Quantum algorithm for linear system of equations (Harrow, Hassidim, Lloyd, 2008) 해설

계산과학 2: 노현민-김태원 조

2023년 9월 7일

$N \times N$ 에르미트Hermitian 행렬 A가 있다고 하자. 에르미트 행렬이란 켤레전치conjugate transpose가 자기 자신과 같은 복소정방행렬complex square matrix이다. 또한 단위벡터unit vector $\mathbf{b}$가 있다고 하자. 단위벡터란 길이 혹은 노름norm이 1인 벡터다. 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.

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

$\mathbf{b}$를 아래와 같은 양자상태로 나타낸다.

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

앞선 예시로 켓ket 표기 $|\rangle$을 설명하면 아래와 같다.

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

여기에 **해밀토니언 시뮬레이션**Hamiltoniam simulation이라는 기법을 적용한다.

해밀토니언 시뮬레이션

해밀토니언 시뮬레이션이란 양자정보학의 기초 문제 가운데 하나로, 양자계quantum systems의 시뮬레이션에 요구되는 계산복잡도와 알고리즘을 묻는다. 다시 말해 양자계의 (시간의 흐름을 따른) 진화 혹은 변화evolution를 구현하는 알고리즘을 구하는 문제다. 유명한 파인만Richard Feynman 씨가 1982년에 고안했으며, 해밀토니안의 고전적 시뮬레이션에는 계의 상태에 따른 지수적인exponential 감속이 잇따르기 때문에 아무래도 양자컴퓨터 같은 게 필요하지 않겠냐는 맥락이었다.

여기서 해밀토니안 H란 수학적으로 말하면 그냥 큐비트의 개수 n에 대한 $2^n \times 2^n$ 에르미트 행렬이고, 물리학적으로 말하면 어느 계의 총 에너지에 대응하는 연산자다. 시간 t에 따른 해밀토니안 H의 이상적인 변화를 e^{-iHt}로 나타낸다.

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

복소평면, 다시 말해 x좌표가 복소수 z의 실수부분(Re(z))을 나타내고 y 좌표가 z의 허수부분(Im(z))인 좌표평면상에서 모든 복소수 z를 아래처럼 나타낼 수 있다.

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

대충 말하면 복소평면상의 한 단위를 θ만큼 돌리고 r만큼 늘리면 모든 z를 나타낼 수 있고 이런 z가 평면상에서는 $\cos\theta + i\sin\theta$를 r만큼 늘린 꼴이다. ($\cos\theta + i\sin\theta$가 평면상의 한 점을 나타낸다는 사실은 그림으로 그리면 효과적으로 이해할 수 있고 아무튼) 이를 복소수의 **극 형식polar form**이라고 한다. 또한 여기서 단위 복소수 $e^{i\theta}$는 따로 **위상 인자phase factor**라고 부른다.

위상 인자

양자역학에서 위상 인자란 $|\psi\rangle$와 $\langle\phi|$에 곱하는 복소 계수 $e^{i\theta}$다. 단위 복소수이기 때문에 곱하더라도 전역 위상*global phase*에서는 아무 일이 일어나지 않는다. 다시 말해 아래가 성립한다.

$$e^{i\theta}(|0\rangle + |1\rangle) = |0\rangle + |1\rangle$$

하지만 상대 위상r*elative phase* $e^{i(\theta-\theta')}$가 있을 수 있으므로 아래 또한 성립한다.

$$e^{i\theta}|0\rangle + e^{i\theta'}|1\rangle \neq |0\rangle + |1\rangle$$

이 e^{-iHt}와 최대 오류 ϵ에 대해 $\|U - e^{-iHt}\| \leq \epsilon$을 만족하는 유니타리 변환 U에

근사하는 알고리즘을 찾는 문제가 바로 해밀토니안 시뮬레이션이다.

유니타리

복소정방행렬 U는 켤레전치 $U^\dagger$와 곱할 때 항등행렬 I가 나오면 유니타리라고 한다. 다시 말해 $U^\dagger U = UU^\dagger = I$를 만족하는 U는 유니타리다.

다시 말해 $|b\rangle$를 시간 t에 따른 (일종의) 해밀토니안 A의 이상적인 변화 e^{iAt}로 다룬다. (아무튼 A라는 계에 $\mathbf{x}$라는 변환을 취한 결과가 $\mathbf{b}$이기 때문이고) 여기서 핵심은 A를 지수로 다뤘다는 사실이다. 이 사실은 **위상 추정phase estimation**이라는 기법을 통해 $|b\rangle$를 분해할 수 있도록 한다.

위상 추정 알고리즘

주어진 유니타리 연산자의 고윳값에 대응하여 위상을 추정하는 알고리즘이다.

고윳값

체 혹은 스칼라 집합 K에 대해 벡터공간 V상의 선형변환 $T : V \to V$가 주어질 때, $v \in V$와 $\lambda \in K$가 존재하여

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

를 만족하면 v는 T의 고유벡터이며 λ는 T의 고윳값이다.

또한 유니타리 행렬에 대한 스펙트럼 정리에 (https://www.math.purdue.edu/~eremenko/dvi/lect3.26.pdf) 따르면, 유니타리 행렬의 모든 고윳값은 절댓값 1, 다시 말해 단위율unit modulus을 지닌다. 따라서 고윳값은 위상으로 특징 지어지고, 알고리즘이 고윳값을 통해 위상을 추정할 수 있다.

A의 고유기저 u_j와 그 고윳값 λ_j 그리고 $|b\rangle = \sum_{j=1}^N \beta_j |u_j\rangle$에 대해 Ax를 아래처럼 나타낼 수 있다.

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

그리고 정규화 상수 C에 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 f는 선형사상일 뿐 유니타리 변환이 아니다. 따라서 실패할 수도 있다.