

계산과학2 (1)

노현민-김태원 조

2023년 9월 8일

차 례

차 례	1
제 1 장 HHL	2
1.1 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$	2
1.2 양자상태 표현과 브라-켓 표기	2
1.3 해밀토니언 시뮬레이션: 오일러 공식, 위상 인자, 유니타리	3
1.4 위상 추정 알고리즘: 유니타리 행렬의 고윳값	4
1.5 조건수 \mathbf{k} 와 HHL의 로그시간 성능	5
1.6 HHL의 결정적인 가정들과 “양자”기계학습의 기초	5

제 1 장

HHL

1.1 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$

$N \times N$ 에르미트Hermitian 행렬 A 와 벡터 \mathbf{b} 가 있다. 여기서 에르미트 행렬이란 켤레전치conjugate transpose가 자기 자신과 같은 복소정방행렬complex square matrix을 뜻한다. 이에 연립일차방정식을 \mathbf{x} 에 대해 푼다. 다시 말해 아래 식에서 \mathbf{x} 를 구한다.

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

이를테면 아래 연립일차방정식에서 \mathbf{x} 는 (b_1, b_2, b_3) 이다. 보통 기초선형대수학 수업에서는 대각화와 가우스-조르단 소거법을 사용해 푼다.

$$\begin{aligned} \begin{aligned} 1x_1 + 0x_2 + 0x_3 &= b_1 \\ 0x_1 + 1x_2 + 0x_3 &= b_2 \\ 0x_1 + 0x_2 + 1x_3 &= b_3 \end{aligned} &\longrightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} x_1 + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} x_2 + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} x_3 = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} \\ &\longrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} \longrightarrow A\mathbf{x} = \mathbf{b} \end{aligned}$$

1.2 양자상태 표현과 브라-켓 표기

\mathbf{b} 를 아래와 같은 양자상태로 나타낸다.

$$|\mathbf{b}\rangle = \sum_{i=1}^N b_i |i\rangle$$

앞선 예시로 켓ket 표기 ‘ $|\cdot\rangle$ ’를 도입하면 아래와 같다.

$$|\mathbf{b}\rangle = \sum_{i=1}^{N=3} b_i |i\rangle = b_1 |1\rangle + b_2 |2\rangle + b_3 |3\rangle = b_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + b_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + b_3 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

1.3 해밀토니언 시뮬레이션: 오일러 공식, 위상 인자, 유니타리

여기에 **해밀토니언 시뮬레이션** *Hamiltonian simulation*이라는 기법을 적용한다.

해밀토니언 시뮬레이션

해밀토니언 시뮬레이션이란 양자정보학의 기초 문제 가운데 하나로, 양자계 *quantum systems*의 시뮬레이션에 요구되는 계산복잡도와 알고리즘을 묻는다. 다시 말해 양자계의 (시간의 흐름에 따른) 진화 혹은 변화 *evolution*를 구현하는 알고리즘을 구하는 문제다. 파인만 *Richard Feynman*이 해밀토니언의 고전적 시뮬레이션은 계의 상태에 따른 지수적인 *exponential* 감속을 요구하니 아무래도 양자컴퓨터 같은 게 필요하지 않겠냐며 1982년 고안한 문제다.

여기서 해밀토니언 H 란 수학적으로 말하면 큐비트의 개수 n 에 대한 $2^n \times 2^n$ 에르미트 행렬이고, 물리학적으로 말하면 계의 총 에너지에 대응하는 연산자다. 시간 t 에 따른 해밀토니언 H 의 이상적인 변화를 e^{-iHt} 로 나타낸다.

오일러 공식 $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$

복소평면, 다시 말해 x 좌표가 복소수 z 의 실수부분($\text{Re}(z)$)을 나타내고 y 좌표가 z 의 허수부분($\text{Im}(z)$)인 좌표평면상에서 모든 복소수 z 를 아래처럼 나타낼 수 있다.

$$z = re^{i\theta} = r(\cos \theta + i \sin \theta)$$

대충 말해 복소평면상의 한 단위를 θ 만큼 돌리고 r 만큼 늘리면 모든 z 를 나타낼 수 있고 이런 z 가 평면상에서는 $\cos \theta + i \sin \theta$ 를 r 만큼 늘린 꼴이라는 뜻이다. 이를 복소수의 극 형식 *polar form*이라고 한다. 또 여기서 단위 복소수 $e^{i\theta}$ 는 따로 **위상 인자** *phase factor*라고 부른다.

위상 인자

양자역학에서 위상 인자란 $|\psi\rangle$ 와 $\langle\phi|$ 에 곱하는 복소 계수 $e^{i\theta}$ 다. 단위 복소수이므로 곱하더라도 전역 위상 *global phase*에서는 아무 일이 일어나지 않는다. 다시 말해 $e^{i\theta}(|0\rangle + |1\rangle)$ 와 $|0\rangle + |1\rangle$ 이 동치다. 하지만 이른바 상대 위상 *relative phase* $e^{i(\theta-\theta')}$ 이 있을 수 있으므로 $e^{i\theta}|0\rangle + e^{i\theta'}|1\rangle$ 와 $|0\rangle + |1\rangle$ 은 동치가 아니다.

이 e^{-iHt} 와 최대 오류 ϵ 에 대해 $\|U - e^{-iHt}\| \leq \epsilon$ 인 유니타리 변환 U 과 근사하는 알고리즘을 찾는 문제가 바로 해밀토니언 시뮬레이션이다.

유니타리

복소정방행렬 U 는 켈레전치 U^\dagger 와 곱할 때 항등행렬 I 가 나오면 유니타리라고 한다. 즉 $U^\dagger U = U U^\dagger = I$ 를 만족하는 U 는 유니타리다.

그리하여 $|b\rangle$ 를 시간 t 에 따른 (일종의) 해밀토니안 A 의 이상적인 변화 $e^{i\Lambda t}$ 로 다룬다. (아무튼 A 라는 계에 x 라는 변환을 취한 결과가 b 이기 때문이고) 여기서 핵심은 A 를 지수로 다룰 수 있다는 사실이다.

1.4 위상 추정 알고리즘: 유니타리 행렬의 고윳값

이 사실은 **위상 추정** phase estimation이라는 기법으로 $|b\rangle$ 를 분해하도록 한다.

위상 추정 알고리즘

주어진 유니타리 연산자의 고윳값에 대응하여 위상을 추정하는 알고리즘이다.

고윳값

체 혹은 스칼라 집합 K 에 대해 벡터공간 V 상의 선형변환 $T: V \rightarrow V$ 가 주어질 때, $v \in V$ 와 $\lambda \in K$ 가 존재하여

$$v \neq 0 \quad \& \quad Tv = \lambda v$$

를 만족하면 v 는 T 의 고유벡터이며 λ 는 T 의 고윳값이다.

또한 유니타리 행렬에 대한 스펙트럼 정리에 따르면, (그렇다는 사실을 그냥 받아들이면) 유니타리 행렬의 모든 고윳값은 절댓값 1, 다시 말해 단위율 unit modulus 을 지닌다. 따라서 고윳값이 위상을 특성으로 지녀 알고리즘은 고윳값으로 위상을 추정할 수 있다.

A 의 (고유벡터로 구성된 기저인) 고유기저 u_j 와 그 고윳값 λ_j 그리고 $|b\rangle = \sum_{j=1}^N \beta_j |u_j\rangle$ 에 대해 Ax 를 아래처럼 나타낼 수 있다.

$$\sum_{j=1}^N \beta_j |u_j\rangle |\lambda_j\rangle$$

그리고 정규화 상수 C 에 대한 선형사상 $f: |\lambda_j\rangle \mapsto C\lambda_j^{-1} |\lambda_j\rangle$ 를 적용하면 아래처럼 $|x\rangle$ 를 구할 수 있다.

$$\sum_{j=1}^N \beta \lambda_j^{-1} |u_j\rangle = A^{-1} |b\rangle = |x\rangle.$$

물론 여기서 f 는 선형사상일 뿐 유니타리 변환이 아니다. 따라서 실패할 수도 있다.

1.5 조건수 k 와 HHL의 로그시간 성능

HHL 알고리즘의 성능을 결정하는 요인은 A 의 최대 고윳값과 최소 고윳값 간의 비율을 나타내는 A 의 조건수condition number k 다. k 가 증가하면 A 에 역행렬이 존재하지 않을 확률도 증가한다. 이에 HHL 알고리즘은 역행렬이 존재하는 이른바 특이행렬singular matrix들의 값을 $1/k$ 와 1 사이의 값으로 가정한다. 즉 다음을 가정한다.

$$\frac{I}{k^2} \leq A^\dagger A \leq I$$

그리하여 HHL 알고리즘의 실행시간은 $|x\rangle$ 상태의 출력 과정상 취할 수 있는 오류 ϵ 에 대해 $k^2 \log(N)/\epsilon$ 와 비례한다.

1.6 HHL의 결정적인 가정들과 “양자”기계학습의 기초

여기까지 HHL 알고리즘이 취하는 로그시간 해법을 개괄했다. 애론슨Scott Aaronson은 몇 가지 결정적인 가정을 지적한다.

첫째, \mathbf{b} 라는 벡터를 양자상태 $|b\rangle = \sum_{i=1}^N b_i |i\rangle$ 로 어떻게든 재빠르게 읽어들이어야 한다. 벡터상의 성분들을 양자중첩으로 한 번에 읽는 “양자 RAM” 혹은 QRAM 같은 장치를 가정해서 어떻게든 재빠르게 읽어들이지 않으면 결국 $|b\rangle$ 를 준비하는 작업에만 어떤 상수 c 에 대해 N^c 스텝이 걸린다. 이미 로그시간 해법에서 벗어났다. 그리고 QRAM이 있더라도 \mathbf{b} 는 대체로 균일한 벡터여야 한다. 즉 어떤 b_i 가 나머지보다 특별히 커서는 안 된다.

둘째, $|b\rangle$ 를 시간 t 에 따른 해밀토니안 A 의 이상적인 변화 e^{iAt} 로 다루는 작업은 N^c 스텝이 걸리지 않으려면 각 i 에 대해 QRAM이 존재하여 재빠르게 저장해야 하며 A 가 희소sparse 행렬, 다시 말해 A 가 어떤 고정된 정수 s 에 대해 행마다 0이 아닌 성분은 s 개만 지녀야 한다.

셋째, A 는 역행렬의 존재에 의해 그저 가역행렬이기만 해서는 안 된다. 말하자면, 강력하게 가역이어야 한다. 즉 앞서 언급한 $k = |\lambda_{\max}/\lambda_{\min}|$ 가 N^c 꼴을 보이면 말짱 도루묵이다.

넷째, 해 벡터 $x = (x_1, \dots, x_n)$ 을 나타내는 작업에만 n 스텝이 요구된다. HHL 알고리즘은 x 자체가 아니라 $\log n$ 큐비트의 양자상태 $|x\rangle$ 를 출력하는데, 특정 성분 x_i 를 측정하려면 알고리즘을 대략 n 번 반복해야 하기에 지수적인 가속이 실패한다.

요약하면, 이들 조건을 전부 지키면서 HHL 자체를 응용할 구석은 많지 않다. 다만 HHL은 여타 양자기계학습 알고리즘에 대해 템플릿 역할을 맡을 수 있다. $|b\rangle$ 를 어떻게

마련할 것인가? e^{-iAt} 를 어떻게 적용할 것인가? $|x\rangle$ 를 어떻게 측정할 것인가? 이들 물음에 답하는 것이 HHL 이후 양자기계학습 알고리즘들의 과업이다.

HHL의 요는 실상 $Ax = b$ 의 해를 구하는 로그시간 방법이 아니라 임의의 양자알고리즘을 2^n 개의 선형방정식으로 이루어진 연립일차방정식으로 *시뮬레이션*하여 속도 증진을 이룰 수 있다는 것이다. 이에 탕Ewin Tang아 반문하기를, 이런 시뮬레이션을 고전 컴퓨터가 시뮬레이션할 수 있다면, 여기서 “양자”라는 표현에는 무슨 의미가 있는가?