

量子コンピュータによる振幅推定法を用いた線形方程式の解法に関する研究

高比良 宗一

指導教員：白田 毅

1 はじめに

近年、最も注目されている量子アルゴリズムのひとつに、Harrow, Hassidim, Lloyd によって示された量子アルゴリズム (以下, HHL 法と略す)[1] がある. HHL 法は, $N \times N$ の疎行列 A を係数とする線形方程式 $Ax = b$ に対し, 解ベクトル x に対応した量子状態 $|x\rangle = \frac{1}{\|x\|} x$ を $O(s^2 \kappa^2 \log N / \epsilon)$ で求めることができる. ここで, s は行列 A の一列あたりの非ゼロ要素数で, κ は条件数, ϵ は $|x\rangle$ についての推定誤差である. 従来の古典アルゴリズムで $|x\rangle$ を求めようとする, N に比例した計算量が必要のため, HHL 法は非常に高速である. HHL 法は係数行列 A が疎行列の場合のみ非常に高速になる一方で, 係数行列 A が密行列の場合は高速に量子状態を求めることは困難になる. したがって, 密行列を係数とする場合でも高速に量子状態 $|x\rangle$ を求める量子アルゴリズムは重要である.

そこで, 一般的に密行列である巡回行列に注目し, すべての固有値が正であるとき, 量子状態 $|x\rangle$ を求める量子アルゴリズムを文献 [A] にて提案し, 誤差を文献 [B] にて解析した. さらに文献 [C] にて固有値が複素平面の第一象限上にある場合でも $|x\rangle$ を求められるように量子アルゴリズムを改良した.

本稿の構成は以下の通りである. 第 2 章で, 巡回行列の定義と性質を説明する. 第 3 章で, 既存の量子アルゴリズムを説明する. 第 4 章で, 提案した量子アルゴリズムについてその構成と計算量を示す. そして第 5 章で, まとめと今後の課題を述べる.

2 巡回行列

2.1 定義

$N \times N$ の巡回行列 $C \in \mathbb{C}^{N \times N}$ を次式で定義する.

$$C := \begin{pmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \cdots & c_{N-1} \\ c_{N-1} & c_0 & c_1 & \ddots & c_{N-2} \\ c_{N-2} & c_{N-1} & c_0 & \ddots & c_{N-3} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ c_1 & c_2 & c_3 & \cdots & c_0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

この行列の成分は $C_{i,j} = c_{(j-i) \bmod N}$ と書ける.

2.2 固有値と固有ベクトル

巡回行列 C の固有値 λ_j は $\lambda_j = \sum_{k=0}^{N-1} c_k e^{i \frac{2\pi j k}{N}}$ で与えられる. ここで, $i = \sqrt{-1}$ は虚数単位である. 対応する固有ベクトル $|u_j\rangle$ は $|u_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i \frac{2\pi j k}{N}} |k\rangle$ で与えられる.

2.3 量子フーリエ変換と固有値・固有ベクトルの関係

量子フーリエ変換 \mathbf{F}_N とは $\mathbf{F}_N : |j\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i \frac{2\pi j k}{N}} |k\rangle$ を満たすユニタリ作用素 (行列) であり $O(\log^2 N)$ で実行できる. 巡回行列 C の固有ベクトルは $\mathbf{F}_N |j\rangle$ によって与えられる. 量子状態 $|c\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} c_j |j\rangle$ が生成できるとし, この状態に対して量子フーリエ変換を行うと,

$$\mathbf{F}_N \sum_{j=0}^{N-1} c_j |j\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{\lambda_j}{\sqrt{N}} \right) |j\rangle, \quad (2)$$

という量子状態が得られる. ここで, $\mu_j := \lambda_j / \sqrt{N}$, $|\mu_j\rangle := \sum_{j=0}^{N-1} \mu_j |j\rangle$ とすると, $\mathbf{F}_N |c\rangle = |\mu\rangle$ という関係式が得られる.

また, 巡回行列である C^\dagger に対応する量子状態に対して同様に, 量子フーリエ変換を行うと量子状態 $|\mu^*\rangle := \sum_{j=0}^{N-1} \mu_j^* |j\rangle$ を得ることができる.

2.4 複素共役

$\lambda_j = |\lambda_j| e^{i\phi_j}$ とする. U_μ, U_{μ^*} をそれぞれ $U_\mu |0\rangle = |\mu\rangle, U_{\mu^*} |0\rangle = |\mu^*\rangle$ を満たす作用素とする. また \mathbf{H} をアダマール作用素, \mathbf{I} を単位行列とする. このとき

$$U_\nu := (\mathbf{H} \otimes \mathbf{I})(|0\rangle\langle 0| \otimes U_\mu + |1\rangle\langle 1| \otimes U_{\mu^*})(\mathbf{H} \otimes \mathbf{I}), \quad (3)$$

を $|0\rangle|0\rangle$ に適用すると $|0\rangle|\nu^{(c)}\rangle + |1\rangle|\nu^{(s)}\rangle =: |\nu\rangle$ を得ることができる. ここで, $|\nu^{(c)}\rangle = \frac{1}{2}(|\mu\rangle + |\mu^*\rangle) = \sum_{k=0}^{N-1} |\mu_k| \cos(\phi_k) |k\rangle$, $|\nu^{(s)}\rangle = \frac{1}{2}(|\mu\rangle - |\mu^*\rangle) = i \sum_{k=0}^{N-1} |\mu_k| \sin(\phi_k) |k\rangle$ である.

3 知られている量子アルゴリズム

3.1 量子振幅推定法 (以下, 推定法)[2]

$|\Psi_0\rangle$ を m 個の量子ビットを用いた量子状態

$$|\Psi_0\rangle := \sqrt{\frac{2}{M}} \sum_{k=0}^{M-1} \sin\left(\frac{(k+1/2)\pi}{M}\right) |k\rangle, \quad (4)$$

とする. $|\psi\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \psi_k |k\rangle$ とする. また, $M = 2^m$ とし, $z_j \in [0, M]$ を用いて $|\psi_j\rangle = \sin\left(\frac{z_j}{M}\pi\right)$ と表現する. z_j が整数のとき, 推定法は入力量子状態 $|j\rangle|\psi\rangle|\Psi_0\rangle$ に対して, 量子状態

$$\frac{-i}{\sqrt{2}} |j\rangle (e^{i \frac{z_j}{M}\pi} |\psi_+^{(j)}\rangle |z_j\rangle - e^{-i \frac{z_j}{M}\pi} |\psi_-^{(j)}\rangle |M - z_j\rangle), \quad (5)$$

を出力し, $|\psi_j\rangle$ を完璧に推定できる [2]. ここで $|\psi_\pm^{(j)}\rangle$ は, 推定のために用いるユニタリ作用素の固有ベクトルである. 上記の量子状態 (5) を $|j\rangle|e(\psi_j)\rangle$ と表記する. z_j が整数ではない実数の場合, 量子ビット列が重ね合わせの状態になる. そして量子ビット列の値が z_j に近いほど, 確率が大きくなる. 本要旨では紙面の都合上, z_j が整数の場合のみ考える.

3.2 回転作用素

$|\mu_j| = \sin\left(\frac{z_j}{M}\pi\right)$ とし, 実関数 $f_+(x), f_-^n(x) \in [0, 1]$ をそれぞれ, $f_+(x) = |x|/(\kappa^2 \Gamma), f_-^n(x) = \Gamma^n / |x|^n$ と定義する. ここで, κ は巡回行列 C の条件数であり, $\kappa = \max_j(|\mu_j|) / \min_j(|\mu_j|)$ と表現できる. また, $\Gamma = \min_j(|\mu_j|) / \kappa$ である. $|f(x)\rangle_a := (\sqrt{1-f(x)^2}|0\rangle_a + f(x)|1\rangle_a)$ とし, 回転作用素 \mathbf{R}_f を, $\mathbf{R}_f |e(x)\rangle|0\rangle_a = |e(x)\rangle|f(x)\rangle_a$ を満たすユニタリ作用素として定義する.

4 提案手法

推定法と回転作用素を量子状態 $|j\rangle|\mu\rangle|\Psi_0\rangle|0\rangle_a$ に対して適用すると, $|j\rangle|\mu\rangle|e(\mu_j)\rangle|f(\mu_j)\rangle$ を得る. 推定法の逆を考えると, 以下を満たすユニタリ作用素 V_f を得られる.

$$V_f |j\rangle|\mu\rangle|0\rangle_a = |j\rangle|\mu\rangle|f(\mu_j)\rangle_a. \quad (6)$$

4.1 固有値が正の実数の場合

4.1.1 アルゴリズム

初期状態として量子状態 $|b\rangle|\mu\rangle|0\rangle_a$ を用意する. この量子状態に対して, 次のアルゴリズムを実行する.

1. (量子逆フーリエ変換): $|b\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |u_j\rangle$ に対して量子フーリエ逆変換を行う. すると量子状態は $\sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |j\rangle |\mu\rangle |0\rangle_a$ になる. ここで, $\beta_j = \langle u_j | b \rangle$ である.
2. (推定法と回転作用素, 推定法の逆): ユニタリ作用素 V_{f_1} を適用する. すると量子状態は $\sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |j\rangle |\mu\rangle |f_1(\mu_j)\rangle$ になる.
3. (量子フーリエ変換): 量子フーリエ変換を $|j\rangle$ に対して適用する. すると量子状態は $\sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |u_j\rangle |\mu\rangle |f_1(\mu_j)\rangle$ になる.
4. (測定): 補助量子ビット $|f_1(\mu_j)\rangle_a$ を計算基底で測定する. すると確率 $\Omega(1/\kappa^4)$ で 1 が測定され, そのとき量子状態

$$\frac{1}{\sqrt{\sum_{j=0}^{N-1} |\beta_j \Gamma / \mu_j|^2}} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\beta_j \Gamma}{|\mu_j|} |u_j\rangle \quad (7)$$

を得ることができる. すべての固有値が正の実数のとき, すなわち $|\lambda_j| = \lambda_j$ のときを考える. 上記の量子状態は $|x\rangle$ に等しくなる. 確実に成功するために, 増幅法 [2] を使い, 1 を得る確率を 1 に近づける.

4.1.2 計算量と誤差

この量子アルゴリズム全体の計算量は, 推定法と増幅法の計算量に依存する. 推定法では, 主に量子フーリエ変換で構成されるユニタリ作用素を $O(M)$ 回適用する. この M は推定誤差に関係しており, $|x\rangle$ を誤差 ϵ で求めることを考えると $M = O(\kappa^2 \sqrt{N}/\epsilon)$ になる [B]. 増幅法では, 成功確率を 1 に近づけるために, ステップ 1 からステップ 3 を $O(\kappa^2)$ 回反復する [2]. したがって, 全体の計算量は

$$O(\kappa^4 \sqrt{N} \log^2 N / \epsilon) \quad (8)$$

になる. 古典アルゴリズムでは, $O(N \log N)$ で $|x\rangle$ を求めるアルゴリズムが存在する. したがって提案手法は N に関して高速である.

4.2 固有値が複素平面の第一象限上にある場合

4.2.1 アルゴリズム

初期状態として量子状態 $|b\rangle |0\rangle |\nu\rangle^A |0\rangle_a^A |\mu\rangle^B |0\rangle_a^B$ を用意する. この量子状態に対して次のアルゴリズムを実行する.

1. (量子逆フーリエ変換とアダマール変換): $|b\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \beta_j |u_j\rangle$ に対して量子フーリエ逆変換, 第二量子ビットに対してアダマール変換を行う. すると以下の量子状態を得る.

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{i=0}^1 \beta_j |j\rangle |i\rangle |\nu\rangle^A |0\rangle_a^A |\mu\rangle^B |0\rangle_a^B. \quad (9)$$

2. (推定法と回転作用素, 推定法の逆): 量子レジスタ A に対して V_{f_+} , 量子レジスタ B に対して V_{f_-} を行う. すると以下の量子状態を得る.

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{i=0}^1 \beta_j |j\rangle |i\rangle |\nu\rangle^A |f_+(\nu_j^{(i)})\rangle_a^A |\mu\rangle^B |f_-(\mu_j)\rangle_a^B. \quad (10)$$

3. (量子フーリエ変換とアダマール変換): 第二量子ビットと A の補助量子ビットが $|1\rangle$ の状態に対して, 制御 σ_y 演算を行う. ここで σ_y はパウリ行列である. その後, 第一量子状態に対して量子フーリエ変換, 第二量子状態に対してアダマール変換を行う. すると, 以下の量子状態を得ることができる.

$$\frac{1}{2} \sum_{j=0}^N \beta_j \left(\frac{|\mu_j \cos(\phi_j)|}{\kappa^2 \Gamma} - i \frac{|\mu_j \sin(\phi_j)|}{\kappa^2 \Gamma} \right) \frac{\Gamma^2}{|\mu_j|^2} |u_j\rangle |0\rangle |1\rangle_a^A |1\rangle_a^B + |\text{garbage}\rangle. \quad (11)$$

ここで $|\text{garbage}\rangle$ は, 第二量子ビットと補助量子ビットが $|0\rangle |1\rangle_a^A |1\rangle_a^B$ 以外の状態の和である. 巡回行列 C の固有値が複素平面の第一象限上にある, すなわち $|\cos(\phi_j)| = \cos(\phi_j), |\sin(\phi_j)| = \sin(\phi_j)$ のとき, 量子状態 (11) は以下のようなになる.

$$\frac{\Gamma}{2\kappa^2} \sum_{j=0}^N \frac{\beta_j}{\mu_j} |u_j\rangle |0\rangle |1\rangle_a^A |1\rangle_a^B + |\text{garbage}\rangle. \quad (12)$$

4. (測定): この量子状態に対して, 第二量子ビットと補助量子ビットを計算基底で測定する. すると確率 $\Omega(1/\kappa^8)$ で 011 が測定され, そのとき量子状態は

$$\frac{1}{\frac{\Gamma}{2\kappa^2} \sqrt{\sum_{j=0}^{N-1} |\beta_j / \mu_j|^2}} \frac{\Gamma}{2\kappa^2} \sum_{j=0}^N \frac{\beta_j}{\mu_j} |u_j\rangle, \quad (13)$$

になる. 上記の量子状態は $|x\rangle$ に等しい. 確実に成功するために, 増幅法 [2] を使い 011 を得る確率を 1 に近づける.

4.2.2 計算量と誤差

この量子アルゴリズム全体の計算量は, 固有値が正の実数の場合のみと同様に, 推定法と増幅法の計算量に依存する. 推定法に必要な計算量は, 固有値の推定誤差を ϵ_λ 以内にしたときを考えると $O(\sqrt{N}/\epsilon_\lambda)$ になる [2]. 増幅法での反復回数は, $O(\kappa^4)$ である. したがって, この量子アルゴリズムの計算量は, 固有値の推定誤差を ϵ_λ 以内にしたとき,

$$O(\kappa^4 \sqrt{N} \log^2 N / \epsilon_\lambda) \quad (14)$$

になる.

5 まとめ

巡回行列の全ての固有値が正の実数または複素平面上で第一象限にある場合に, 量子状態 $|x\rangle$ を求める量子アルゴリズムを提案した. $O(N \log N)$ で実行される古典アルゴリズムと比較して, 提案手法は N に関して高速であることが示せた. 今後の課題として, 固有値が第一象限上にある場合について $|x\rangle$ に関する誤差を解析することや, 第一象限以外の範囲でも量子状態 $|x\rangle$ を求められるようにすることなどが挙げられる.

参考文献

- [1] A.W. Harrow, A. Hassidim, and S. Lloyd, Phys. Rev. Lett. **103**, 150502, (2009).
- [2] G. Brassard, P. Hoyer, M. Mosca, and A. Tapp, AMS New York, Contemp. Math. **305**, pp.53-74, (2002).

公表論文

- [A] S. Takahira, A. Ohashi, T. Sogabe, and T.S. Usuda, Extend. Abst. of AQIS2016, pp.87-88, (2016).
- [B] 高比良宗一, 大橋あすか, 曾我部知広, 白田毅, 第 39 回情報理論とその応用シンポジウム, pp.109-114, (2016).
- [C] 高比良宗一, 大橋あすか, 曾我部知広, 白田毅, 第 14 回情報学ワークショップ, C-07, (2016).
他 3 件 (筆頭著者), 6 件 (第二以降著者)