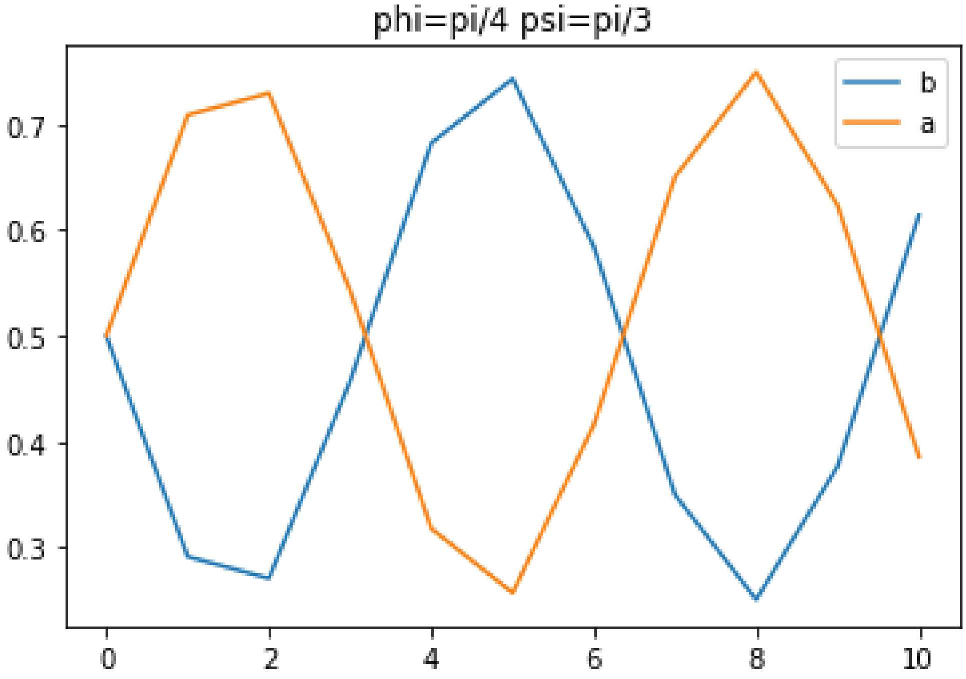

phi=pi/6 psi=pi3/4
b
a
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10

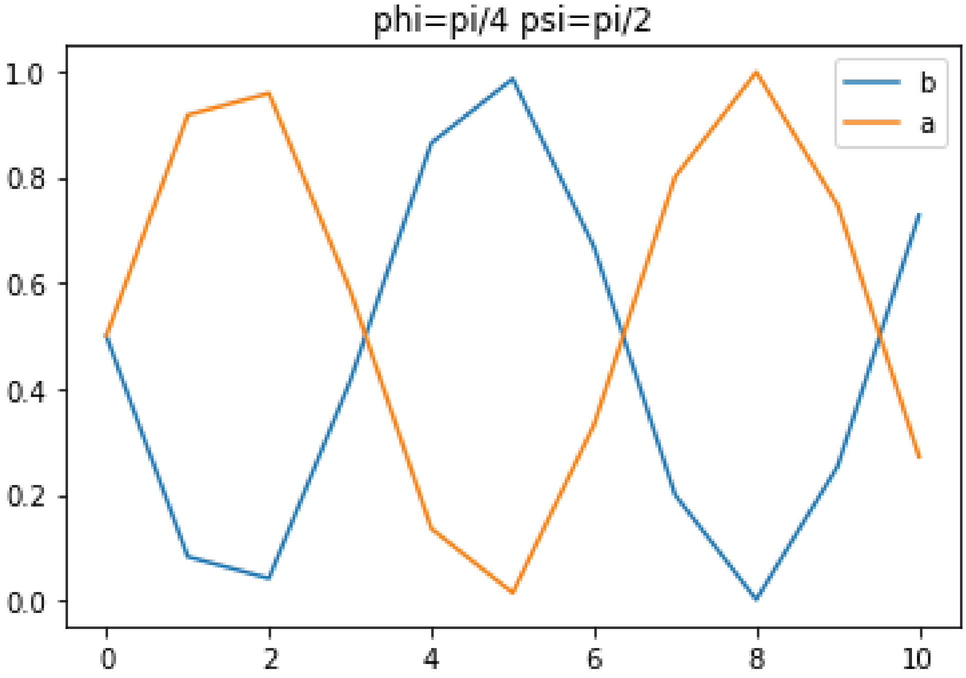

phi=pi/6 psi=pi5/6
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

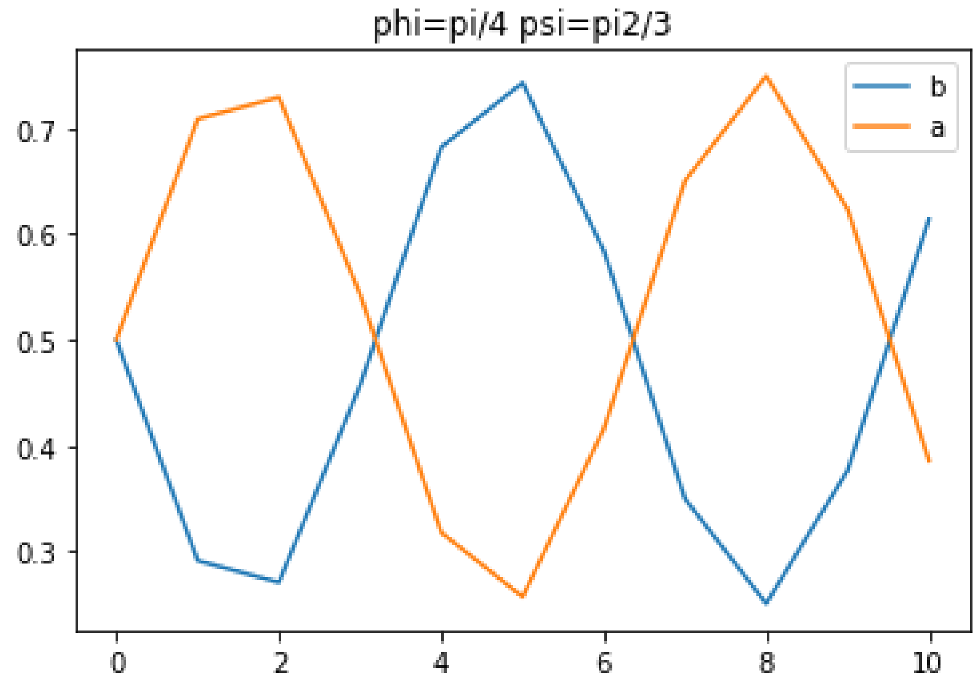

phi=pi/6 psi=pi
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

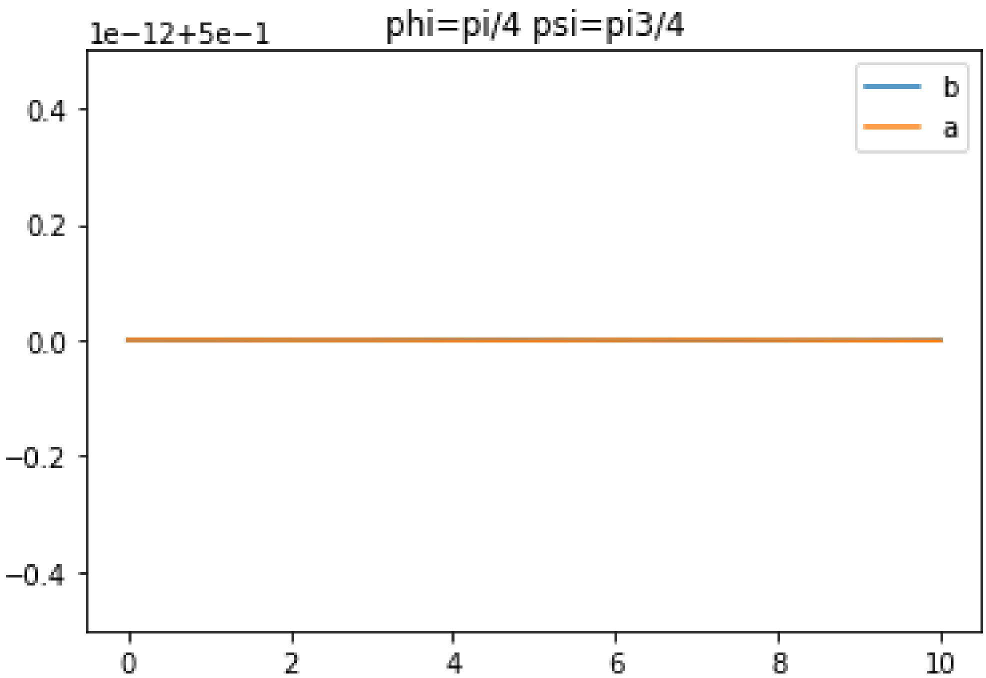

phi=pi/4 psi=pi/6
b
a
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10

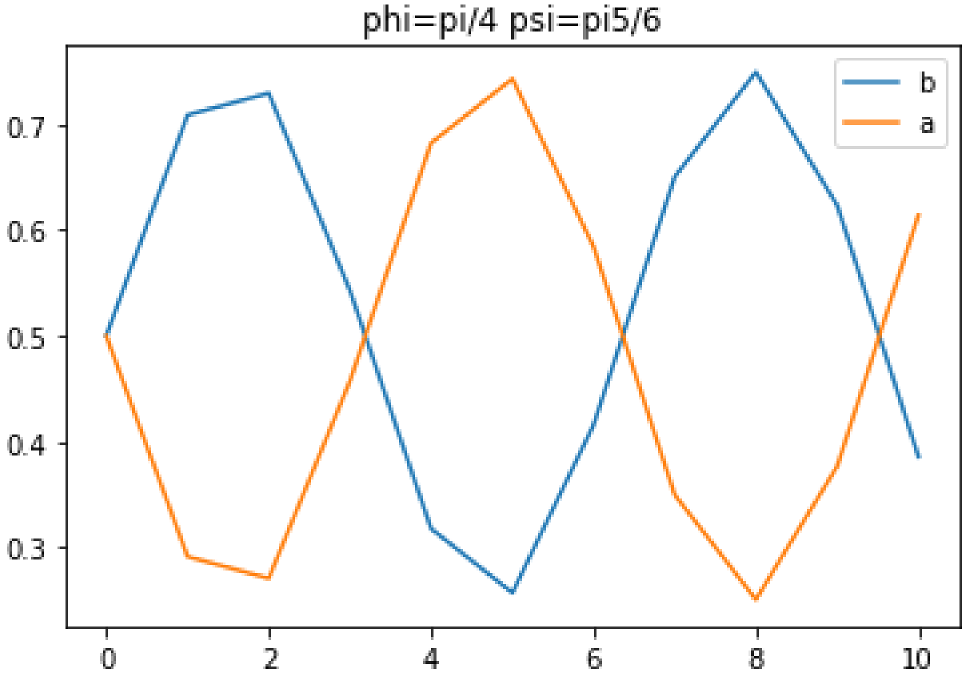

phi=pi/4 psi=pi/4
1e−12+5e−1
b
a
0.4
0.2
0.0
−0.2
−0.4
0
2
4
6
8
10

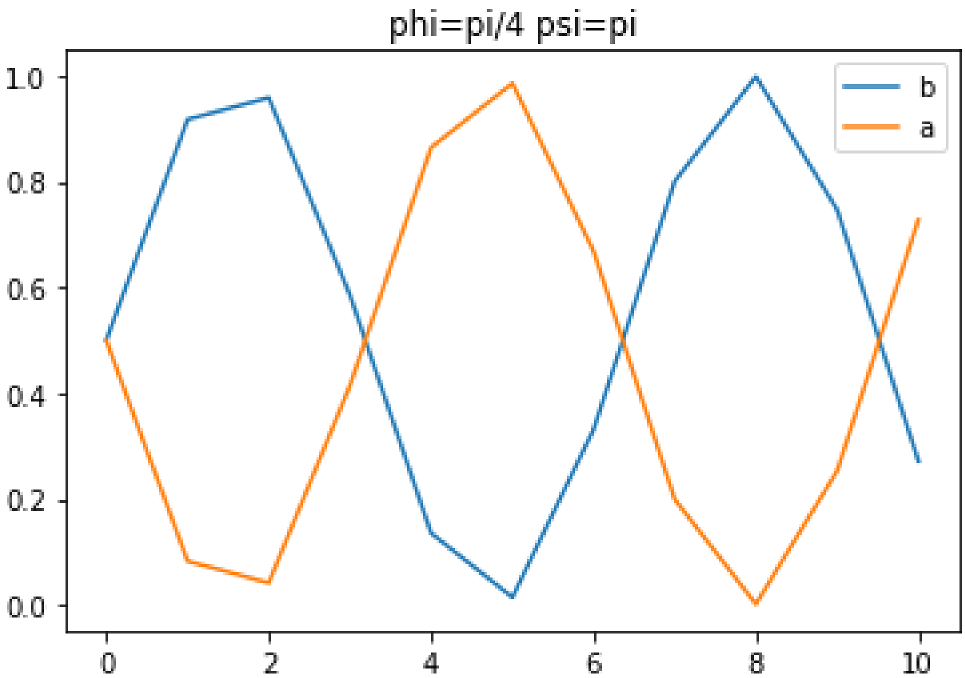

phi=pi/4 psi=pi/3
b
a
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10

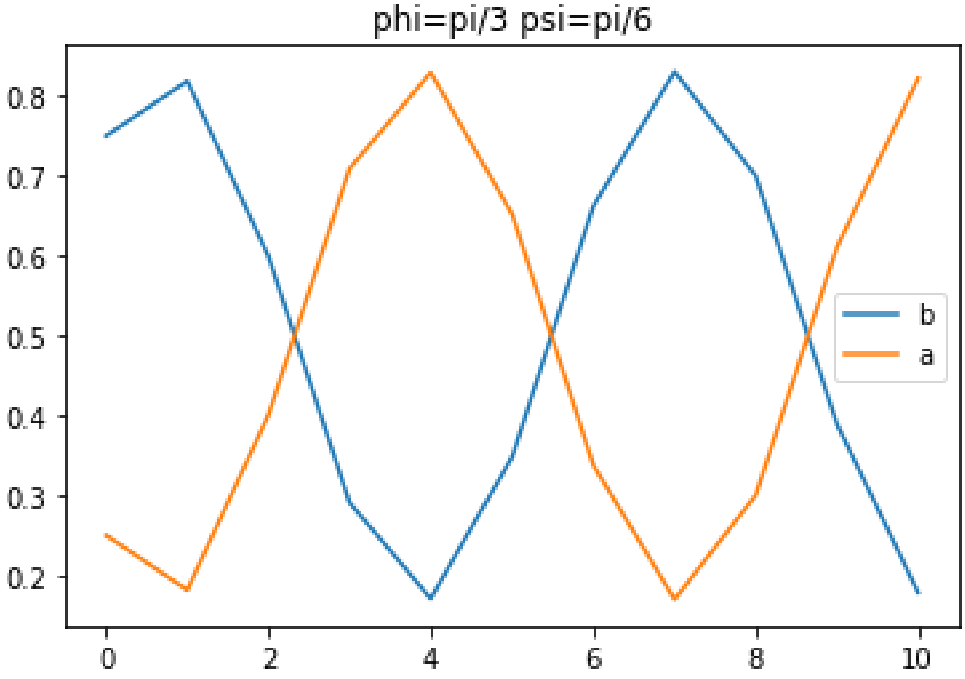

phi=pi/4 psi=pi/2
b
a
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10


phi=pi/4 psi=pi2/3
b
a
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10

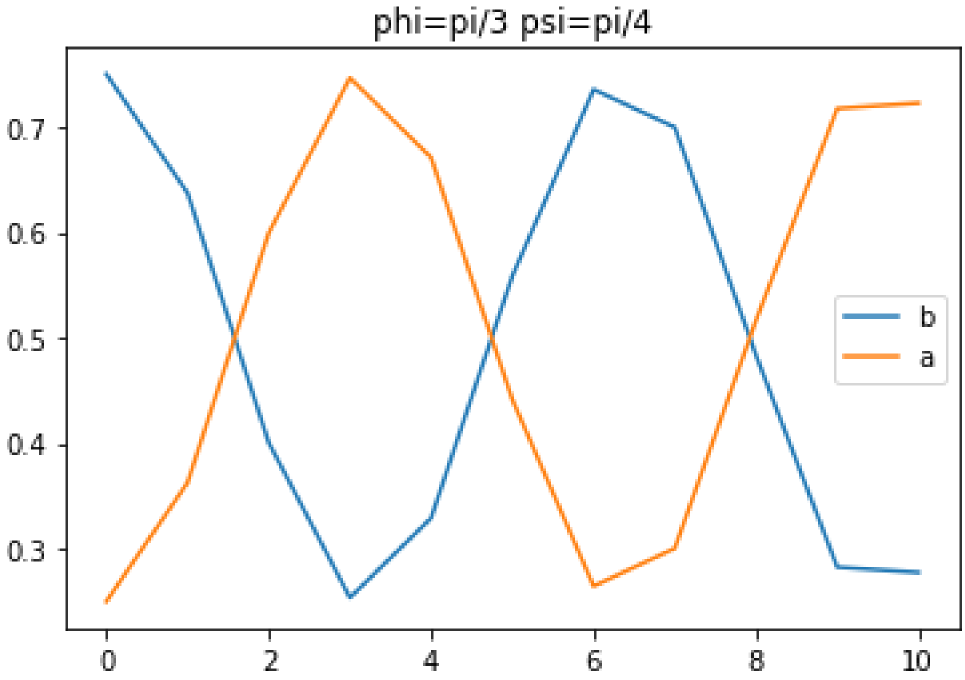

phi=pi/4 psi=pi3/4
1e−12+5e−1
b
a
0.4
0.2
0.0
−0.2
−0.4
0
2
4
6
8
10


phi=pi/4 psi=pi5/6
b
a
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10

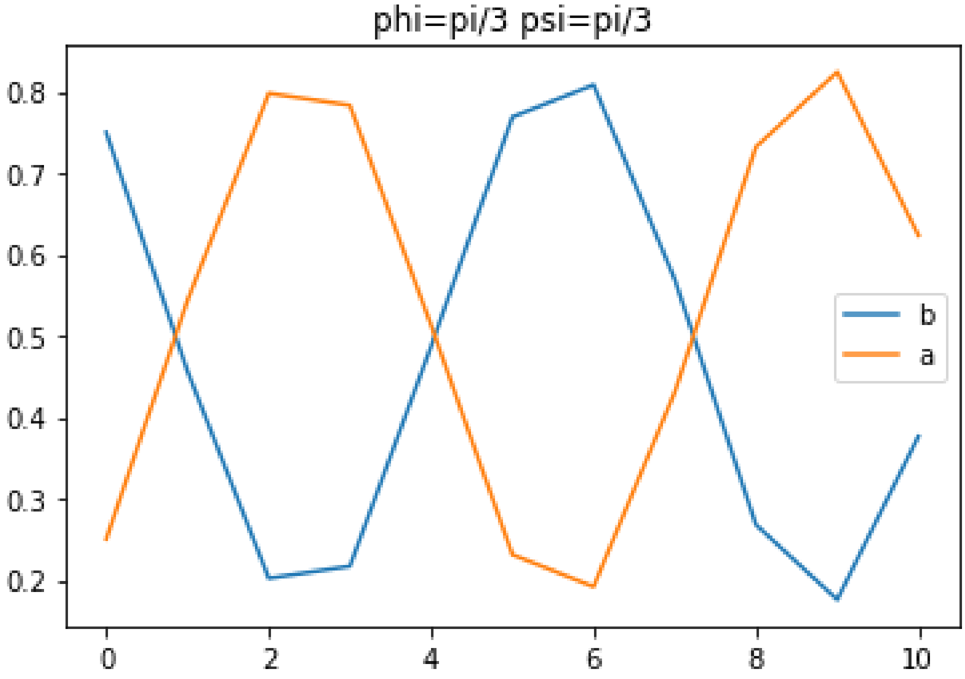

phi=pi/4 psi=pi
b
a
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10

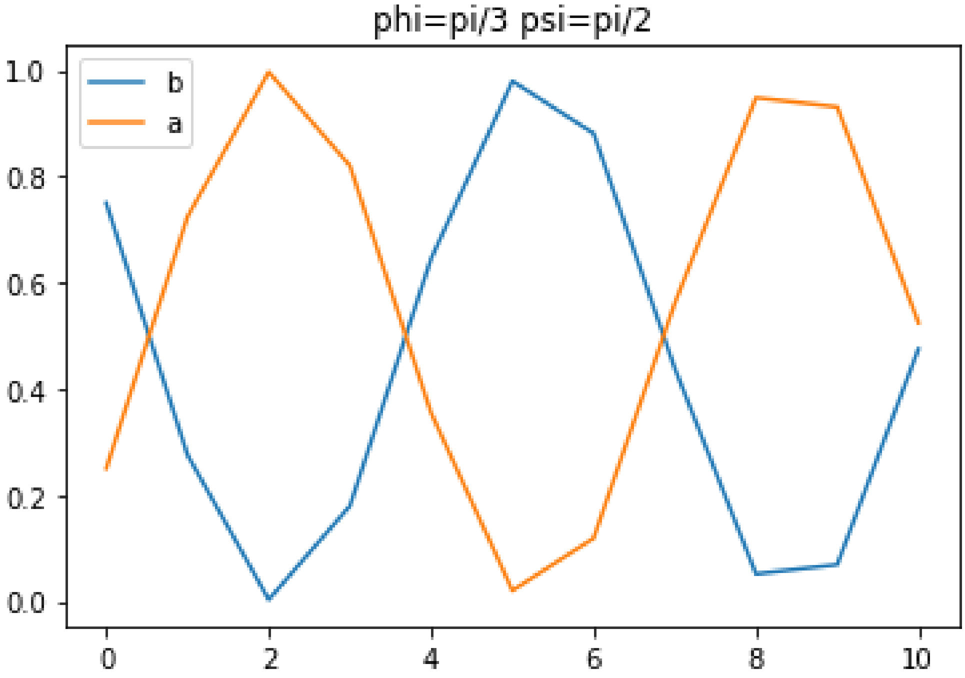


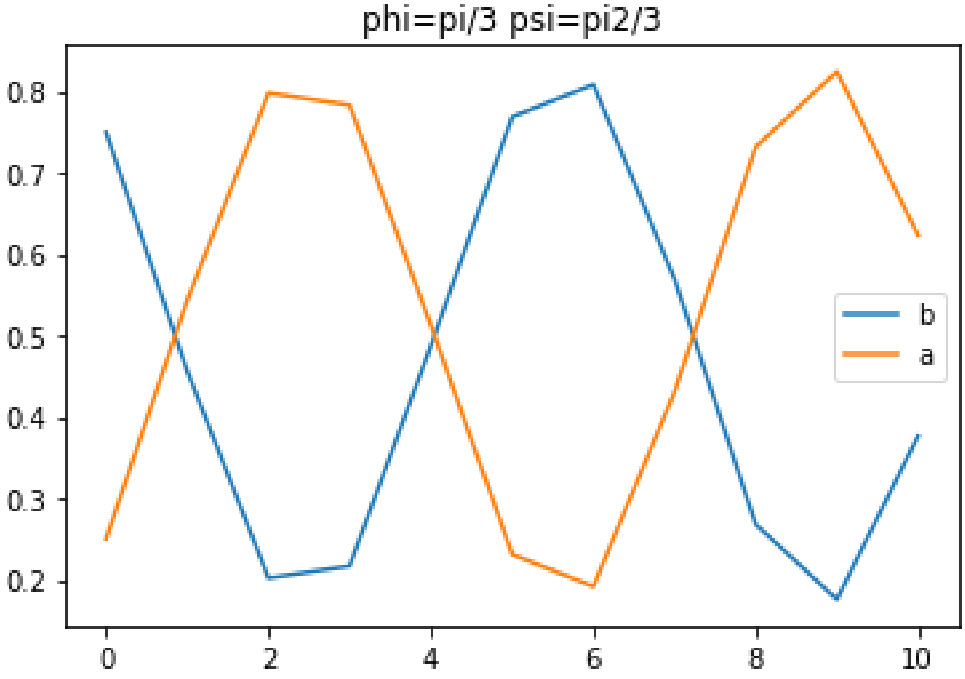
phi=pi/3 psi=pi/6
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

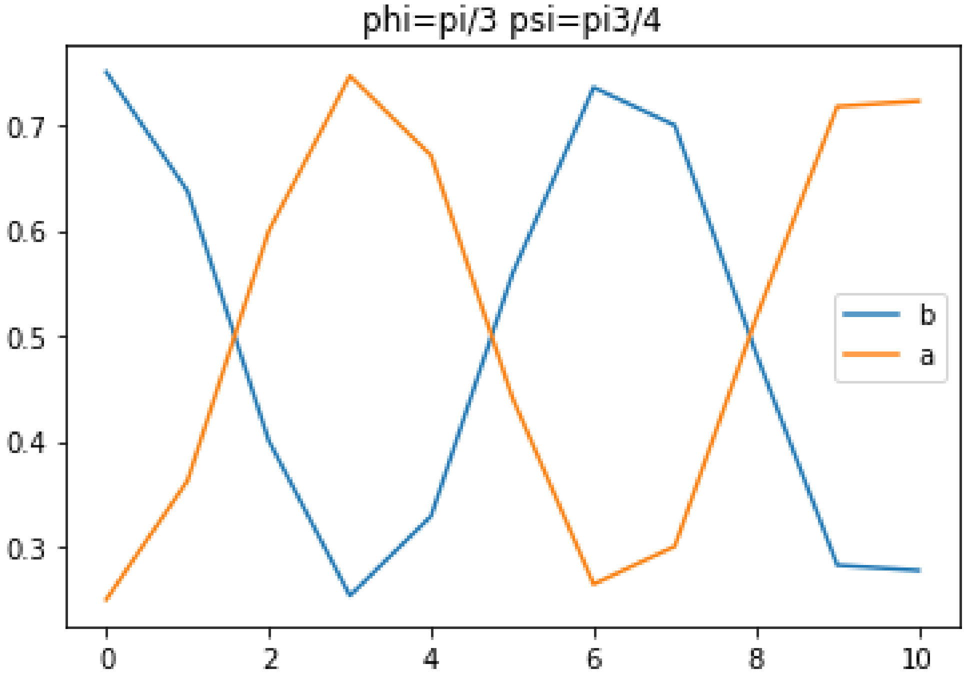


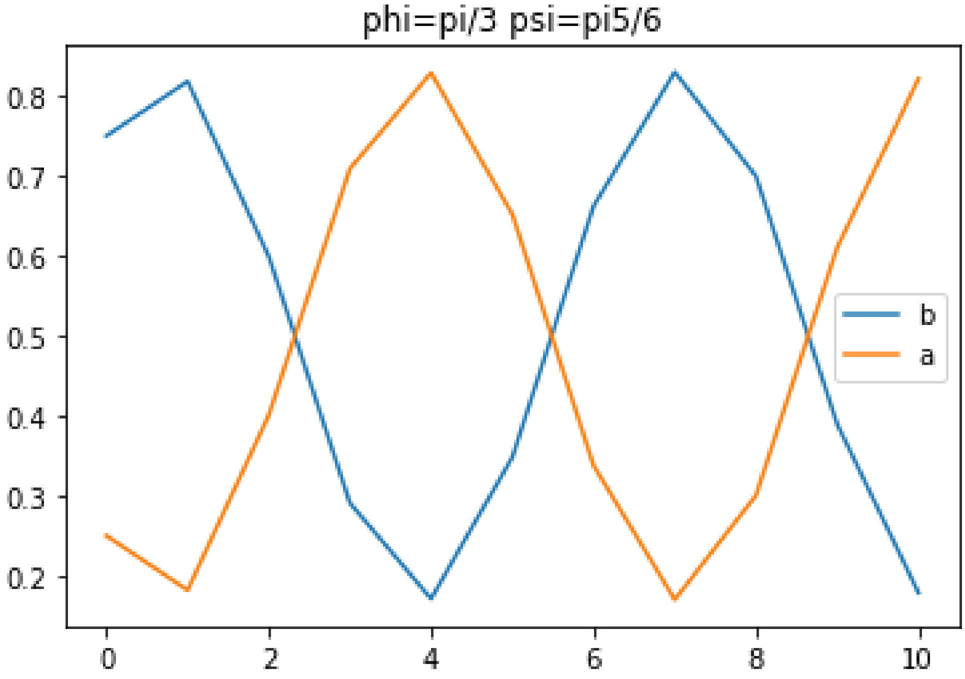
phi=pi/3 psi=pi/4
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10
b
a

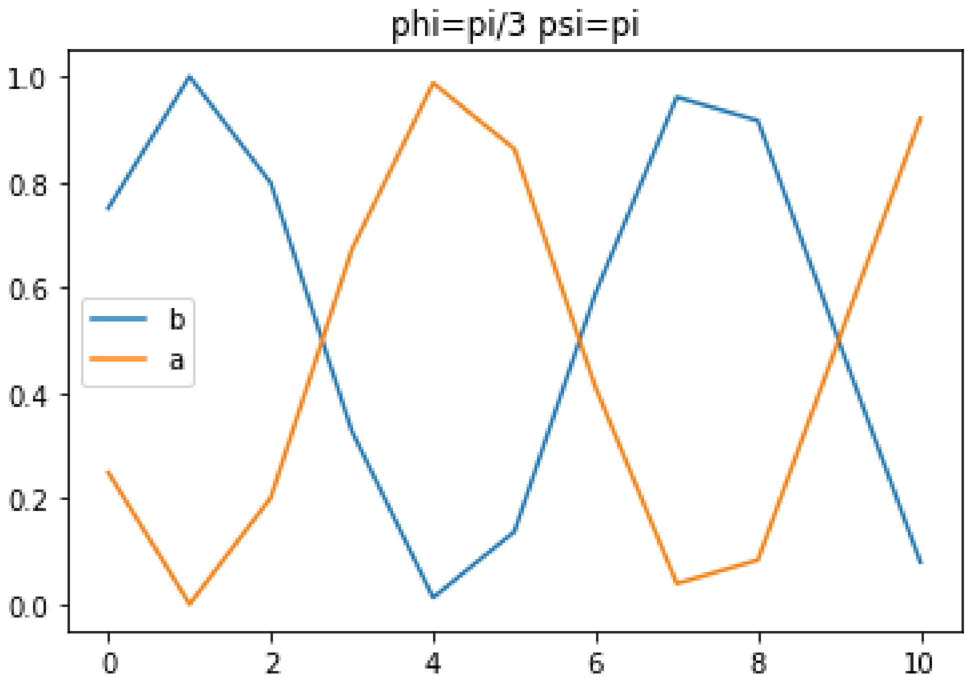

phi=pi/3 psi=pi/3
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a


phi=pi/3 psi=pi/2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

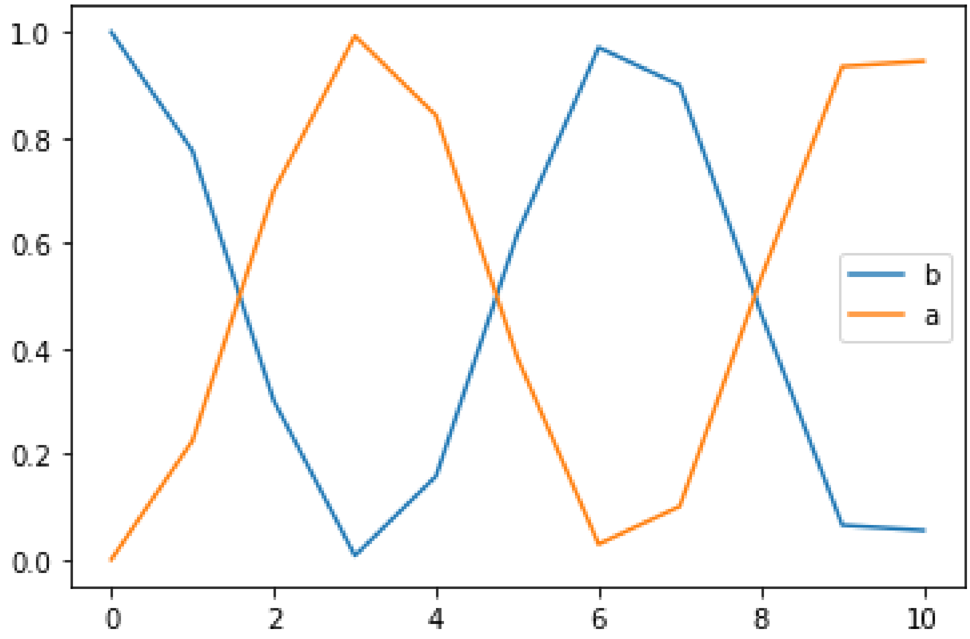

phi=pi/3 psi=pi2/3
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a


phi=pi/3 psi=pi3/4
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10
b
a

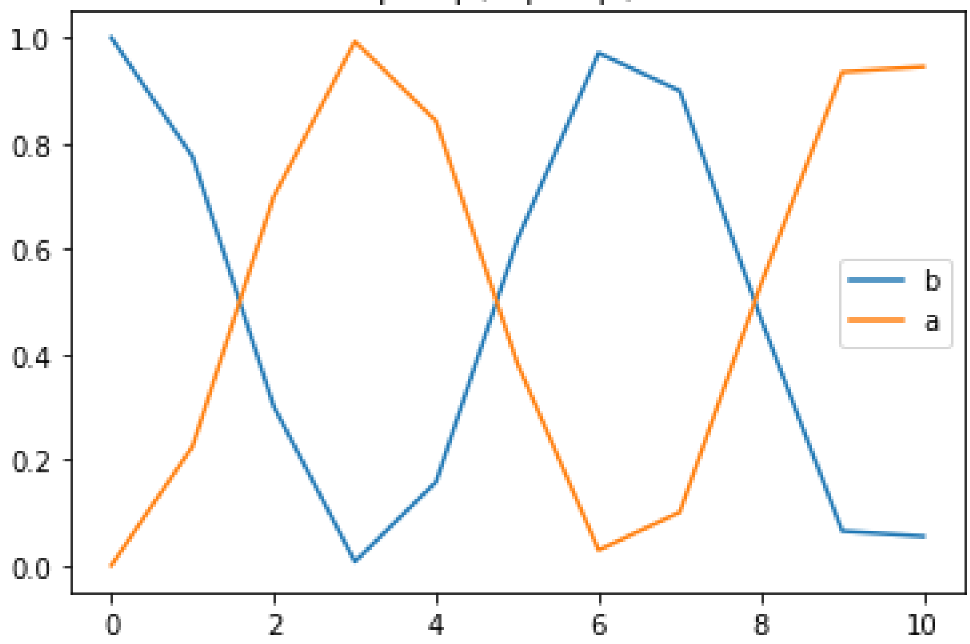

phi=pi/3 psi=pi5/6
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

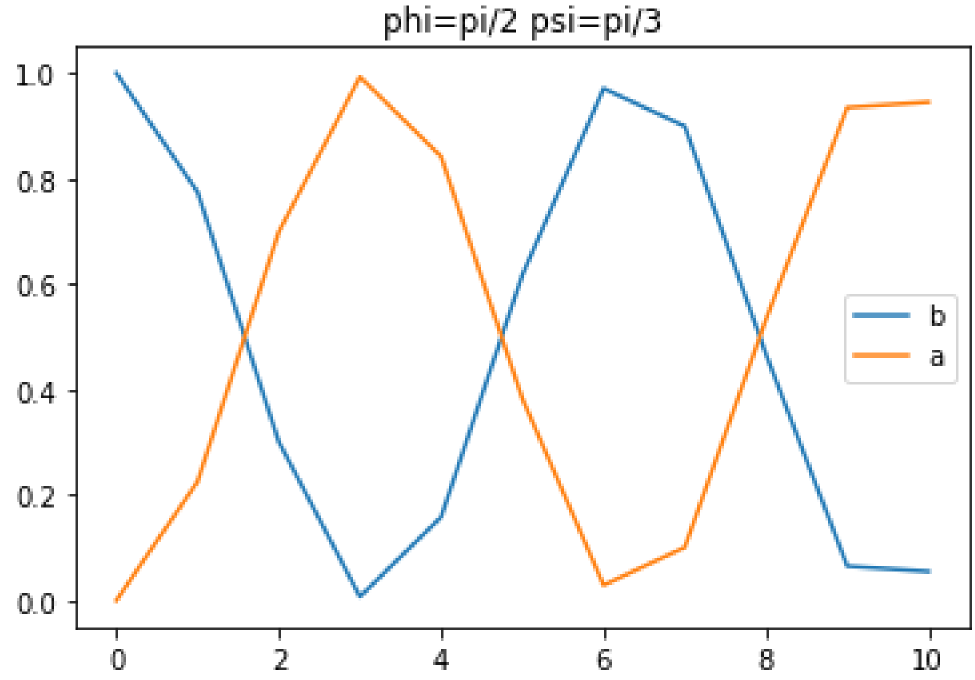

phi=pi/3 psi=pi
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

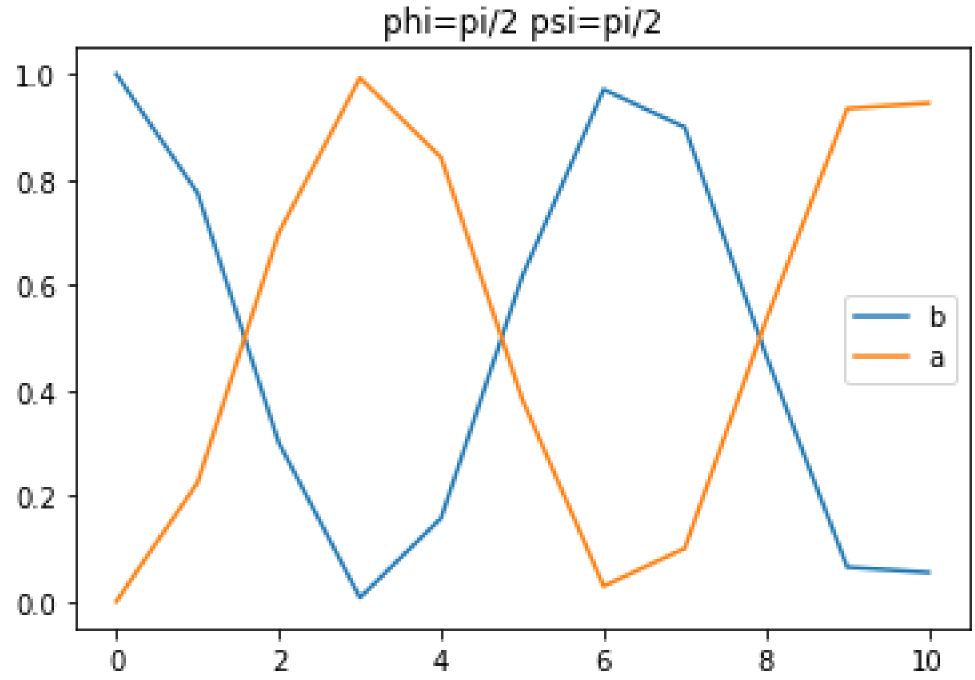
phi=pi/2 psi=pi/6

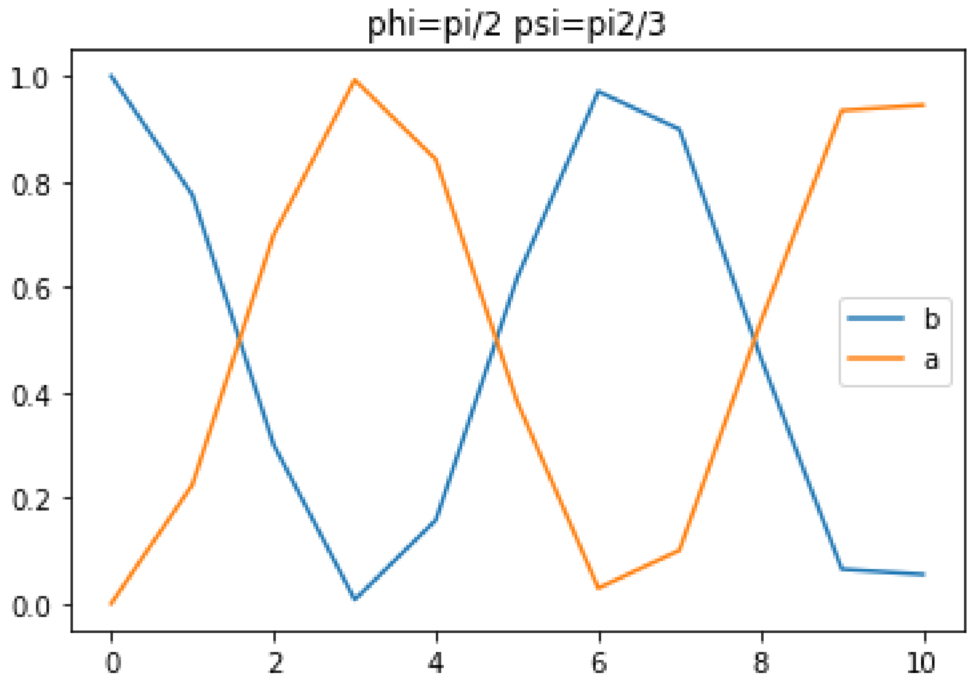


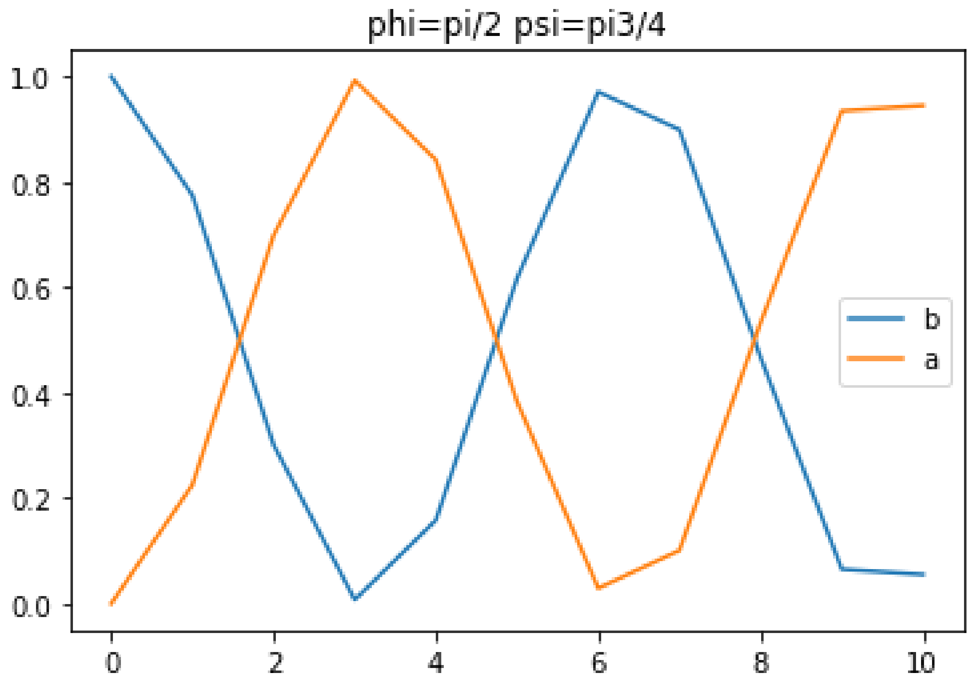
phi=pi/2 psi=pi/4

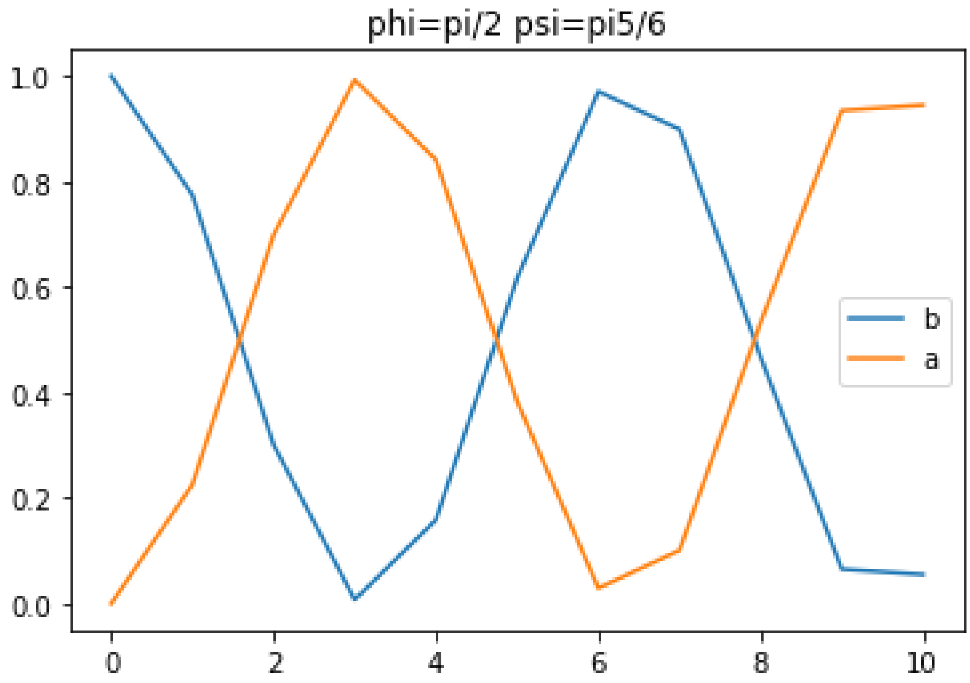


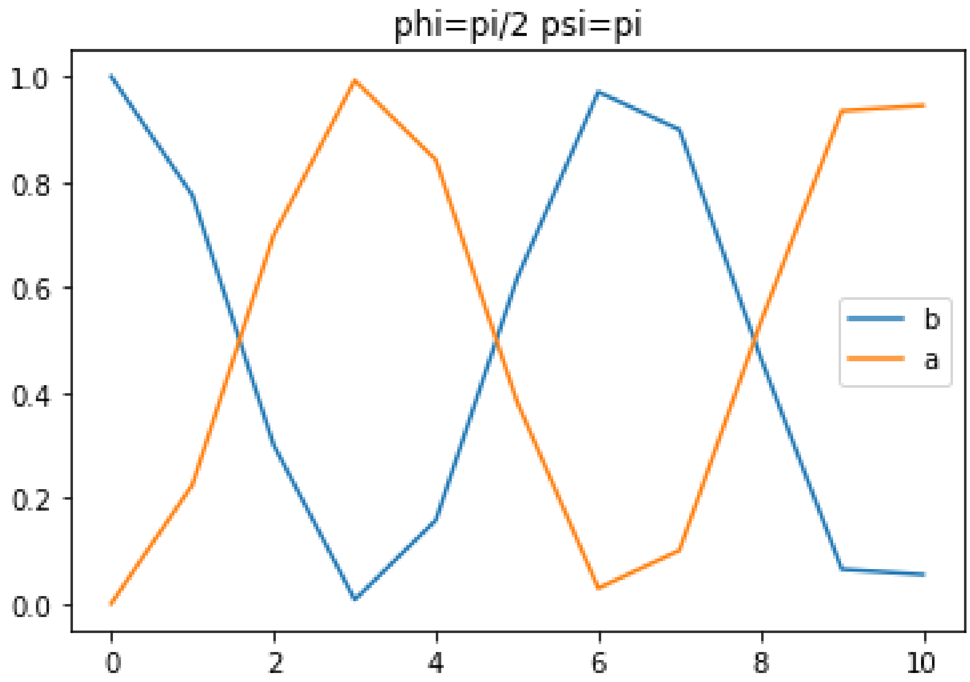

phi=pi/2 psi=pi/3
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

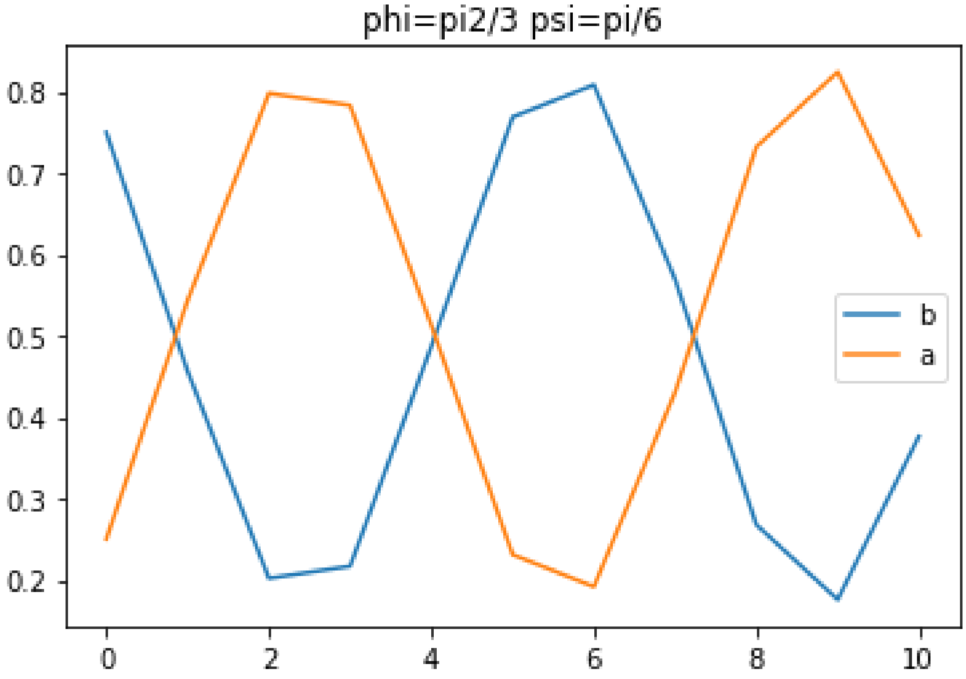

phi=pi/2 psi=pi/2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

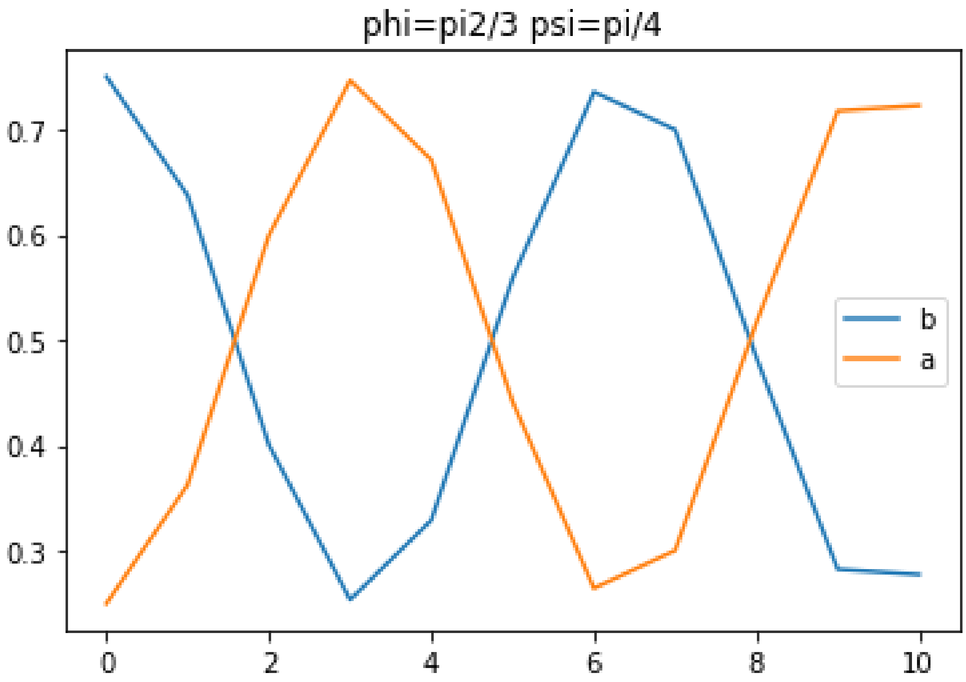

phi=pi/2 psi=pi2/3
b
a
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10

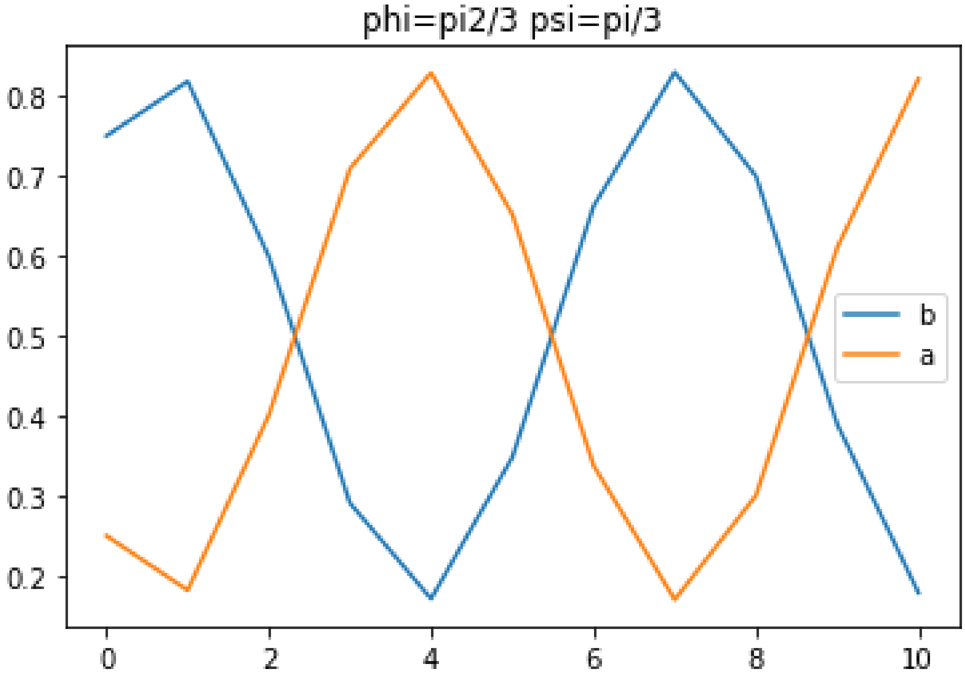

phi=pi/2 psi=pi3/4
b
a
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10

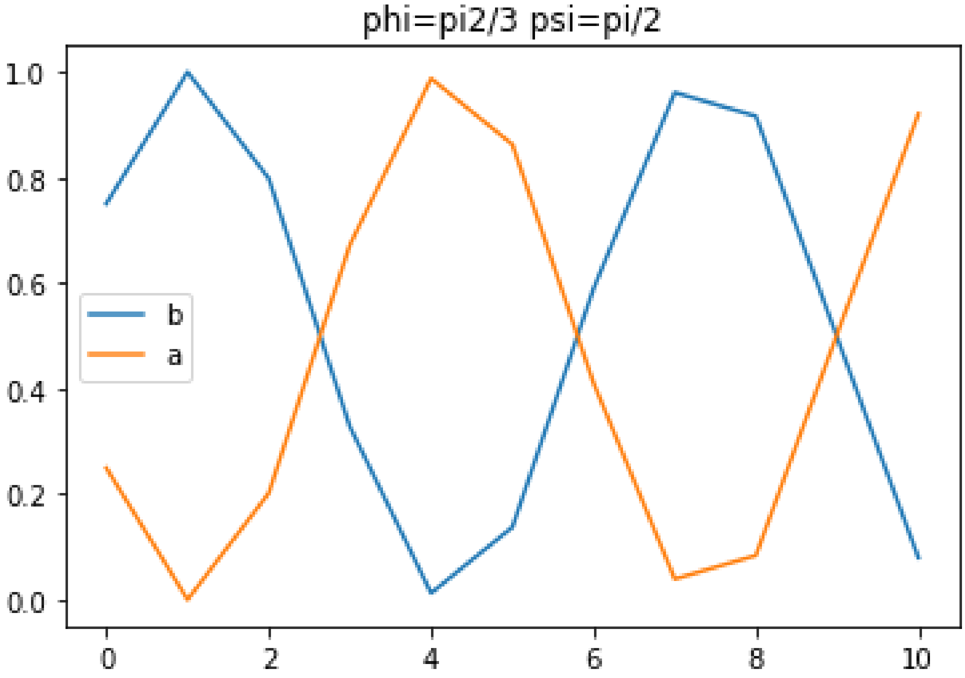

phi=pi/2 psi=pi5/6
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

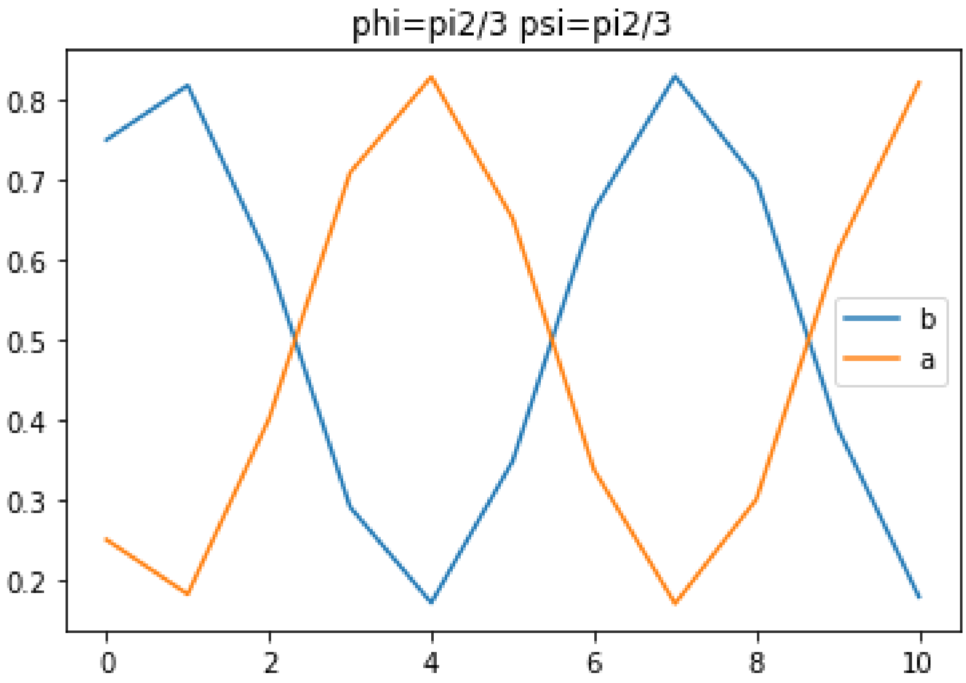

phi=pi/2 psi=pi
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

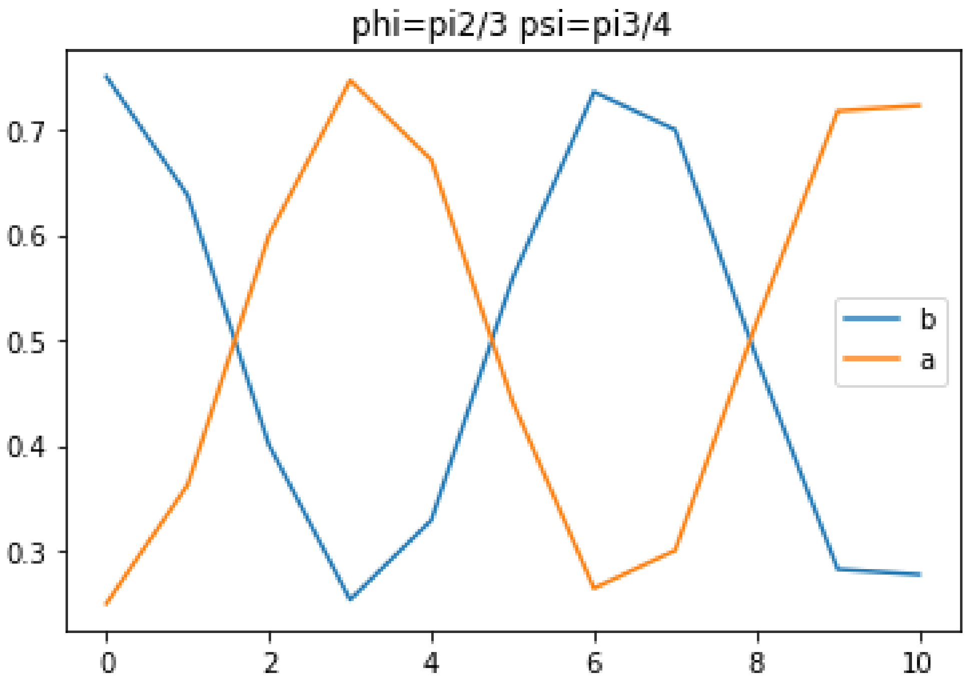

phi=pi2/3 psi=pi/6
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

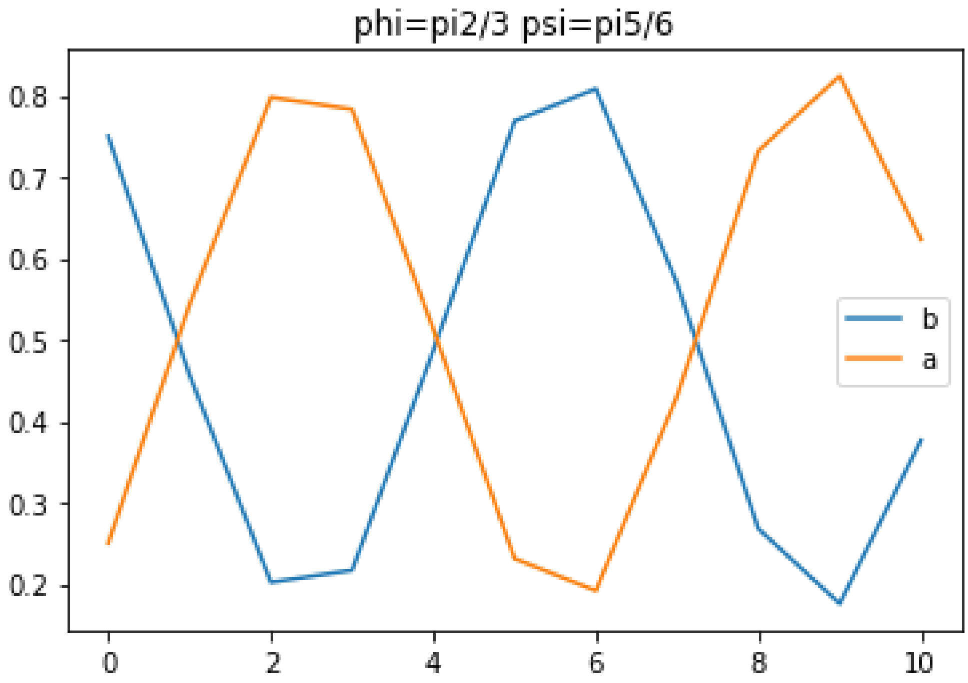

phi=pi2/3 psi=pi/4
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10
b
a

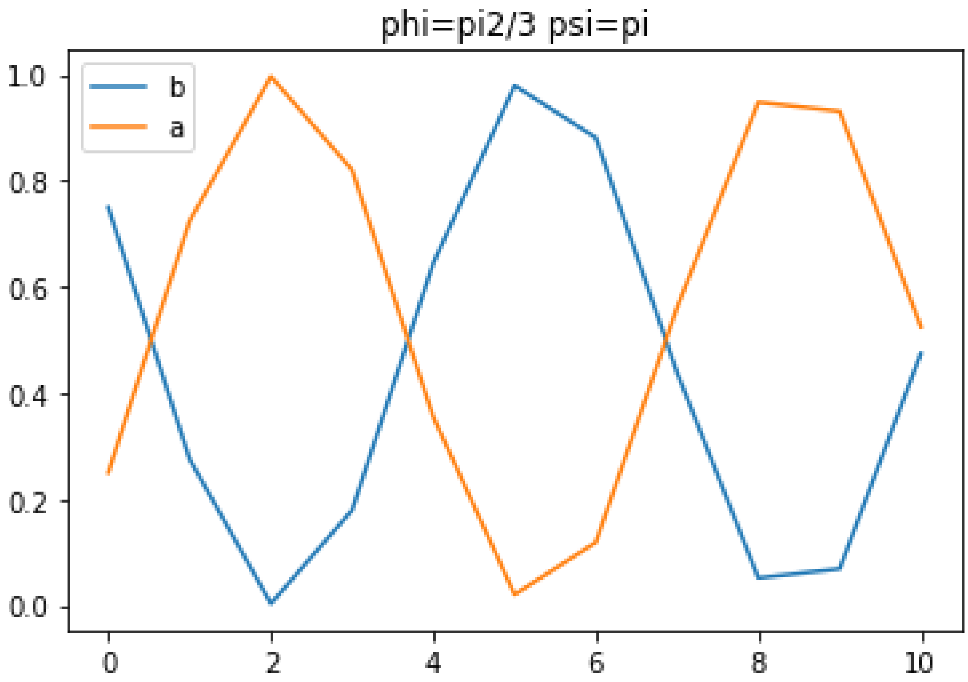

phi=pi2/3 psi=pi/3
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

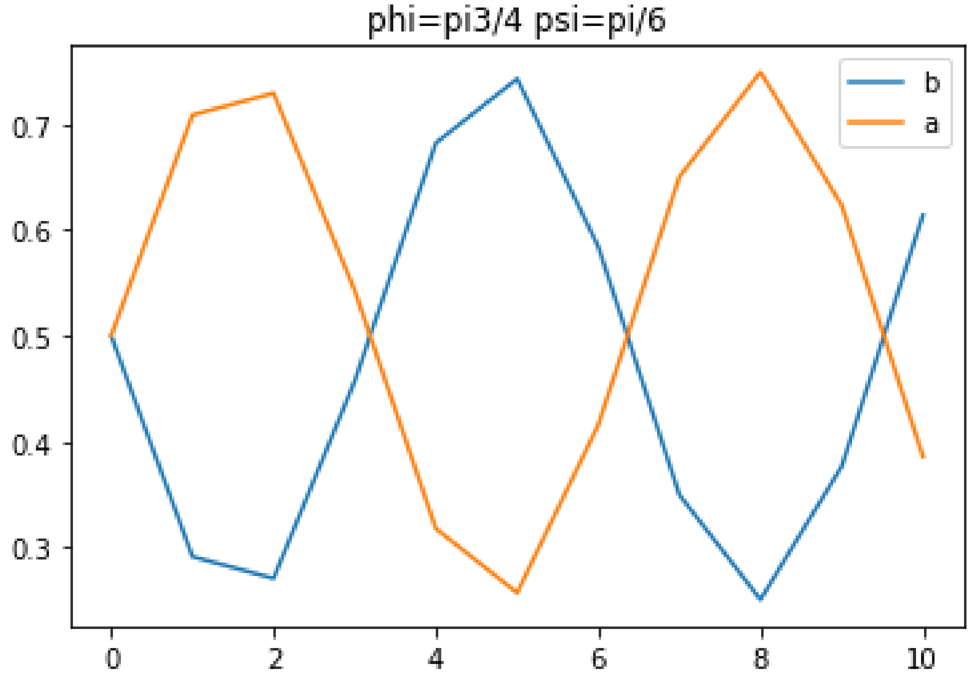

phi=pi2/3 psi=pi/2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

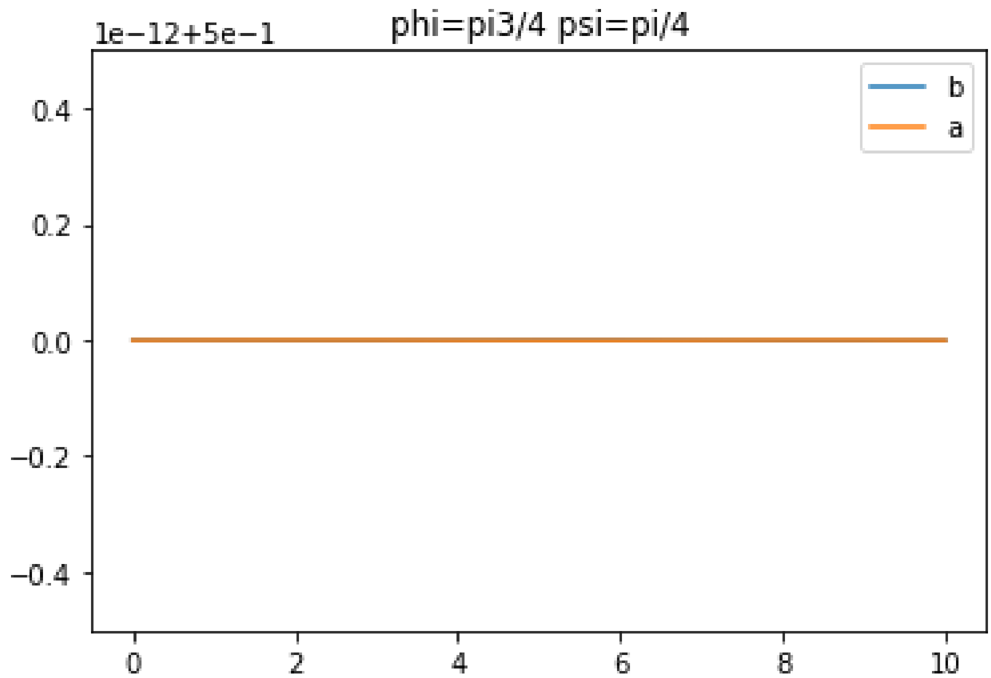

phi=pi2/3 psi=pi2/3
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

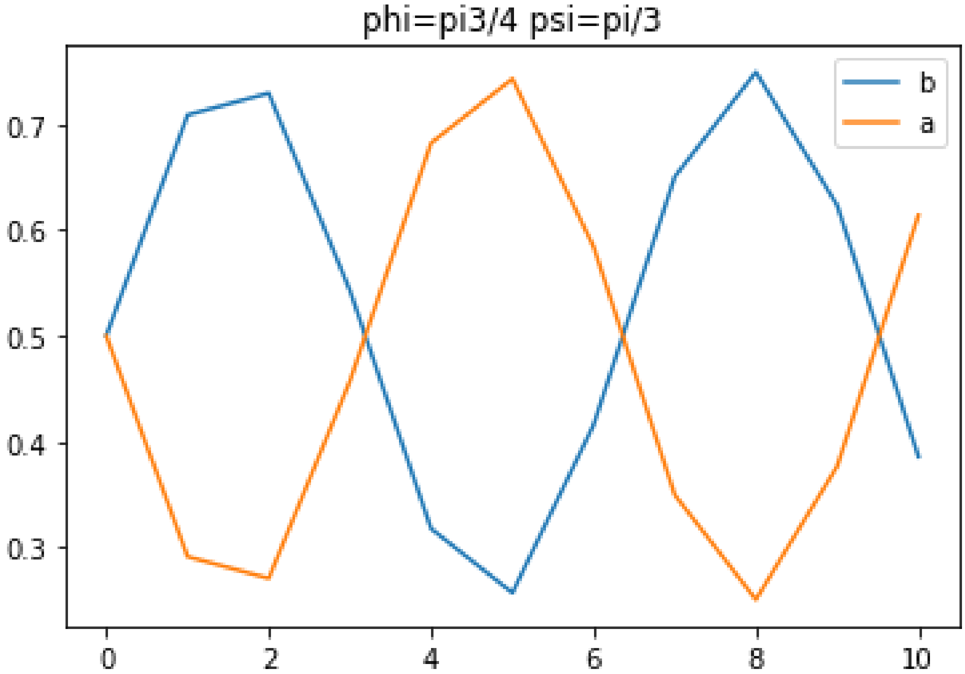

phi=pi2/3 psi=pi3/4
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10
b
a

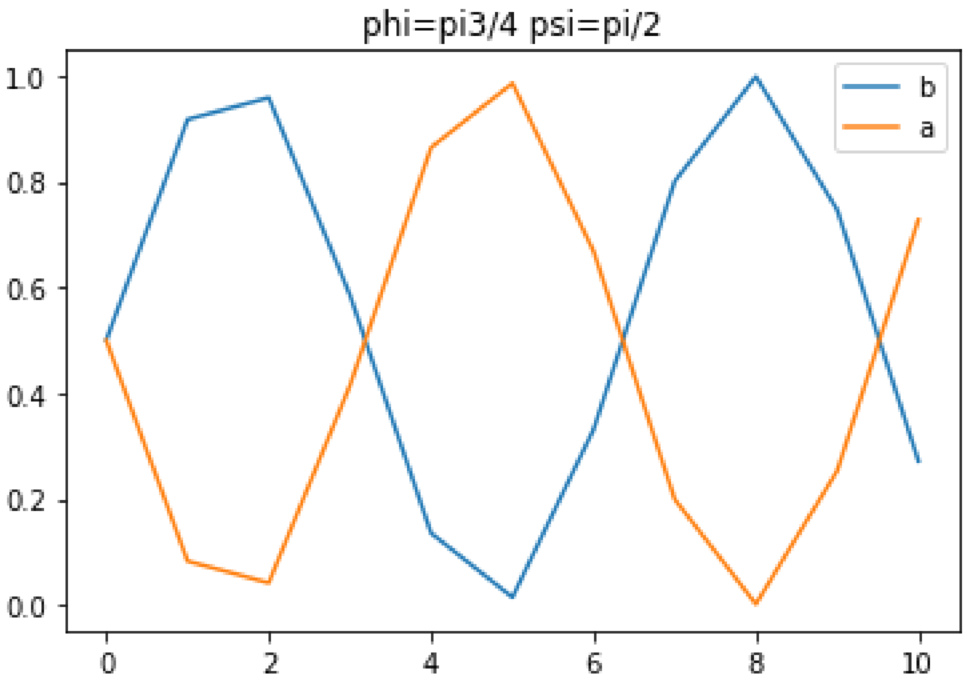

phi=pi2/3 psi=pi5/6
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

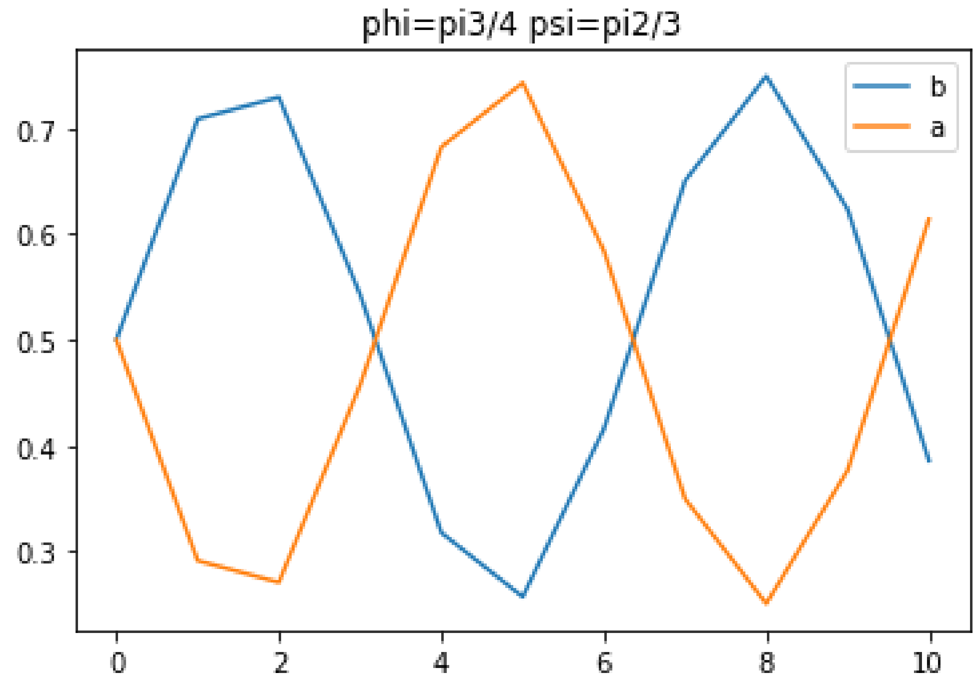

phi=pi2/3 psi=pi
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

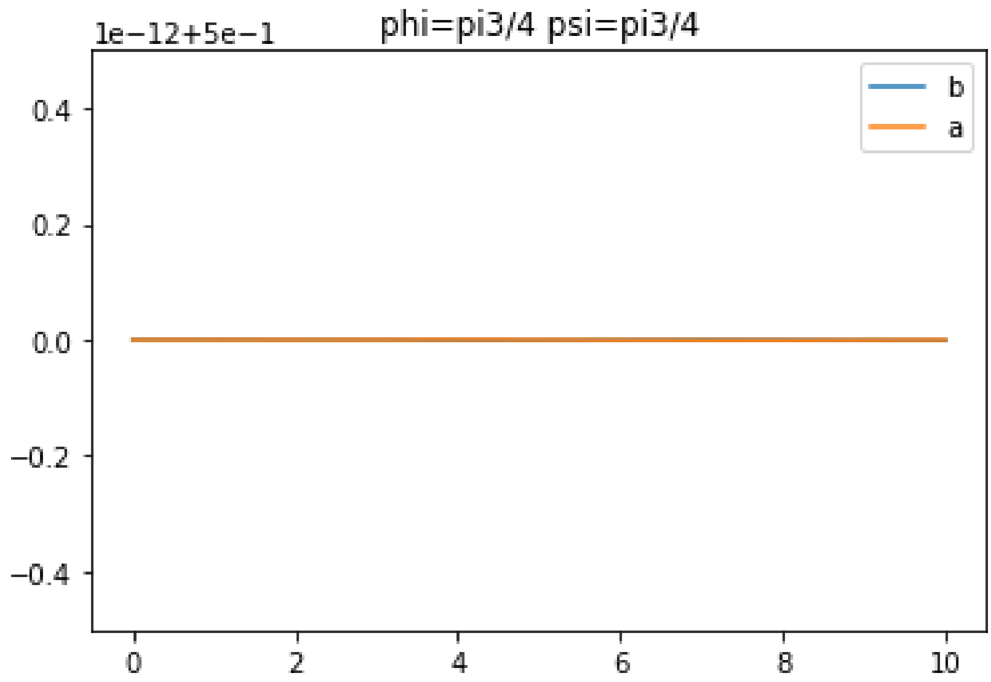

phi=pi3/4 psi=pi/6
b
a
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10

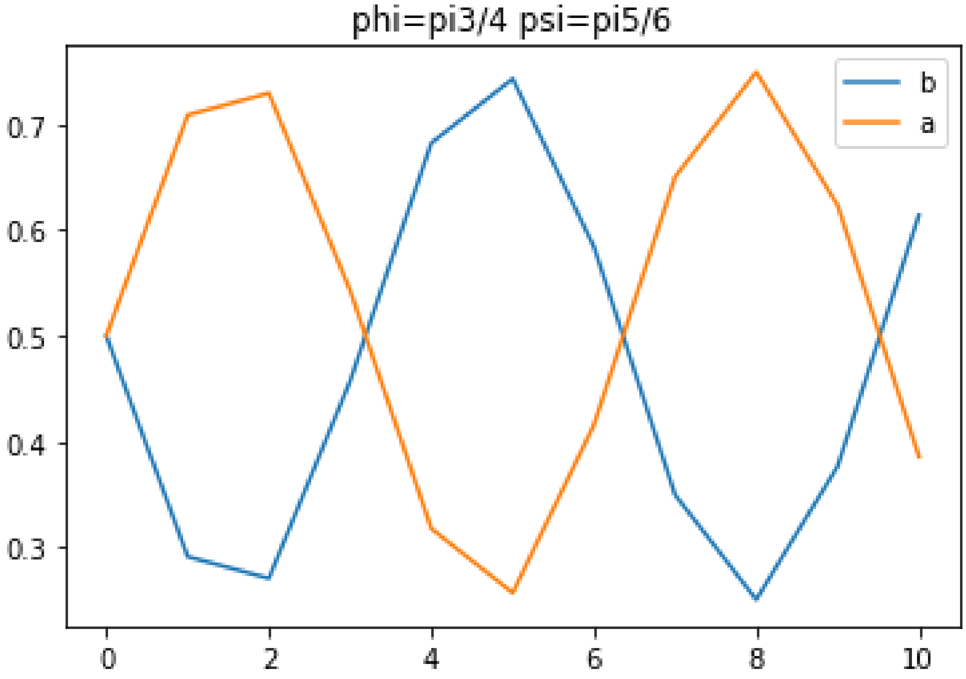

phi=pi3/4 psi=pi/4
1e−12+5e−1
b
a
0.4
0.2
0.0
−0.2
−0.4
0
2
4
6
8
10

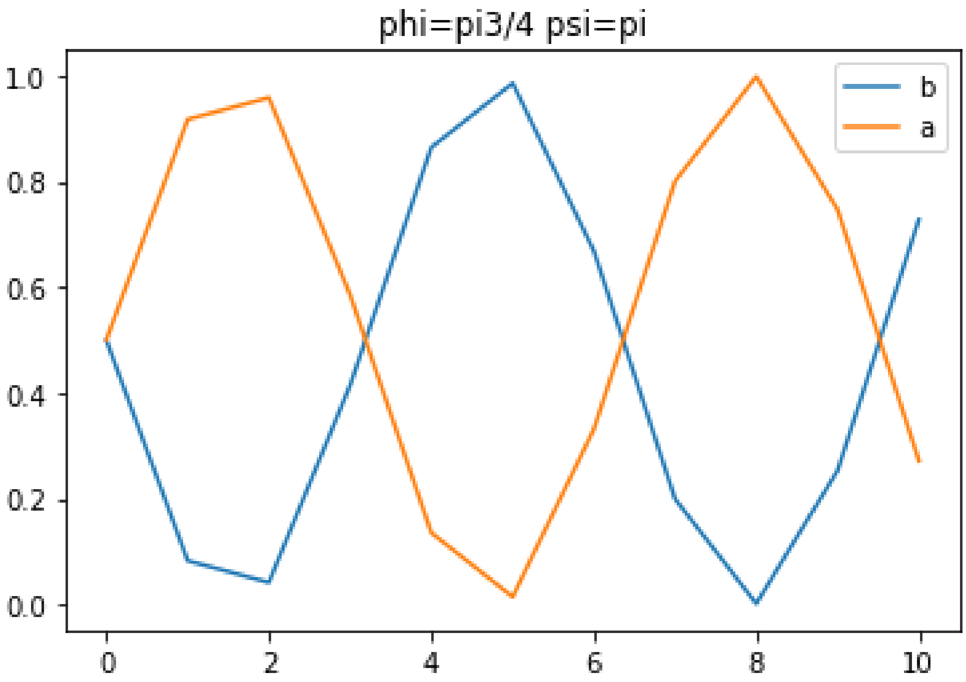

phi=pi3/4 psi=pi/3
b
a
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10

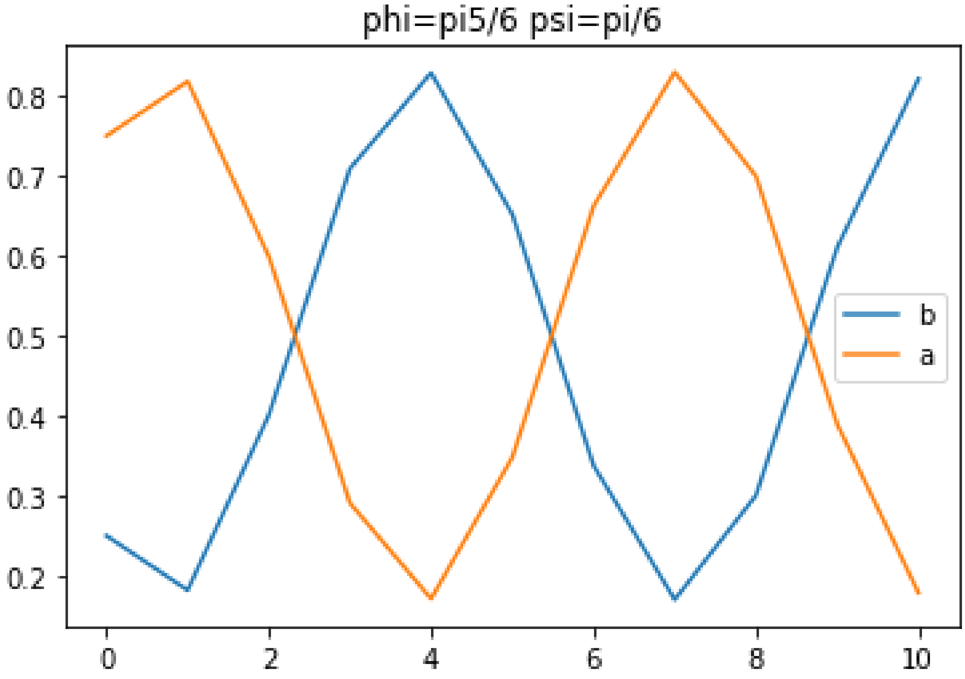

phi=pi3/4 psi=pi/2
b
a
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10

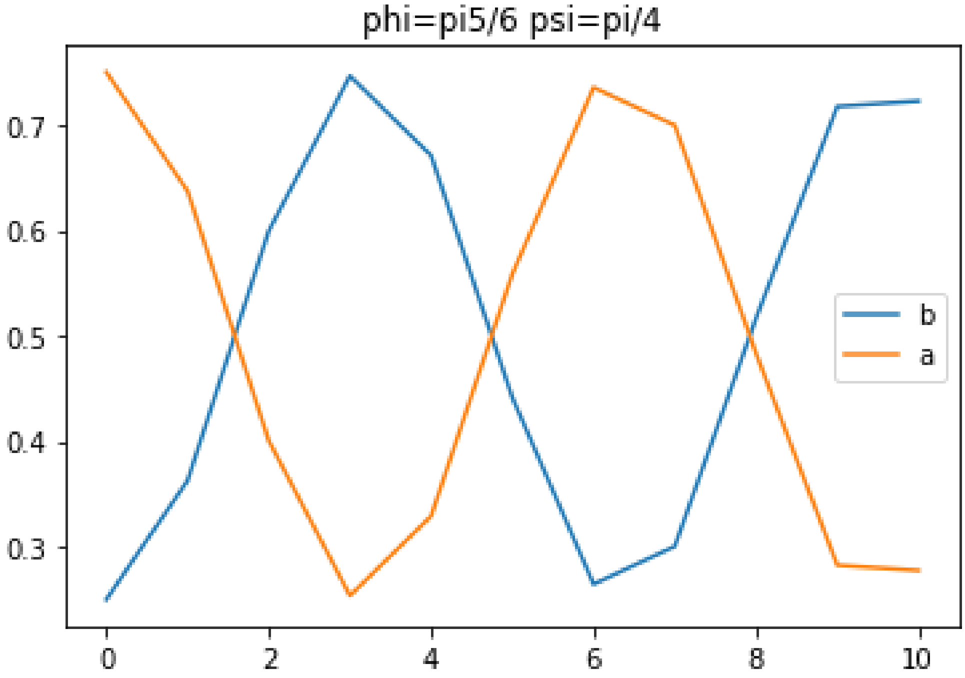

phi=pi3/4 psi=pi2/3
b
a
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10

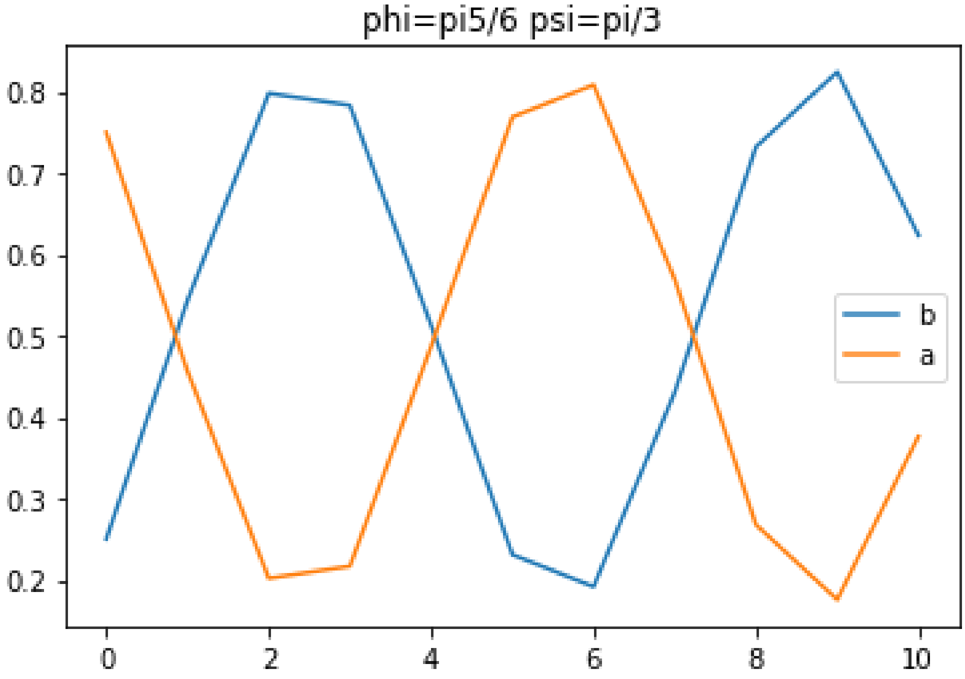

1e−12+5e−1
phi=pi3/4 psi=pi3/4
b
a
0.4
0.2
0.0
−0.2
−0.4
0
2
4
6
8
10

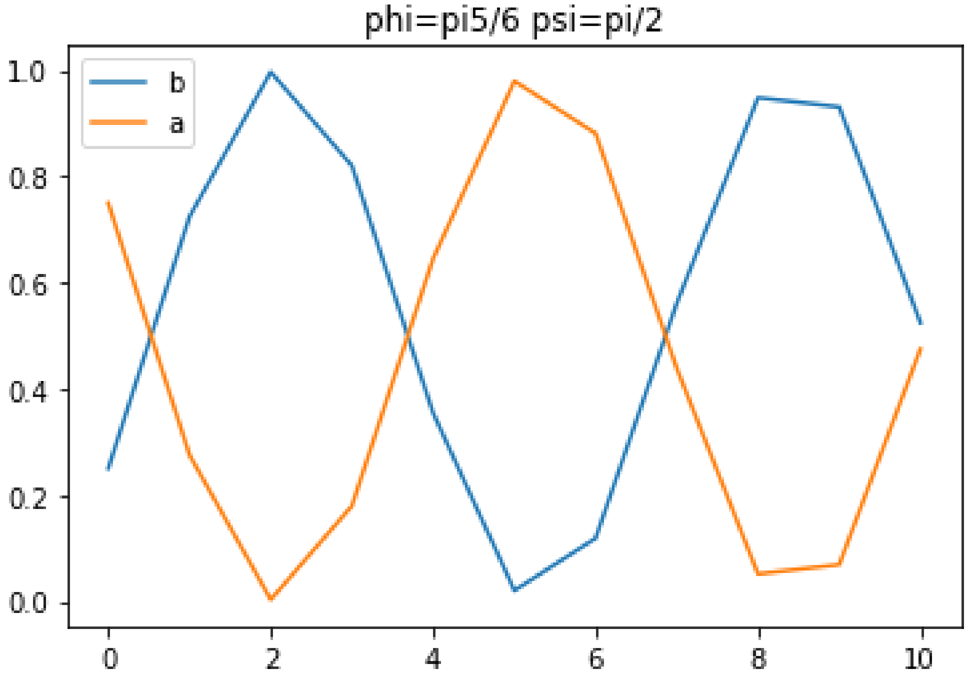

phi=pi3/4 psi=pi5/6
b
a
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10

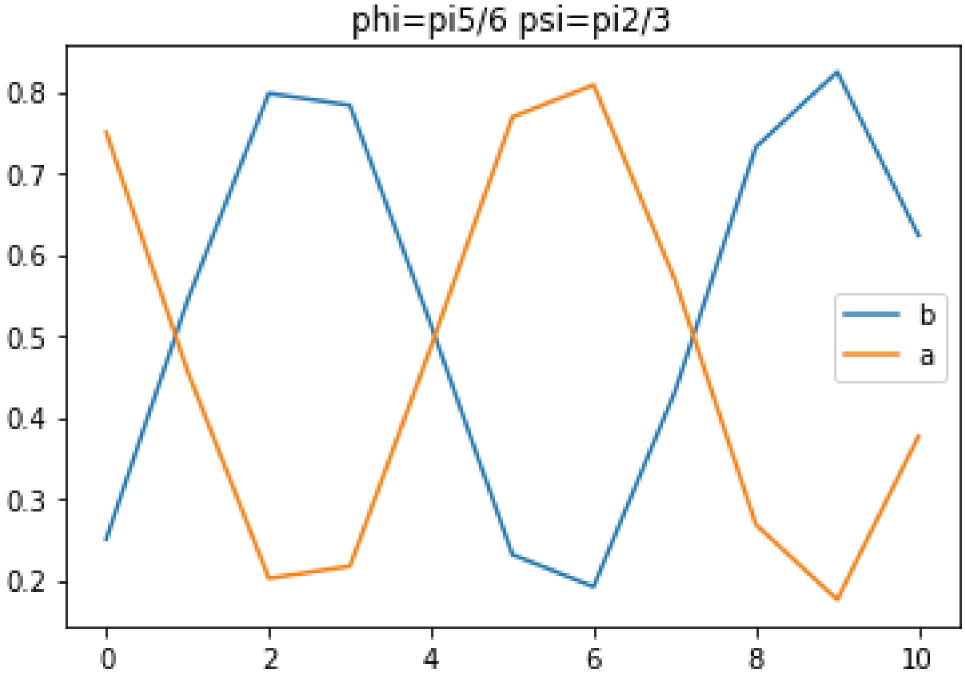

phi=pi3/4 psi=pi
b
a
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10

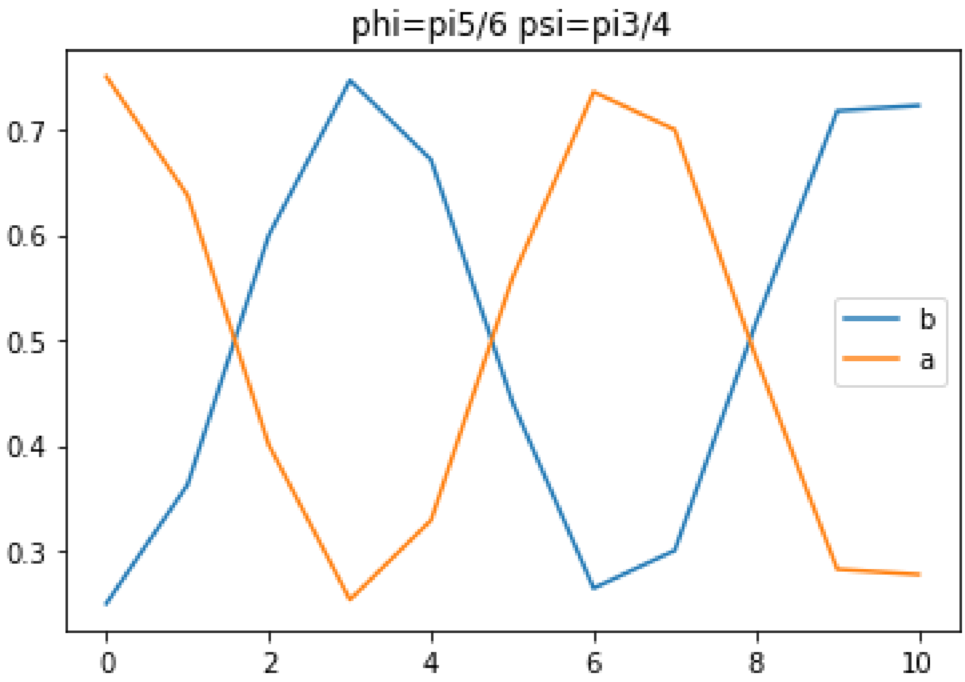

phi=pi5/6 psi=pi/6
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

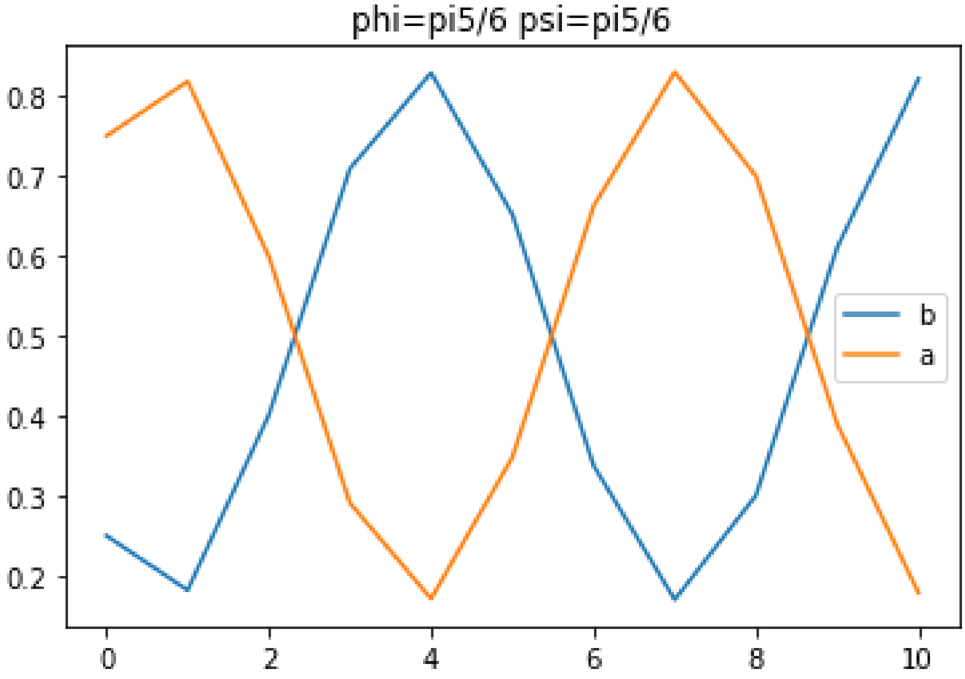

phi=pi5/6 psi=pi/4
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10
b
a

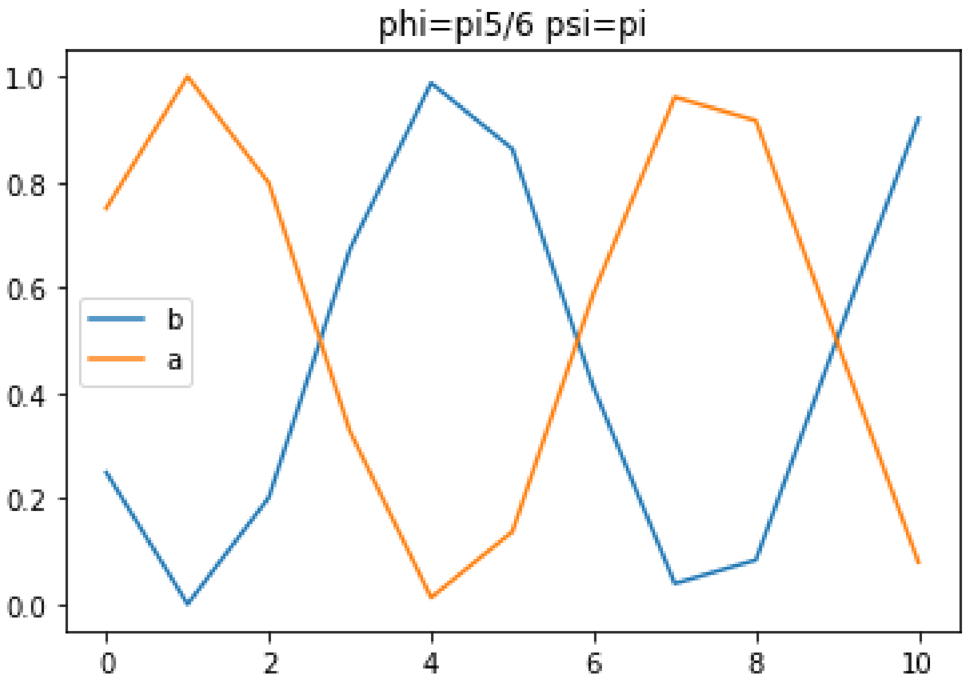

phi=pi5/6 psi=pi/3
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

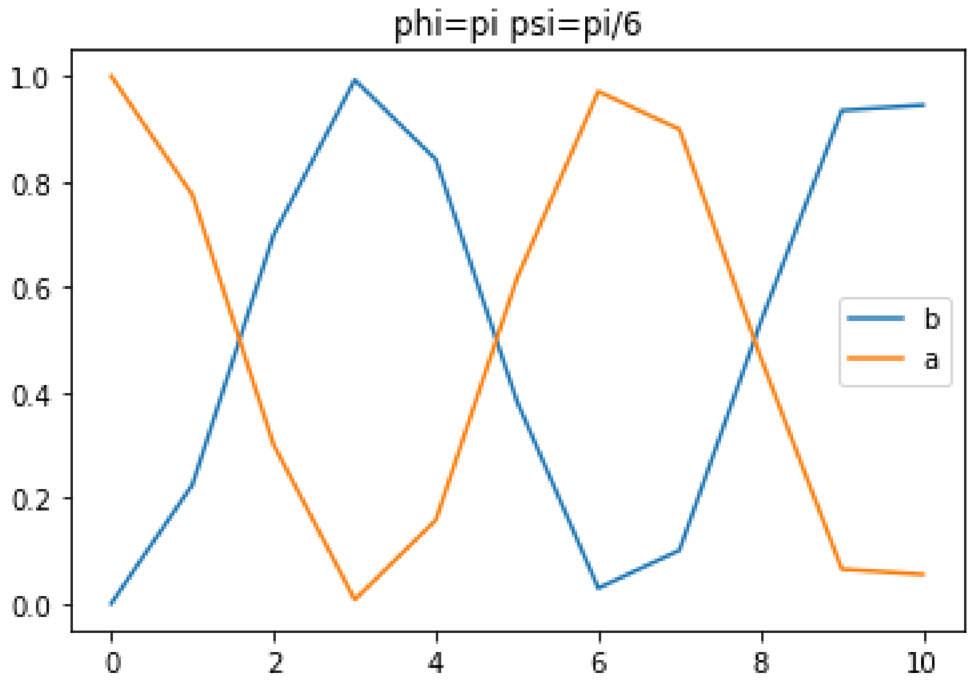

phi=pi5/6 psi=pi/2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

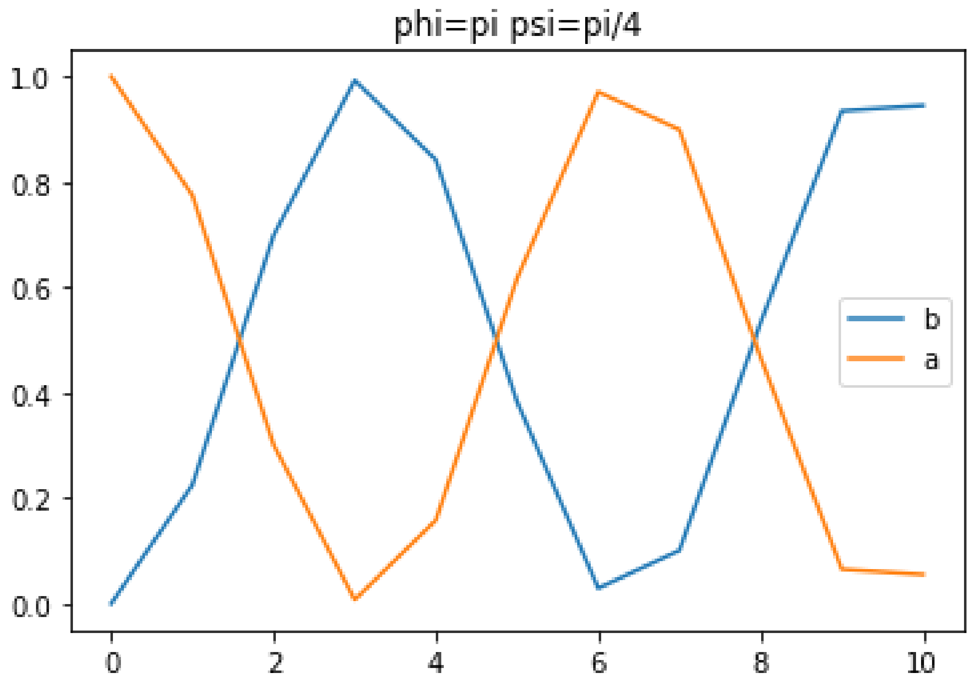

phi=pi5/6 psi=pi2/3
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10
b
a

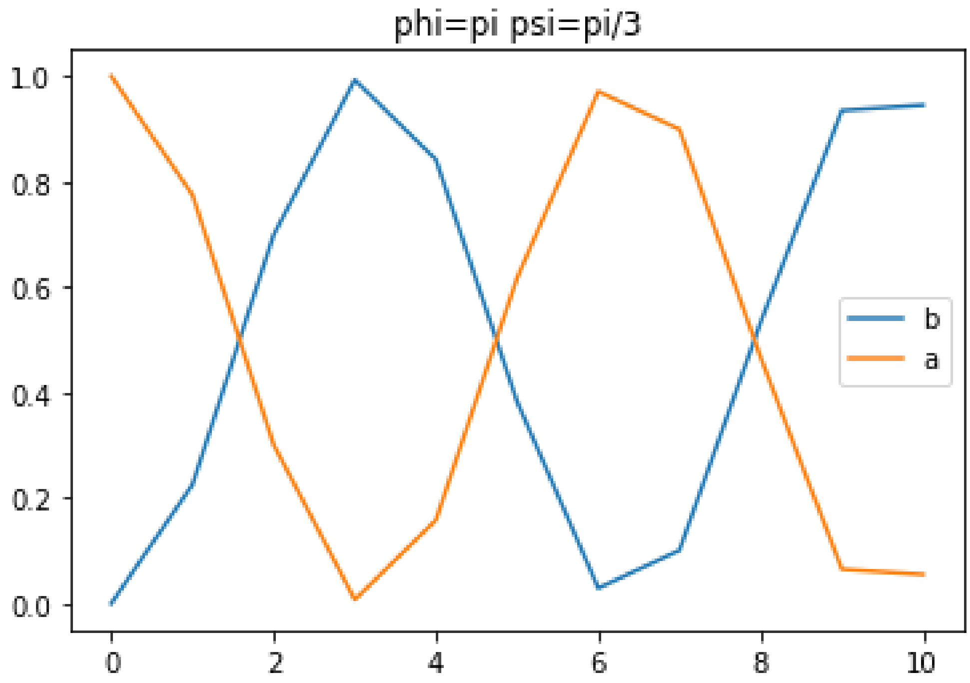

phi=pi5/6 psi=pi3/4
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0
2
4
6
8
10
b
a

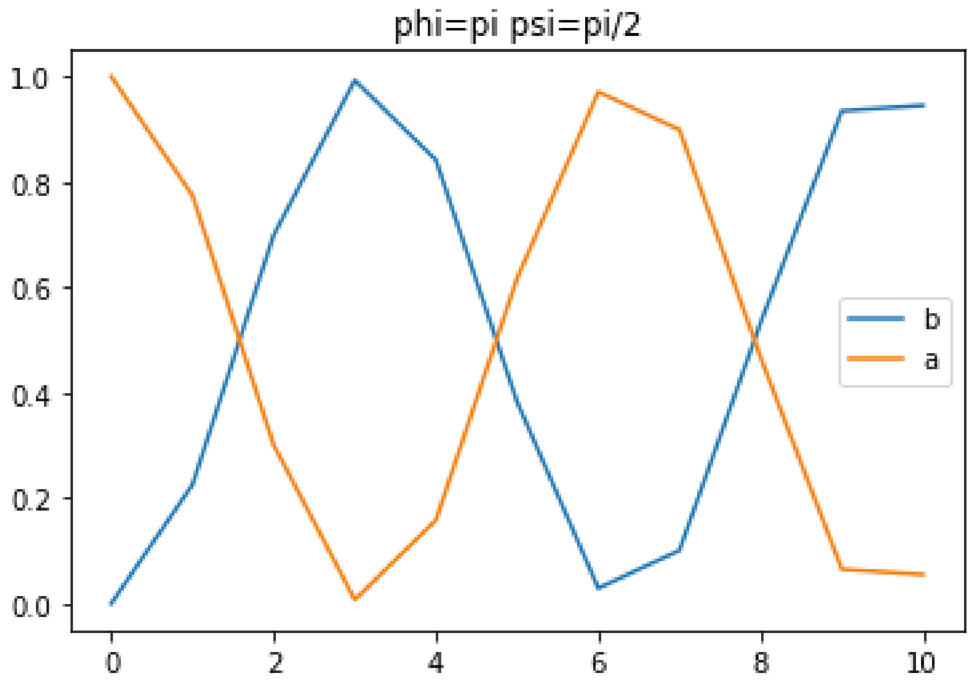

phi=pi5/6 psi=pi5/6
b
a
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0
2
4
6
8
10

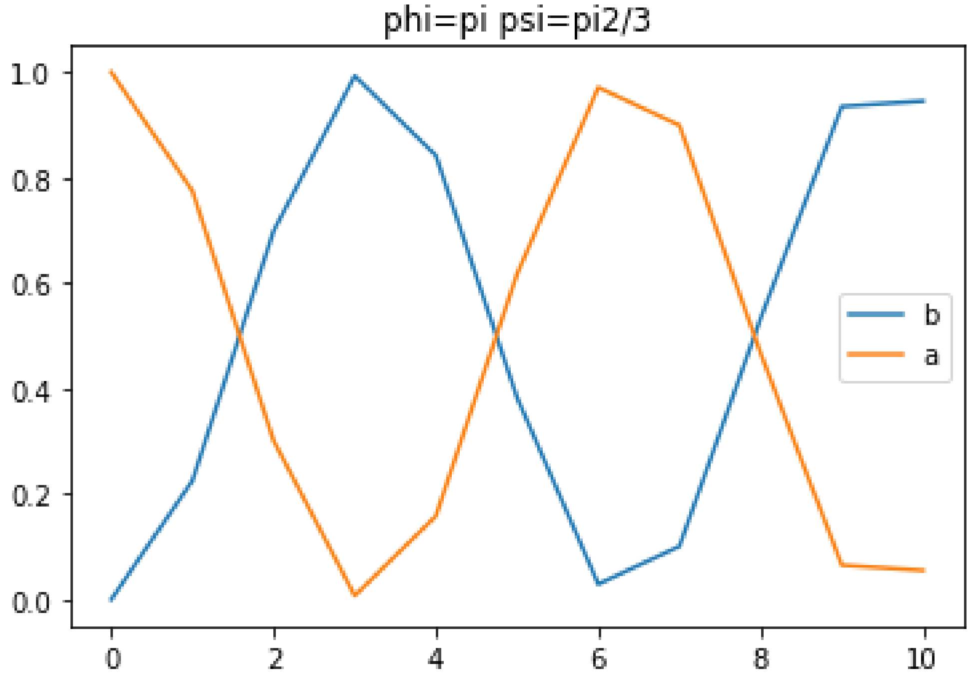

phi=pi5/6 psi=pi
b
a
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10

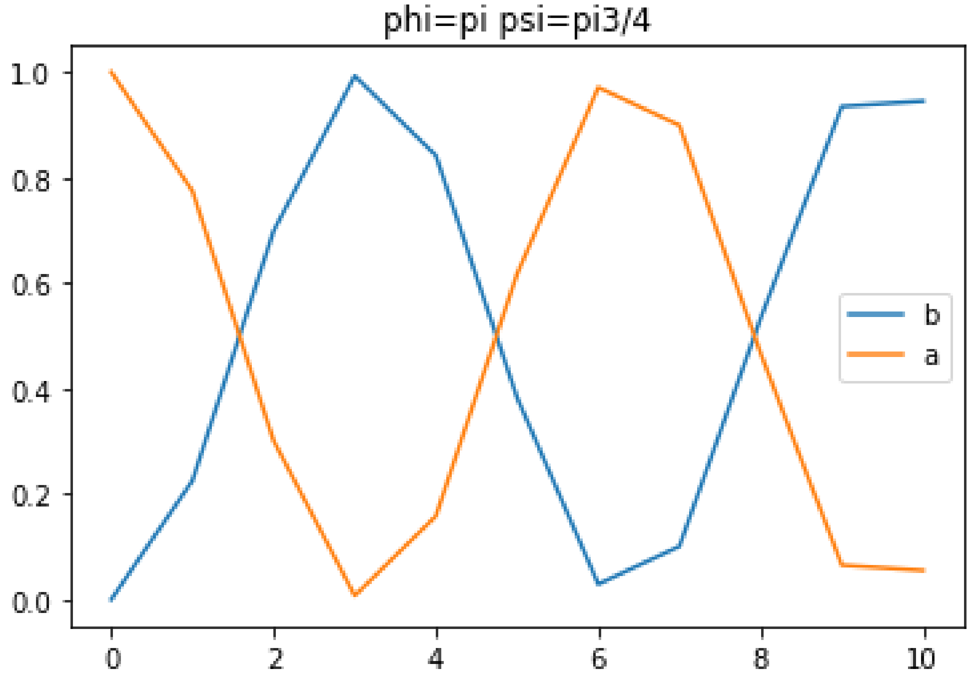

phi=pi psi=pi/6
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

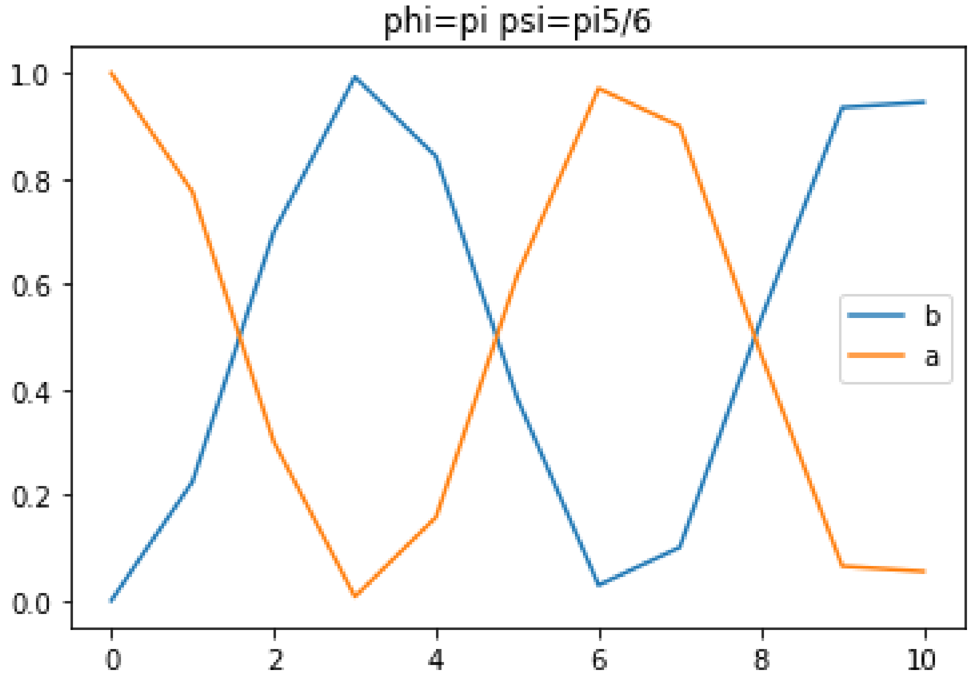

phi=pi psi=pi/4
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a

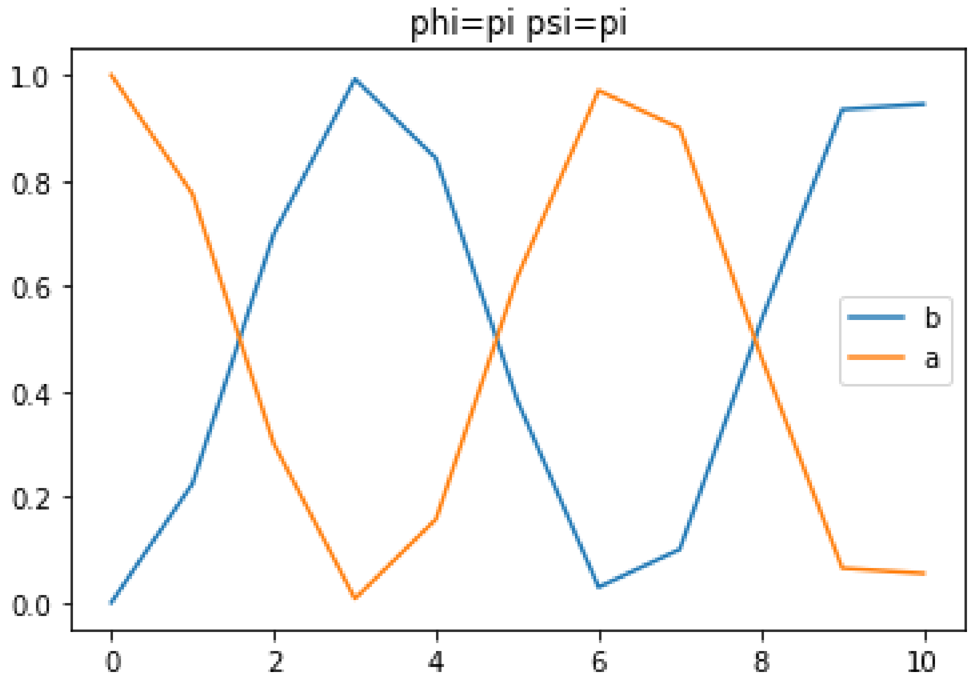

phi=pi psi=pi/3
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a


phi=pi psi=pi/2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a


phi=pi psi=pi2/3
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a


phi=pi psi=pi3/4
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2
4
6
8
10
b
a



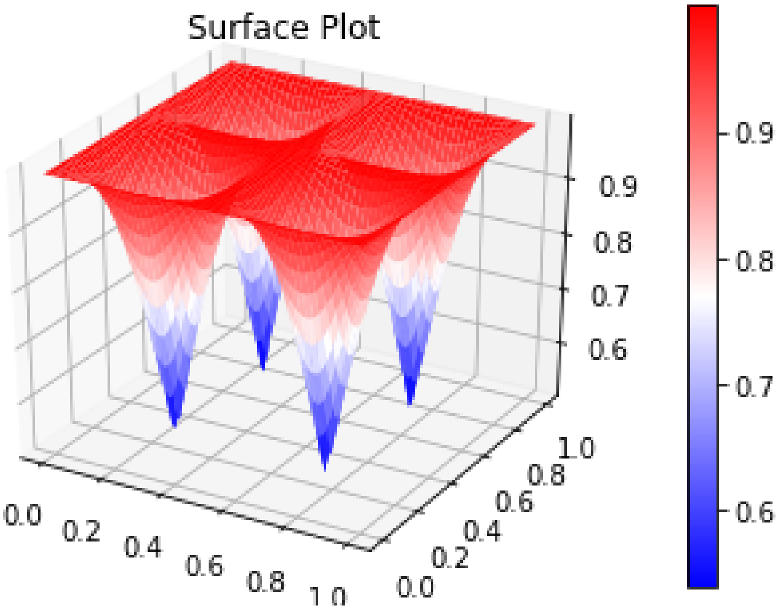


一通り確認したところ、位相差が $2\psi = \pi/2$ で、正解と不正解の係数の大きさが一致する ($|\sin\phi| = |\cos\phi|$)

とき、つまり解の個数が N/2 個のとき振動しない事がわかった。計算間違いな気もするがメモとして残しておく。

[12]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import cmath
%matplotlib inline
N = 50
K = 3
theta = 2 * np.arccos(np.sqrt(N-K) / np.sqrt(N))

def culc_amps(theta, phi, psi):
    a = cmath.rect(np.cos(phi), psi)
    b = cmath.rect(np.sin(phi), -psi)
    a_r_list = [abs(a)**2]
    b_r_list = [abs(b)**2]
    for _ in range(100):
        new_a = a * np.cos(theta) - b * np.sin(theta)
        new_b = a * np.sin(theta) + b * np.cos(theta)
        a_r_list.append(abs(new_a)**2)
        b_r_list.append(abs(new_b)**2)
        a = new_a
        b = new_b
    return np.array(a_r_list), np.array(b_r_list)
N = 100
phis = np.linspace(0, 1, N)
psis = np.linspace(0, 1, N)
Phis, Psis = np.meshgrid(phis, psis)
X = np.c_[np.ravel(Phis), np.ravel(Psis)]
Y_plot = []
for phi, psi in X:
    a_list, b_list = culc_amps(theta, phi*np.pi, psi*np.pi)
    Y_plot.append(b_list.max())
Y_plot = np.array(Y_plot)
Y_plot = Y_plot.reshape(Phis.shape)

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
```

```
surf = ax.plot_surface(Phis, Psis, Y_plot, cmap='bwr', linewidth=0)
fig.colorbar(surf)
ax.set_title("Surface Plot")
fig.show()
```



ϕ, ψ について変化させ、b の係数の絶対値の最大値をプロットしたところ、特定の位相で最大値が 0.5 までしか増幅しない点があり、付近では 1 にならないことがわかった。$\phi = 0$ 付近（$N \to \infty$）または $\psi = 0$（初期の係数が実数）のときは問題ない。