

계산과학2 (1)

노현민-김태원 조

2023년 9월 19일

차 례

차 례	1
제 1 장 HHL	2
1.1 HHL 알고리즘	2
1.2 HHL의 ‘세부 조항’	3
제 2 장 추천	4

1.1 HHL 알고리즘

에르미트 $N \times N$ 행렬 A , 단위 벡터 \mathbf{b} 가 있다고 하자. 이때 에르미트 행렬이란 켈레 전치가 자기 자신과 같은 복소정방행렬이다. 연립일차방정식의 해를 구하는 문제는 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 를 만족하는 \mathbf{x} 를 찾는 것이다. 우선 \mathbf{b} 를 아래와 같은 양자 상태로 나타낸다.

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

이에 해밀토니언 시뮬레이션이라는 기법을 사용해 e^{-iAt} 를 상이한 시간 t 의 중첩 $|b\rangle$ 에 적용한다. e^{-iHt} 는 계의 총 에너지에 대응하는 연산자인 해밀토니언 H 의 시간 t 에 따른 이상적인 변화를 말하는데, 해밀토니언 시뮬레이션은 최대 오류 ϵ 에 대해 $\|U - e^{-iHt}\| \leq \epsilon$ 인 유니타리 변환 U 에 근사하는 알고리즘을 찾는 문제다. 그리하여 행렬 A 를 해밀토니언으로 두고 시간 t 에 따른 복소평면상의 매끄럽고 이상적인 변화 결과 e^{-iAt} 를 $|b\rangle$ 에 적용하는 것, 다시 말해 $|b\rangle$ 를 A 의 고유벡터 $u_j = e^{-iAt}$ 로 분해하여 이에 대응하는 고윳값 λ_j 를 취하는 것이 HHL 알고리즘의 핵심 기법이다.

이후 $|b\rangle = \sum_{j=1}^N \beta_j |u_j\rangle$ 에 대해 연립일차방정식은 아래와 같은 꼴을 보인다.

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

물론 여기서 $|u_j\rangle$ 가 유니타리라는 보장은 없다. 따라서 이 과정에서 실패가 발생할 수 있다. 이처럼 e^{-iAt} 를 고유벡터 $|u_j\rangle$ 삼아서 고윳값 λ_j 를 추정하는 기법을 위상 추정이라고 부르는데, 위상 추정은 유니타리(라서 단위울을 지니는) 연산자를 요구하기 때문이다.

아무튼 성공하면 $|\lambda_j\rangle$ 항목을 uncompute해서 $|x\rangle$ 에 상응하는 상태를 취할 수 있다.

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

이와 같은 역산에서 결정적인 역할을 맡는 것이 바로 조건수 k 다. k 는 A 의 최대 고윳값과 최소 고윳값의 비율이라고 보면 된다. 조건수가 크면 역산을 수행하기 어렵고 그만큼 결과가 불안정하다. 이때 HHL은 A 의 특잇값, 다시 말해 고윳값의 제곱근이 $1/k$ 와 1 가운데 있다고 아래처럼 가정한다.

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

이러한 가정 아래 실행시간은 $k^2 \log(N)/\epsilon$ 에 비례한다. 따라서 HHL은 k 와 $1/\epsilon$ 이 $\text{poly log}(N)$ 일 때 지수적인 속도 증진을 보인다.

1.2 HHL의 ‘세부 조항’

HHL 알고리즘의 로그시간 해법을 개괄했다. HHL 알고리즘은 이후 양자기계학습이라는 분야 자체의 초석이자 양자기계학습이 지수적인 속도 증진을 취한다는 주장의 근거로 자리 잡았다. 이에 애론슨 Scott Aaronson은 HHL의 결정적인 ‘세부 조항’ fine print들을 지적한다.

- (a) 벡터 \mathbf{b} 를 재빠르게 양자컴퓨터의 메모리에 적재해야 한다. 그래야 양자 상태 $|\mathbf{b}\rangle = \sum_{i=1}^n b_i |i\rangle$ 를 마련할 수 있다. 이론상으로는 이른바 “양자 RAM”을 사용하면 그만이다. 중첩을 통해 b_i 를 전부 한꺼번에 읽는 장치다. 이런 QRAM이 있더라도 \mathbf{b} 는 대체로 균일해야 한다. 즉 어떤 b_i 가 여타 성분보다 지나치게 크면 안 된다. \mathbf{b} 가 균일하지 않다면 QRAM이 \mathbf{b} 의 큰 성분에 대한 포인터를 지녀야 한다. 아무튼 $|\mathbf{b}\rangle$ 를 마련하려면 어떤 상수 c 에 대해 n^c 스텝이 소요된다.
- (b) 양자컴퓨터가 여러 t 값에 대해 e^{-iAt} 꼴의 유니타리 변환을 적용할 수 있어야 한다. 이때 A 가 희소행렬인 경우처럼 특수한 상황이 아니라면 e^{-iAt} 를 적용하는 작업에만 n^c 시간이 든다.
- (c) A 가 가역행렬이어야 할 뿐 아니라 ‘가역하기 쉬운’ 행렬이어야 한다. 앞서 언급했듯이 k 가 n^c 꼴로 늘어나면 지수적인 속도 증진이 사라진다.
- (d) \mathbf{x} 를 작성하는 작업에만 n 스텝이 소요된다. HHL은 \mathbf{x} 자체가 아니라 $\log_2 n$ 큐비트로 구성된 양자 상태 $|\mathbf{x}\rangle$ 를 내놓는데 이는 \mathbf{x} 의 성분을 진폭으로 근사하여 나타낸다. 이후 양자컴퓨터는 $|\mathbf{x}\rangle$ 를 측정해 \mathbf{x} 에 관한 통계적인 정보를 취할 수 있다. 다만 특정 성분 x_i 에 관한 정보를 취하려면 알고리즘을 대략 n 번 반복해야 한다.

애론슨의 의문은 HHL의 지수적인 속도 증진을 위해 이들 조건을 전부 지킬 일이 많겠냐는 것이다.

물론 HHL은 여타 양자 기계학습 알고리즘을 작성하기 위한 템플릿으로 기능할 수 있다. $|\mathbf{b}\rangle$ 의 마련 방법, e^{-iAt} 의 적용 방법, $|\mathbf{x}\rangle$ 의 측정 방법 같은 부분 물음을 제시한 셈이다. 실상 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 의 해를 구하는 로그시간 실질적인 방법보다는 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 를 양자 시뮬레이션하여 속도 증진을 이룰 수 있다는 쪽이 HHL의 요지에 가깝다. 이에 탕 Ewin Tang이 반문한다. 이런 양자 시뮬레이션을 고전 컴퓨터로 다시 큰 감속 없이 시뮬레이션할 수 있다면 “양자”는 무슨 뜻인가?

제 2 장

추천