계산과학2

노현민-김태원 조

2023년 9월 22일

차 례

제 1 장

스펙트럼 정리

정의 1.1. 내적공간상의 연산자가 자신의 켤레전치와 가환이면 **정규**normal라고 한다. 즉 아래를 만족하는 연산자 $\mathsf{T} \in \mathcal{L}(\mathsf{V})$는 정규다.

$$\mathsf{T}\mathsf{T}^\dagger = \mathsf{T}^\dagger\mathsf{T}$$

정의 1.2. 연산자 $\mathsf{T} \in \mathcal{L}(\mathsf{V})$가 $\mathsf{T} = \mathsf{T}^\dagger$를 만족하는 경우 **에르미트**Hermitian라고 한다.

정리 1.1. 모든 에르미트 연산자는 정규다.

정리 1.2. $\mathbb{F} = \mathbb{C}$이며 $\mathsf{T} \in \mathcal{L}(\mathsf{V})$라고 하면, 아래 명제들은 동치다.

(a) T는 정규다.

(b) V는 T의 고유벡터를 정규직교 기저로 지닌다.

(c) T는 V의 어떤 정규직교 기저에 대해 대각행렬이다.

제 2 장

해밀토니언

아래와 같은 유니타리 변환은 연속적일까?

$$|\psi\rangle \to U|\psi\rangle$$

아니다. 다만 물리학에서 시간(에 따른 변환)은 연속적인 대상이다. 따라서 위와 같은 변환을 어떤 시간 구간상 상태가 진화 혹은 변화하는 연속적인 프로세스의 결과로 소화해야한다. 이를 가능하게 하는 것이 바로 **해밀토니언**hamiltonian이다. 해밀토니언은 슈뢰딩거 방정식에 등장하며 계의 총 에너지를 나타내는 연산자로 쓰인다.

$$i\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

슈뢰딩거 방정식을 풀어 t만큼의 시간이 흐른 뒤의 상태를 나타내면 아래와 같다.

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle$$

그런데 여기서 (에르미트) 행렬 H를 지수로 다루는 표기를 이해하는 것이 문제다. 정석은 지수함수에 대한 테일러 급수로 이해하는 것이다.

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{A_k}{k!}$$

혹은 임의의 대각행렬에 대해 아래와 같이 exp를 적용하는 것으로 생각할 수 있다.

$$\exp\left(\begin{bmatrix}\lambda_0 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_{n-1}\end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix}e^{\lambda_0} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{\lambda_{n-1}}\end{bmatrix}$$

제 3 장

블록-인코딩 개요

양자계의 시뮬레이션은 양자 컴퓨터 개발의 주요 [1] 동기 가운데 하나였다. 이들 시뮬레이션 가운데 가장 간단한 것이 바로 해밀토니언 시뮬레이션이다. 해밀토니언이란 무엇인가?

정의 3.1. 해밀토니언 H는 파울리 행렬의 텐서곱 E_a에 대해 아래와 같다.

$$H = \sum_{a=1}^{m} \lambda_a E_a$$

즉 H는 상호작용하는 항$_{\text{term}}$ E_a의 합이며 λ_a는 상호작용의 강도를 결정한다.

물리학에서는 아래와 같은 유니타리 변환 U, 혹은 시간(에 따른 변화)가 연속적이어야 한다.

$$|\psi\rangle \to U|\psi\rangle$$

그래서 $|\psi\rangle \to U|\psi\rangle$를 이산적인 점프로 보지 말고 어떤 시간 구간에 대해 진화-변화하는 연속적인 프로세스의 결과로 볼 필요가 있다. 유니타리 변환에 대해 이러한 시간을 생성해 주는 것이 바로 해밀토니언이다. 물리학적으로 해밀토니언은 계의 총 에너지를 나타내는 연산자로, 슈뢰딩거 방정식에 등장한다.

$$i\frac{d}{dt}|\psi\rangle = H|\psi\rangle$$

파울리 행렬은 아래와 같은 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$로, 모든 2×2 에르미트 행렬을 파울리 행렬과 더불어 항등 행렬로 나타낼 수 있다.

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

하나의 큐비트에 대해 파울리 행렬로 생성한 군$_{\text{group}}$을 파울리 군 P_1이라고 부르기도 한다. 파울리 행렬의 텐서곱은 n개의 큐비트에 대한 파울리 군 P_n의 원소다.

$$b(P_1 \otimes P_2 \otimes \cdots \otimes P_n) \quad [b \in \{1, -1, i, -i\}]$$

참고 문헌

[1] Richard P. Feynman. Simulating physics with computers. 21(6):467–488.