양자선형대수학 학습일지

계산과학2 노현민-김태원 조

최초 작성 : 2023년 9월 10일

최근 편집 : 2023년 9월 12일

제 1 장

기초

1.1 양자 데이터

양자컴퓨터에서 정보는 큐비트로 저장되는데, 큐비트란 복소벡터공간상의 ℓ_2정규화, 혹은 유클리드 정규화 벡터로 나타낼 수 있는 상태를 뜻한다. 이를테면 n 큐비트로 구성된 상태는 $\sum_x |a_x|^2 = 1$을 만족하는 $\alpha_x \in \mathbb{C}$에 대해 아래처럼 나타낼 수 있다.

$$|\psi\rangle = \sum_{x \in \{0,1\}^n} a_x |x\rangle$$

양자 상태는 데이터를 추상적으로 저장한다. 이를테면 군group G에 대해 $|g\rangle$를 군의 원소 $g \in G$에 대응하는 기저 상태로 두고 군에 대한 임의의 중첩superposition은 아래처럼 나타낼 수 있다. $|g\rangle$가 기저 상태라는 말은 아래 중첩이 유일하다는 뜻이다.

$$|\phi\rangle = \sum_{g \in G} b_g |g\rangle$$

양자 컴퓨터가 상태 $|\psi\rangle$와 상태 $|\phi\rangle$를 저장할 때, 총 상태는 이들 두 상태의 텐서곱으로 주어진다. 이를 아래처럼 표기한다.

$$|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle = |\psi\rangle |\phi\rangle = |\psi, \phi\rangle$$

1.2 양자 회로

정규화된 상태를 정규화된 상태로 사상하는map 것을 유니타리*unitary* 연산자 U라고 하며 U는 아래를 만족한다.

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I$$

n 큐비트에 대한 유니타리 연산자는 원칙상 하나 혹은 두 큐비트 게이트만으로 구현될 수 있다. 따라서 이들 두 큐비트 게이트를 보편이라고 한다.

회로는 유니타리 변환에 적절하게 근사해야 한다. 만약 아래 부등식을 정밀도 ϵ로

만족하는 경우 $U_1, U_2, \ldots, U_t$ 게이트로 구성한 회로가 U를 근사한다고 한다.

$$\|U - U_t \ldots U_2 U_1\| \leq \epsilon$$

여기서 $\|\|$는 $\|U - V\|$가 작다면 U와 V를 그 양자상태와 무관하게 구분하기 어렵다는 성질을 지녀야 하는 적절한 노름으로, 보통 스펙트럴*spectral* 노름을 사용한다.

$$\|A\| := \max_{|\psi\rangle} \frac{\|A\,|\psi\rangle\,\|}{\|\,|\psi\rangle\,\|}$$

여기서 $\|\,|\psi\rangle\,\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$는 $|\psi\rangle$의 2노름을 나타낸다. 즉 이는 A의 최대 특이값singular value이다.

제 2 장

블록인코딩 개론

양자컴퓨터 설계의 초기 동기는 양자계quantum systems의 시뮬레이션이다. 이들 시뮬레이션 가운데 가장 간단한 것이 해밀토니언 시뮬레이션이다.

문제 2.1 (해밀토니언 시뮬레이션)**.** H가 m개의 파울리 항으로 구성된 해밀토니언이라고 하자. 다시 말해 파울리 행렬의 텐서곱 E_a에 대해 아래와 같다.

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

$\|U - e^{iHt}\| \le \epsilon$이도록 e^{-iHt}와 가까운 유니타리 U를 구현하는 알고리즘을 찾아라.

해밀토니언을 처음 본다면 H를 상호작용하는 항 E_a의 합으로 보고 λ_a를 이런 상호작용의 강도로 보는 편이 좋겠다. 보통 이 문제에 대한 답은 트로터 근사로 주어진다. 충분히 큰 r에 대해 아래처럼 근사한다.

$$e^{-iHt} \approx (e^{-iE_1 t/r} e^{-iE_2 t/r} \cdots e^{-iE_m t/r})^r$$

하지만 이 해는 결코 최적이 아니다. 이 근사의 구현은 $\mathrm{poly}(1/\epsilon)$의 게이트복잡도를 요구하기 때문이다. 개선된 알고리즘들은 아래와 같은 프레임워크를 따른다.

(i) "블록인코딩"block-encoding이라는 양자회로의 유형을 정의한다.

(ii) λ_a와 E_a가 주어질 때, H의 효율적인 블록인코딩을 구성할 수 있다는 사실을 보여라.

(iii) H의 블록인코딩을 적게 사용하면서 e^{-iHt}의 근사에 대한 블록인코딩을 취할 수 있다는 사실을 보여라.

(iv) 이런 블록인코딩을 상태의 근사에 적용하라.

2.1 블록인코딩

정의 2.1. $A \in \mathbb{C}^{r\times c}$가 주어질 때, $U \in \mathbb{C}^{d\times d}$가 $\mathcal{O}(Q)$ 게이트로 구현가능하고 $B_{L,1} \in \mathbb{C}^{d\times r}, B_{R,1} \in \mathbb{C}^{d\times c}$가 항등행렬의 첫 r과 c 열일 때 아래를 만족하면 A의 Q블록인코딩

이라고 부른다.

$$B_{L,1}^{\dagger} U B_{R,1} = A$$

다시 말해 U의 임의의 원소 $\cdot$ 에 대해 아래와 같다.

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

우리는 $\Pi_L = B_{L,1} B_{L,1}^{\dagger}, \Pi_R = B_{R,1}, B_{R,1}^{\dagger}$로 $B_{L,1}$과 $B_{R,1}$의 생성에 대한 사영을 표기한다.

제 3 장

해밀토니언 시뮬레이션

양자계산quantum computation이라는 계산 모델computational model의 개념이 아니라 실질적으로 만지고 뜯어볼 수 있는 장치로서 양자컴퓨터가 처음 요구된 이유는 시뮬레이션simulation이었다. 파인만Richard Ferunman은 1981년「컴퓨터로 물리학을 시뮬레이션해 보자」에서 아래처럼 말한다.

> 자연은 고전적이지 않단 말이죠. 그러니 빌어먹을, 자연에 대한 시뮬레이션을 내놓고 싶다면, 양자역학적으로 해야할 것입니다. 이건 세상에나 굉장한 문제인데, 별로 안 쉬워 보이거든요.

'양자역학적으로 자연을 시뮬레이션한다'는 말은 곧 양자계quantum system의 동역학dynamics을 만져 보겠다는 뜻이다. 그리고 이런 양자계의 동역학, 혹은 양자 상태의 시간(에 따른) 변화를 생성하는 것은 이른바 **해밀토니언Hamiltonian** H라는 에르미트[1] 연산자라고 한다. 그리하여 양자역학 시뮬레이션에서 가장 기본적인 문제가 바로 해밀토니안 시뮬레이션이다.

문제 3.1. 해밀토니언 H, 시간 변화 t, 미지의 초기 상태 $|\psi(0)\rangle$에 대해 최종 상태 $|\psi(t)\rangle$를 *(근사적으로)* 내놓아라.

이에 고전컴퓨터는 초기 상태 $|\psi(0)\rangle$도 효과적으로 집어넣을 수 없다. 여기서 시간 t에 따른 H의 변화는 이상적으로 e^{-iHt}이며, 위 문제는 e^{-iHt}에 오류 ϵ로 근사하는 유니타리 변환 $U(t)$을 찾으라는 것이다.

[1]자기 자신과 켤레 전치가 같은 복소정방해열을 뜻한다. 에르미트라는 수학자가 만들어서 에르미트 행렬이라고 부른다.