基礎から学ぶ量子計算 アルゴリズムと計算量理論

6.2 NP の量子版：QMA（後半：pp.194-pp.199）

松本侑真

2023/12/5

QMA 問題の例

NP 完全問題に対応する QMA 完全問題[1]としては、局所ハミルトニアンに関する次の問題[2]が代表的である：

問題 6.3 (*k*-LH (*k*-local Hamiltonian))

- **入力**：n 量子ビット上の k 局所ハミルトニアン

$$H = \sum_{j=1}^{r} H_j \quad （ただし、0 \le H_j \le 1,\ r = \mathrm{Poly}(n)） \tag{1}$$

  および、$\beta - \alpha \ge 1/\mathrm{poly}(n)$ を満たす実数 α, β
- **出力**：H の最小固有値が α 以下ならば YES、β 以上ならば NO

[1]任意の QMA 問題が多項式時間帰着可能であるような QMA 問題
[2]NP 問題 k-SAT の量子版と考えられる

問 6.9

問題：問題 6.3 の出力は、「ある $|\psi\rangle$ が存在して、$\langle\psi|H|\psi\rangle \le \alpha$ ならば YES、どんな $|\psi\rangle$ についても $\langle\psi|H|\psi\rangle \ge \beta$ ならば NO」(★) と書き換えられることを示せ。

問 6.9 の解答

H の最小固有値と固有ベクトルの組を $(E_0, |\psi_0\rangle)$ とする。任意の $|\psi\rangle$ について、変分原理より

$$\langle\psi|H|\psi\rangle \ge \langle\psi_0|H|\psi_0\rangle = E_0 \tag{2}$$

が成立する。$E_0 \le \alpha$ ならば $|\psi_0\rangle$ に対して YES を返せば良い。
また、$\forall|\psi\rangle[\langle\psi|H|\psi\rangle \ge \beta] \Leftrightarrow E_0 \ge \beta$ であるため、問題 6.3 の出力は (★) と書き換えられることが示された。

例 6.1

2-LH と 2-SAT の対応

2-SAT 式

$$F(x_1, x_2, x_3) = (\neg x_1 \vee x_2) \wedge (x_1 \vee x_3) \wedge (\neg x_2 \vee \neg x_3) \wedge (\neg x_1 \vee \neg x_3)$$

は、次のハミルトニアンの集合に対応させれば自然に 2-LH の入力となる：

$$\begin{cases} H_1 = |10\rangle\langle 10|_{12} := |10\rangle\langle 10| \otimes I \quad \text{（テキストに誤植あり）} \\ H_2 = |00\rangle\langle 00|_{13} := |0\rangle\langle 0| \otimes I \otimes |0\rangle\langle 0| \\ H_3 = |11\rangle\langle 11|_{23} := I \otimes |11\rangle\langle 11| \\ H_4 = |11\rangle\langle 11|_{13} := |1\rangle\langle 1| \otimes I \otimes |1\rangle\langle 1| \end{cases} \tag{3}$$

2-LH と 2-SAT の対応の意味（自分なりの理解）

局所ハミルトニアン H は $H = \sum_{i=1}^{4} H_i$ である。

- 例えば $x_1 = 1,\ x_2 = 0$ の場合、$\neg x_1 \vee x_2 = 0$ となるため $F(1, 0, x_3) = 0$ である。
- これに対応して、$|\psi\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |b\rangle$ では $\langle\psi|H|\psi\rangle > 0$ となる。

$F(x_1, x_2, x_3) = f_1 \wedge f_2 \wedge f_3 \wedge f_4$ と見たときに、$f_i = 0$ に対応する状態 $|\psi_i\rangle$ に対して、
$\langle\psi_i|H_i|\psi_i\rangle > 0$ になるように H_i を設計する。
例えば $\alpha = 0,\ \beta = 1$ とすると、この 2-SAT は 2-LH に対応する。[3]

[3]一般にこのような H_i が存在しなくても、$F = 0$ になる状態に対してハミルトニアンの期待値を大きくし、$\alpha,\ \beta$ を適切に設定すれば k-LH に対応させられると思う。

問 6.10（前半）

問題：3-SAT 式

$$F_1(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1 \lor x_2 \lor x_3) \land (x_2 \lor \neg x_3 \lor x_4) \land (x_1 \lor \neg x_2 \lor \neg x_4) \tag{4}$$

に対応する 3-LH の入力を与えよ。

問 6.10（前半）の解答

$$\begin{cases} f_1 \coloneqq (x_1 \lor x_2 \lor x_3) = 0 & \Leftrightarrow (x_1, x_2, x_3, x_4) = (0, 0, 0, b) \\ f_2 \coloneqq (x_2 \lor \neg x_3 \lor x_4) = 0 & \Leftrightarrow (x_1, x_2, x_3, x_4) = (b, 0, 1, 0) \\ f_3 \coloneqq (x_1 \lor \neg x_2 \lor \neg x_4) = 0 & \Leftrightarrow (x_1, x_2, x_3, x_4) = (0, 1, b, 1) \end{cases}$$

である。$f_i = 0$ に対応する量子ビットを与えたときに、Hamiltonian の期待値が正になるように設計する。つまり、

$$H_1 = |000\rangle\langle 000| \otimes I, \quad H_2 = I \otimes |010\rangle\langle 010|, \quad H_3 = |01\rangle\langle 01| \otimes I \otimes |1\rangle\langle 1|$$

とすれば良い。

問 6.10（後半）

問題：2-SAT 式

$$F_2(x_1, x_2, x_3, x_4) = (x_1 \vee \neg x_3) \wedge (x_2 \vee \neg x_4) \wedge (\neg x_1 \vee \neg x_2) \tag{5}$$

に対応する 2-LH の入力を与えよ。

問 6.10（後半）の解答

$$\begin{cases} f_1 := (x_1 \vee \neg x_3) = 0 & \Leftrightarrow (x_1, x_2, x_3, x_4) = (0, b, 1, b) \\ f_2 := (x_2 \vee \neg x_4) = 0 & \Leftrightarrow (x_1, x_2, x_3, x_4) = (b, 0, b, 1) \\ f_3 := (\neg x_1 \vee \neg x_2) = 0 & \Leftrightarrow (x_1, x_2, x_3, x_4) = (1, 1, b, b) \end{cases}$$

である。$f_i = 0$ に対応する量子ビットを与えたときに、Hamiltonian の期待値が正になるように設計する。つまり、

$$H_1 = |0\rangle\langle 0| \otimes I \otimes |1\rangle\langle 1| \otimes I, \quad H_2 = I \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes I \otimes |1\rangle\langle 1|, \quad H_3 = |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1| \otimes I \otimes I$$

とすれば良い。

k-LH が QMA に属することの保障

k-LH に対する QMA プロトコル

レジスタ R 上に証拠の候補が $|\psi\rangle_{\mathsf{R}}$ と与えられたとする。

1. レジスタ A に一様重ね合わせ状態

$$\frac{1}{\sqrt{r}}\sum_{j=1}^{r}|j\rangle_{\mathsf{A}}$$

を準備する。

2. レジスタ A の値が j のとき、レジスタ R 上で POVM$\{H_j, I-H_j\}$ を実行する。そして、POVM の要素 H_j に対応する測定値を得たときに reject、$I-H_j$ に対応する測定値を得たときに accept。

k-LH が QMA に属することの保障

検証者が reject を出力する確率は、レジスタ R 上の状態を $|\psi_R\rangle$ として

$$\Pr[\text{reject}](|\psi_R\rangle) = \frac{1}{r}\sum_{j=1}^{r}\langle\psi_R|H_j|\psi_R\rangle = \frac{1}{r}\langle\psi_R|H|\psi_R\rangle$$

となる。YES の場合は、ある状態 $|\varphi\rangle$ が存在して

$$\Pr[\text{reject}](|\varphi\rangle) = \frac{1}{r}\langle\varphi|H|\varphi\rangle \leq \frac{\alpha}{r} \quad \left(\Pr[\text{accept}](|\varphi\rangle) \geq 1 - \frac{\alpha}{r}\right)$$

となる。NO の場合は、全ての状態 $|\psi\rangle$ に対して

$$\Pr[\text{reject}](|\psi\rangle) = \frac{1}{r}\langle\psi|H|\psi\rangle \geq \frac{\beta}{r} \quad \left(\Pr[\text{accept}](|\psi\rangle) \leq 1 - \frac{\beta}{r}\right)$$

となる。(k-LH の等価な言い換え（問 6.9）を用いた。)

k-LH が QMA に属することの保障（続き）

まとめると、$x \in A_{\text{yes}}$, $x \in A_{\text{no}}$ それぞれに対応して

$$\exists|\varphi\rangle\left[\Pr[\text{accept}](|\varphi\rangle) \geq 1 - \frac{\alpha}{r} = a\right], \quad \forall|\psi\rangle\left[\Pr[\text{accept}](|\psi\rangle) \leq 1 - \frac{\beta}{r} = b\right] \tag{6}$$

となるため、k-LH は QMA(a,b) に属する。また、$\beta - \alpha \geq 1/\text{poly}(n)$ であるため、

$$a - b = \frac{\beta - \alpha}{r} \geq \frac{1}{\text{poly}(n)} \tag{7}$$

となる。a, $b = 1 - 1/\text{poly}(n)$ であることと、

$$\frac{1}{\exp(n)} \leq 1 - \frac{1}{\text{poly}(n)} \leq 1 - \frac{1}{\exp(n)} \tag{8}$$

が成立することより命題 6.11 が適用でき、k-LH は QMA に属することが示された。

k-LH が QMA 困難であることについて

k-LH が QMA 困難である[4]ことは、Cook-Levin 定理[5]の証明を量子化すれば示せる。

証明の方針

1. 任意の $A = (A_{\mathrm{yes}}, A_{\mathrm{no}}) \in \mathrm{QMA}$ を k-LH に帰着させるため、A を検証する一様回路族 $\{Q_x\}$ を考える。
2. 量子回路 Q_x の t ステップ目の状態を $|\psi_t\rangle = \prod_{u=1}^{t} U_{x,u} |\varphi\rangle |0\rangle^m$ とする。このときの履歴状態

$$\frac{1}{\sqrt{T+1}} \sum_{t=0}^{T} |t\rangle_{\mathrm{A}} |\psi_t\rangle_{\mathrm{B}} \quad (T = T(|x|) \text{ は } Q_x \text{ のサイズ}) \tag{9}$$

が最低エネルギー状態になるように、局所ハミルトニアン H の各項を構成する。

---

[4] A が QMA 困難とは、任意の $B \in \mathrm{QMA}$ に対して、$B \leq_p A$ が成立すること
[5] SAT は NP 完全であるという定理

任意の QMA を *k*-LH に帰着させる

- 局所ハミルトニアン H には
  1. 検証者のアンシラ（補助量子ビット）が正しく $|0\rangle^m$ にセットされているか
  2. 各量子ゲートが正しく適用されているか
  3. 終状態 $|\psi_t\rangle$ を測定したときに accept を出力するか

  をチェックする項を含んでいる。
- 最初の 2 つは正しく Q_x が実行できるかどうかに関わっているため、満たされていない場合のペナルティを大きくする。
- その結果、Q_x の毎ステップ後の状態の一様重ね合わせである履歴状態が最もペナルティを食わないようになる。
- 3 番目のチェックに対応する項のペナルティで、YES 入力と NO 入力の最低エネルギーの差が出る仕組みになる。

quantum MAX-CUT

2-LH から派生する次の問題が QMA 完全（QMA 困難かつ QMA）であることが示されている：

問題 6.4 (quantum MAX-CUT)

- **入力**：グラフ $G = (V, E)$ および各辺 $\{u, v\} \in E$ に対する重み $w_{uv} > 0$
- **出力**：

$$H_G := \sum_{\{u,v\} \in E} w_{uv} \frac{I - X_u X_v - Y_u Y_v - Z_u Z_v}{4} \tag{10}$$

の最大固有値

NP 完全問題である MAX-CUT は[6]

$$H_G = \sum_{\{u,v\} \in E} w_{uv} \frac{I - Z_u Z_v}{2} \tag{11}$$

の最大固有値を見つける問題と表現できるため、これの自然な量子版と見れる。

[6] 3 回目講義「量子アルゴリズムの基礎」を参照

Thank you for your attention!