계산과학2

노현민-김태원 조 2023년 10월 9일

요 약

Ewin Tang의 2023년 Parc City Mathematics Institute 대학원생 대상 강의 *Quantum and quantum-inspired linear algebra*(https://ewintang.com/pcmi/)를 중심으로 블록인코딩, QSVT, 양자 시뮬레이션, 양자 선형대수의 개념을 익힌다.

차 례

차 례		2
0.1 에르	기초 양자역학 미트 연산자	3 3
1.1 블록		5 6 8
제2장	양자 특잇값 변환	10
제3장	다항식에 의한 근사	11
제4장	양자 선형대수	12
제 5 장	양자적 영향상의 알고리즘	13

기초 양자역학

0.1 에르미트 연산자

양자역학에 따르면 우주는 복소 공간이다. 하지만 우리의 직관 혹은 실험 및 관측 결과는 실수여야한다. 그래서 우리가 측정할 수 있는 대상인 관측량을 표현하는 수학적인 도구는 이들 두 공간을 잘이어줘야한다. 그것이 바로 에르미트 연산자다. 선형 연산자 M은 다음 성질을 만족하는 경우 에르미트 연산자다.

$$M = M^{\dagger}$$

관측량은 관측량을 나타내는 연산자의 고윳값과 대응하는데, 요컨대 에르미트 연산자의 고윳값은 모두 실수다. 임의의 에르미트 연산자 L과 고윳값 λ와 고유벡터 |λ⟩에 대해 아래가 성립한다.

$$\begin{split} L &|\lambda\rangle = \lambda \,|\lambda\rangle \\ \Rightarrow &\langle \lambda| \, L^* = \langle \lambda| \, \lambda^* \\ \Rightarrow &\langle \lambda| \, L = \langle \lambda| \, \lambda^* \\ \Rightarrow &\langle \lambda| \, L \,|\lambda\rangle = \langle \lambda| \, \lambda \,|\lambda\rangle \, \& \, \langle \lambda| \, L \,|\lambda\rangle = \langle \lambda| \, \lambda^* \,|\lambda\rangle \\ \Rightarrow &\langle \lambda| \, \lambda \,|\lambda\rangle - \langle \lambda| \, \lambda^* \,|\lambda\rangle = 0 \\ \Rightarrow &\lambda = \lambda^* \Longrightarrow \lambda \in \mathbb{R} \end{split}$$

또한 명확히 구분할 수 있는 결과를 표현하는 고유벡터는 서로 다른 고윳값을 가져야 한다. 다시 말해 상이한 대상에 대해 상이한 실험 결과가 보증되어야 한다. $\lambda_1 \neq \lambda_2$ 에 대해 아래가 성립한다.

$$\begin{split} L & |\lambda_1\rangle = \lambda_1 & |\lambda_1\rangle \&L & |\lambda_2\rangle = \lambda_2 & |\lambda_2\rangle \\ \Rightarrow & \langle \lambda_1|L|\lambda_2\rangle = \lambda_1 & \langle \lambda_1|\lambda_2\rangle \&\langle \lambda_1|L|\lambda_2\rangle = \lambda_2 & \langle \lambda_1|\lambda_2\rangle \\ \Rightarrow & 0 = (\lambda_1 - \lambda_2) & \langle \lambda_1|\lambda_2\rangle \Longrightarrow \langle \lambda_1|\lambda_2\rangle = 0 \end{split}$$

즉 두 고유벡터는 직교한다.

0.2 스핀과 파울리 행렬

이를 비롯 에르미트 연산자는 양자역학적인 세계와 우리의 관측 및 실험을 적절하게 잇는 좋은 성질을 여럿 지닌다. 여기서 우리가 관측하고자 하는 주요 대상은 바로 전자electron의 운동이다. 전자의 운동을 설명하는 데는 일련의 변수가 필요하다. 위치 좌표와 별개로 전자는 **스핀**이라는 부가적인 변수 혹은 자유도를 지닌다.

스핀이란 완전히 양자역학적인 개념으로, 고전 역학 및 우리의 직관에 대응되는 개념을 찾기 어

렵다. 거칠게 스핀은 x,y,z 축에 따라 아래처럼 구성된다고 할 수도 있다.

$$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$$

위와 같은 스핀의 성분을 일종의 연산자로 보면, 고유벡터와 고유값이 존재할 것이다. 이를테면 σ_z 는 아래와 같은 연산자다.

$$\sigma_{z} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{z} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

여기서 고윳값 ± 1 은 (1,0), (0,1)에 대한 σ_z 의 관측 결과다. 그렇다면 σ_z 는 어떻게 생겼을까?

$$\begin{pmatrix} \sigma_{z11} & \sigma_{z12} \\ \sigma_{z21} & \sigma_{z22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_{z11} & \sigma_{z12} \\ \sigma_{z21} & \sigma_{z22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \sigma_{z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

여기서 (1,0),(0,1)을 $|0\rangle$, $|1\rangle$ 로 표기하여 상태 $|A\rangle$ 를 일반화하면 아래와 같다.

$$|A\rangle = \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle$$

여기서 α_1,α_2 는 이른바 진폭이며, 이를 제곱한 것이 바로 확률이다. 따라서 임의의 $\alpha_i \in \mathbb{C}$ 는 아래와 같은 보른 규칙을 만족해야 한다.

$$|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + \cdots + |\alpha_n|^2 = 1$$

그리하여 |0>,|1>의 일차결합으로 아래와 같은 벡터를 나타낼 수 있다.

$$|\mathbf{r}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle, \quad |l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

 σ_x 가 고윳값 ± 1 에 대해 위와 같은 $|r\rangle$, $|l\rangle$ 을 고유벡터로 지닌다고 하면, σ_x 는 아래와 같을 것이다.

$$\begin{pmatrix} \sigma_{x11} & \sigma_{x12} \\ \sigma_{x21} & \sigma_{x22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{x11} & \sigma_{x12} \\ \sigma_{x21} & \sigma_{x22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \Longrightarrow \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

 α_2 를 $\pm \frac{1}{\sqrt{2}}$ 가 아니라 $\pm \frac{1}{\sqrt{2}}$ 로 일반화하면 σ_y 를 얻을 수 있다. 이들 스핀 연산자를 모두 모은 것이 바로 **파울리 행렬**이다.

$$\sigma_{x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \ \sigma_{y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \ \sigma_{z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

또한 이때 스핀을 제 전자로부터 고립시켜 파울리 행렬로 구성한 것이 바로 큐비트다.

블록-인코딩

양자 계quantum systems의 시뮬레이션은 양자 컴퓨터 개발의 주요 동기 가운데 하나다. 이들 양자 계시뮬레이션 가운데 가장 간결한 것이 이른바 **해밀토니언 시뮬레이션**이다.

해밀토니언은 자신의 환경과 상호작용하는 관측량 혹은 파울리 행렬들의 텐서곱 E_{α} 에 그러한 상호작용의 강도를 결정하는 λ_{α} 를 곱한 것의 총합 H로 볼 수 있다.

$$H = \sum_{\alpha=1}^{m} \lambda_{\alpha} E_{\alpha}$$

그리고 해밀토니언 시뮬레이션은 아래와 같이 정의되는 문제다.

문제 1.1. $\|\mathbf{U} - e^{iHt}\| \le \epsilon$ 이도록 e^{-iHt} 에 가까운 유니터리 \mathbf{U} 를 구현하는 알고리즘을 찾아라.

우선 **유니터리**와 e^{-iHt} 라는 표기가 무슨 뜻인지 알 필요가 있다. 시간 t에 상태 $|\psi\rangle$ 에 있는 닫힌 계가 있으며 $|\psi\rangle$ 가 특정한 시간 t에 $|\psi\rangle$ 였다는 사실을 $|\psi(t)\rangle$ 로 표기하자. 초기 상태 $|\psi(0)\rangle$ 에서 계의 시간이 전개되어 $|\psi(t)\rangle$ 에 이르렀다는 사실은 아래처럼 나타낸다.

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle$$

앞서 언급했듯 직교성으로 인해 2개의 다른 기저 벡터는 2개의 구분 가능한 상태를 나타낸다. 이처럼 구분 가능한 두 개의 상태를 $|\psi(0)\rangle$, $|\phi(0)\rangle$ 이라고 하자.

$$\langle \psi(0)| \varphi(0) \rangle = 0$$

임의의 시간이 흐른 이후에도 이 둘은 구분될 것이다. 이런 성질을 만족하는 것이 유니터리 U다.

$$\langle \psi(t)|\phi(t)\rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi(0)|U^{\dagger}(t)U(t)|\phi(0)\rangle = 0 \Rightarrow U^{\dagger}U = I$$

유니터리 변환은 $t = \epsilon = 0$ 인 경우 그냥 I다. 그런데 ϵ 이 극미량이면 아래처럼 쓸 수 있다.

$$U(\varepsilon) = I - i\varepsilon H, \quad U^{\dagger}(\varepsilon) = I + i\varepsilon H^{\dagger}$$

극소 시간 $t = \epsilon$ 으로 특정하여 시간 전개식을 다시 쓰면 아래와 같다.

$$\begin{split} |\psi(\varepsilon)\rangle &= |\psi(0)\rangle - i\varepsilon H \, |\psi(0)\rangle \Rightarrow \frac{|\psi(\varepsilon)\rangle - |\psi(0)\rangle}{\varepsilon} = -iH \, |\psi(0)\rangle \\ &\Rightarrow i\frac{d}{dt} \, |\psi\rangle = H \, |\psi\rangle \\ &\Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-iHt} \, |\psi(0)\rangle \end{split}$$

정리하면, 해밀토니언 시뮬레이션은 문제는 말 그대로 해밀토니언을 시뮬레이션하는 문제다. 대표적 인 해법은 **트로터 근사**다. 충분히 큰 $r \to \infty$ 에 대해 아래가 성립한다.

$$e^{-iHt} \approx \left(e^{-iE_1t/r}e^{-iE_2t/r}\cdots e^{-iE_mt/r}\right)^r$$

이 근사를 구현하기 위해서는 $\frac{1}{\epsilon}$ 에 비례하는 게이트가 필요하다. 즉 게이트 복잡도가 $\mathrm{poly}(1/\epsilon)$ 이다. 결코 최적해가 아니다. 이후 개선된 알고리즘들이 나타났으며 이들은 아래 프레임워크로 이어진다.

- (i) "블록-인코딩"이라는 유형의 양자 회로를 정의한다.
- (ii) λ_a, E_a 가 주어질 때 H의 효율적인 블록-인코딩을 구성할 수 있다는 사실을 보인다.
- (iii) H의 블록-인코딩을 적게 사용하여 e^{-iHt} 의 (근사의) 블록-인코딩을 취할 수 있다는 사실을 보인다.
- (iv) 이 블록-인코딩을 사용해 상태에 대한 근사에 적용한다.

1.1 블록-인코딩

정의 1.1. $A \in \mathbb{C}^{r \times c}$ 가 주어질 때, $U \in \mathbb{C}^{d \times d}$ 는 U가 $\mathcal{O}(Q)$ 게이트로 구현가능하고 항등행렬의 첫 r 열과 c열인 $B_{L,1} \in \mathbb{C}^{d \times r}, B_{R,1} \in \mathbb{C}^{d \times c}$ 에 대해

$$B_{L,1}^{\dagger}UB_{R,1} = A$$
 (1.1)

를 만족하면 A의 Q-블록 인코딩이라고 부른다. 다시 말해 아래와 같다.

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix} \tag{1.2}$$

여기서 · 은 U의 임의의 원소를 나타낸다.

방정식 1.1과 방정식 1.2가 같은 말이라는 사실을 이해하는 것이 중요하다. c=2, d=8, r=4라고 가정하자. 다시 말해 $A\in\mathbb{C}^{4\times 2}, U\in\mathbb{C}^{8\times 8}, B_{L,1}\in\mathbb{C}^{8\times 4}, B_{R,1}\in\mathbb{C}^{8\times 2}$ 라고 가정하자.

$$\Rightarrow \ B_{L,1}^{\dagger}U = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow B_{L,1}^{\dagger}UB_{R,1} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} \end{pmatrix} = A$$

여기서 d,r,c를 2ⁿ으로 고려하면 위 항들을 큐비트로 받아들일 수 있다.

$$(\langle 0|^{\otimes \alpha_L} \otimes I) U(|0\rangle^{\otimes \alpha_R} \otimes I) = A \tag{1.3}$$

여기서 $|0\rangle^{\otimes a_R}$ 은 두 가지 의미로 해석할 수 있는데, 첫째는 말 그대로 $|0\rangle$ 을 a_R 번 텐서곱하는 것이다. 즉

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow |0\rangle^{\otimes \alpha_{R}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

이라서 $|0\rangle^{\otimes a_R} \otimes I$ 는 어떤 크기의 항등행렬 I에 대해 아래와 같다.

$$|0\rangle^{\otimes \alpha_{R}} \otimes I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

즉 d,r,c가 2^n 일 때 $B_{L,1}^{\dagger}=\langle 0|^{\otimes \alpha_L}\otimes I, B_{R,1}=|0\rangle^{\otimes \alpha_R}\otimes I$ 다. 다른 한편 양자회로의 각 와이어는 텐 서곱으로 인터랙션한다. 다시 말해 $|0\rangle$ 으로 초기화된 와이어가 α 개 있다고 볼 수 있다. 그런데 이런 블록-인코딩이 필요한 이유는 무엇일까? 아래 보조정리를 확인하자.

보조정리 1.1. 유니타리 U를 O 게이트로 구현하는 양자 회로는 U의 O-블록 인코딩이다.

당연한 사실이다. 한편 $|\psi\rangle\mapsto U|\psi\rangle$ 와 같은 사상을 위해 유니타리 U를 구현하는 회로를 사용하는 것과 마찬가지로, A의 블록-인코딩 또한 $|\psi\rangle\mapsto A|\psi\rangle$ 와 같은 사상을 수행하기 위해 쓰일 수있다. 물론 실패할 확률이 존재하지만, 이는 유니타리 회로가 제공하는 것보다 더 일반적인 유형의 선형대수학적 연산을 수행할 수 있도록 한다. 즉 블록-인코딩은 유니타리 양자 회로의 일반화다.

보조정리 1.2. $A \in \mathbb{C}^{r \times c}$ 의 Q-블록 인코딩 $U \in \mathbb{C}^{d \times d}$ 와 상태 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^{c}$ 가 주어질 때, 상태 $A|\psi\rangle$ 를 $\mathcal{O}(Q)$ 게이트와 $\|A|\psi\rangle\|^2$ 의 확률로 생산하는 양자 회로가 존재한다.

그림 1.1: 기본적인 블록-인코딩 회로. U가 행렬 $A \in \mathbb{C}^{r \times c}$ 의 블록-인코딩이라면 첫 번째 와이어의 측정 결과가 $|0\rangle^{\otimes a}$ 인 경우 회로의 출력은 $A|\psi\rangle$ 다.

Proof. 그림 1.1상의 회로를 보라. 우리는 상태 $|\psi\rangle$ 를 취해 $|0\rangle$ 으로 초기화된 a_R 큐비트를 더한다. 그런 다음, 블록-인코딩 U를 적용하고 첫 a_L 큐비트를 측정한다. 이들 모두 0이라는 결과를 지닌다면, 방정식 1.3에 의해 최종 상태는 $A|\psi\rangle$ 다. 이는 확률 $\|A|\psi\rangle\|^2$ 로 일어난다. □

여기서 측정이 무엇인지 이해해야 한다. 위 증명에서 측정 직전 양자 계의 상태는 $U(|0\rangle^{\otimes a_R} \otimes I)|\psi\rangle$ 였고 이에 $|0\rangle^{\otimes a_L}$ 를 측정한 결과가 모두 0인지, 즉 모든 a_L 큐비트가 $\langle 0 \rangle$ 으로 결정되냐는 것이

관건이다.

$$P(0) = \|(\langle 0|^{\otimes \alpha_L} \otimes I) U(|0\rangle^{\otimes \alpha_R} \otimes I) |\psi\rangle\|^2 = \|A |\psi\rangle\|^2 = P(A |\psi\rangle)$$

큐비트의 측정 결과가 여기서 측정이 무엇인지 이해해야 한다. 양자 측정은 측정 연산자의 모음 $\{M_m\}$ 으로 기술된다. 이들은 측정되는 계의 상태 공간에 대한 연산자다. 인덱스 m은 실험으로 나타 날 수 있는 측정 결과를 가리킨다. 측정 직전 양자 계의 상태가 $|\psi\rangle$ 였다면 결과 m이 나타나는 확률은 아래와 같이 주어진다.

$$P(m) = \langle \psi | M_m^{\dagger} M_m | \psi \rangle$$

 $M_0 = |0\rangle \langle 0|$ 이고, $M_1 = |1\rangle \langle 1|$ 이다. 따라서 \mathfrak{a}_L 큐비트의 측정 결과가 0이라는 말은 그 결과가 $|0\rangle \langle 0|$ 라는 뜻이다. 위 증명에서 측정 직전 양자 계의 상태는 $|0\rangle^{\otimes \mathfrak{a}_L}$ 이었다. 그 결과가 0일 확률은 아래와 같다.

$$P(0) = \langle 0|^{\otimes \alpha_L} | M_0^{\dagger} M_0 | 0 \rangle^{\otimes \alpha_L} = \langle 0|^{\otimes \alpha_L} | | 0 \rangle \langle 0 | | 0 \rangle^{\otimes \alpha_L}$$

여기서 측정의 선형대수적인 개념을 이해해야 한다. 측정이란 관측 상태에 대응하는 특정 결과를 얻는 확률을 말한다. 그리고 $|\psi_j\rangle$ 를 기저로 $|\phi\rangle$ 라는 상태를 측정하는 확률은 아래와 같은 내적의 제곱으로 주어진다.

$$P(|\psi_j\rangle) = |\langle \psi_j | \phi \rangle|^2$$

위 증명도 마찬가지다. $|0\rangle^{\otimes aL}$ 을 측정했을 때 $\mathrm{U}(|0\rangle^{\otimes a_R}\otimes \mathrm{I})$ 라는 결과를 취하는 확률은 아래와 같다.

$$P(A|\psi\rangle) = \|(\langle 0|^{\otimes \alpha L} \otimes I)U(|0\rangle^{\otimes \alpha_R} \otimes I)\|^2 = \|A|\psi\rangle\|^2$$

1.2 블록-인코딩의 확장가능성

행렬의 효율적인 블록-인코딩을 만들 수 있는 조건은 무엇인가? 이에 해밀토니언 시뮬레이션 문제를 재고한다.

문제 1.2. $\{E_{\alpha}\}_{\alpha\in[m]}$ 의 1-블록 인코딩이 주어져 해밀토니언 $H=\sum_{\alpha=1}^{m}\lambda_{\alpha}E_{\alpha}$ 를 정의할 때, e^{-iHt} 의 (근사의) 블록-인코딩을 취할 수 있는가?

블록-인코딩은 여러 확장 성질 $_{
m extensibility}$ properties을 지닌다. 즉, A와 B의 블록-인코딩이 주어질 때, AB와 $_{
m c_0A}$ + $_{
m c_1B}$ 의 블록-인코딩을 취할 수 있다. 마찬가지로 크기 조정 상수 $_{
m c}$ 에 대해 H/ $_{
m c}$ 의 블록-인코딩을 취할 수 있다.

보조정리 1.3. U와 V가 $A \in \mathbb{C}^{r \times s}$ 와 $B \in \mathbb{C}^{s \times t}$ 의 Q_u 및 Q_v 블록-인코딩이라고 하자. 이에 AB의 $(Q_u + Q_v)$ -블록 인코딩을 구성할 수 있다.

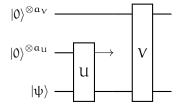


그림 1.2: U가 A의 블록-인코딩이고 V가 B의 블록-인코딩이라면 이 회로는 AB의 블록-인코딩이다. 여기서 a_U 와 a_V 는 각각의 블록-인코딩에 필요한 패딩이다.

Proof. AB를 구현하는 회로가 그림 1.2에 있다. 이는 그림 1.1의 회로 두 개의 합성composition이므로 AB의 블록-인코딩이다. □

유니타리의 선형 결합Linear Combination of Unitaries (LCU) 알고리즘으로 블록-인코딩의 선형결합의 블록-인코딩을 구성할 수 있다.

보조정리 1.4. 모든 $i=0,\ldots,k-1$ 에 대해 $U^{(i)}$ 가 $A^{(i)}$ 의 $Q^{(i)}$ -블록-인코딩이라고 하자. 이에 모든 $\alpha_i\in\mathbb{C}$ 에 대해 $\sum |\alpha_i|\leq 1$ 인 $\sum \alpha_i U^{(i)}$ 의 $\left(k+\sum_{i=0}^{k-1}Q^{(i)}\right)$ -블록인코딩을 구성할 수 있다.

양자 특잇값 변환

다항식에 의한 근사

양자 선형대수

양자적 영향상의 알고리즘