

博士論文 要旨

Quantum algorithm for matrix functions

(行列関数に対する量子アルゴリズムに関する研究)

情報科学研究科博士後期課程

2017841002 高比良 宗一

Chapter 1. Introduction

プロセッサの性能向上を支えてきた半導体の微細化が限界に近づいたと言われている。そのため微細化に頼らずに、高速に計算をするコンピュータやアルゴリズムの開発が要求されている。この要求に答えるものとして量子力学の原理を利用して計算をする量子コンピュータや、それ上での計算手続きを記述する量子アルゴリズムが期待されている。

量子アルゴリズムの中でも、A.W. Harrow, A. Hassidim, S. Lloyd が提案した線形方程式 $Ax = b$ に対する量子アルゴリズム(HHL アルゴリズム)が注目されている。HHL アルゴリズムは、量子力学の線形代数的な構造を利用することで、 $N \times N$ の行列 A に対して $\text{poly log } N$ の計算量で解ベクトル $x = A^{-1}b$ に対応する量子状態 (その確率振幅が正規化された解ベクトルの成分の値に等しい量子状態) を出力する。線形方程式は計算科学において頻繁に現れる問題であり、HHL アルゴリズムは、数値解析や機械学習分野に対する量子アルゴリズムのサブルーチンとして利用されている。Harrow らはまた、HHL アルゴリズムを、行列関数 $f(A)$ とベクトル b に対する行列-ベクトル積 $f(A)b$ に対応する量子状態を出力する量子アルゴリズムへと、拡張できることを述べている。行列関数の計算も幅広い場面で求められている。例えば、半正定値計画問題や、微分方程式、制御理論、格子量子色力学の分野にて求められている。HHL アルゴリズムおよびそれを拡張した量子アルゴリズムは、幅広い応用が期待できるため、量子コンピュータのキラーアプリケーションとして期待されている。

しかしながら、これらの量子アルゴリズムは、次に挙げる問題点を抱えている。(1): $f(A)b$ に対応する量子状態を計算するには、行列 A はエルミート行列でなければならない。(2): 出力はベクトルに対応する量子状態であり、ベクトルの各成分を表す数値データではない。

本論文では、上記の問題点に対し、それぞれ独自の視点で取り組んでいる。(1)に対しては、Cauchy の積分公式による $f(A)$ の積分表現に注目し、 A がエルミート行列でなくとも $f(A)b$ に対応する量子状態を計算できる量子アルゴリズムを新しく提案している。(2)に対しては、 $f(A) = A^{-1}$ のとき、 $A^{-1}b$ の任意の成分が $\text{poly log } N$ の計算量で推定できる点に注目し、古典コンピュータと併用することで $A^{-1}b$ を計算する量子-古典ハイブリッド計算を提案している。さらに A が 3 重対角行列とその変種である $(k, k+1)$ -3 重対角行列である場合の $A^{-1}b$ の計算を考察している。特に $(k, k+1)$ -3 重対角行列に対する考察では置換行列による二重対角化を導出し、これを用いることで、より高速な $A^{-1}b$ の計算が行えることを述べている。

Chapter 2. Quantum computer

本章は、次章で説明する量子アルゴリズムのために必要な、量子コンピュータ(量子回路モデル)の基礎数理をまとめている。はじめに量子ビットおよび量子ビット列(量子レジスタ)の定義とその性質が述べられている。次に量子ビットに対する測定、加えて量子レジスタの全てに対する測定と、一部に対する測定が論じられている。この章の最後では、量子コンピュータ上で行われる、数量子ビットに働くユニタリ演算が示されている。また、量子アルゴリズムを簡潔に記述できる量子回路図を説明している。

Chapter 3. Basic of quantum algorithms

本章は、次章以降で述べられた量子アルゴリズムや、他の量子アルゴリズムのサブルーチンとして利用される、基本的な量子アルゴリズムを論じている。

はじめに、2つの量子状態間の内積値を計算できる Hadamard テストを説明している。次に、量子 Fourier 変換と、それを利用した位相推定アルゴリズムを述べている。位相推定アルゴリズムは、ユニタリ行列の固有値の推定を目的とした位相推定アルゴリズムであり、HHL アルゴリズム等、多くの量子アルゴリズムのサブルーチンに用いられる。

次に、Grover のアルゴリズムが述べられている。この量子アルゴリズムは、Grover 作用素と呼ばれるユニタリ演算を複数回適用することで探索問題を解く。加えて、位相推定アルゴリズムを用いて、Grover 作用素の固有値を推定し、探索問題の解の個数を推定する量子計数アルゴリズムを説明している。さらに、Grover 作用素の一般化を考え、同様な議論を展開することで、振幅増幅法と振幅推定法をそれぞれ説明している。振幅増幅法は、量子状態の特定の確率振幅を増幅させる量子アルゴリズムで、振幅推定法は、特定の確率振幅を推定できる量子アルゴリズムである。両者とも提案されたアルゴリズムにて用いられる。

この章の最後では、指定された状態の生成手法が2つ述べられている。1つめは回転行列を状態の次元に比例した数だけ使用する方法で、2つめは qRAM と呼ばれる量子レジスタに値を読み込む演算を利用する方法である。両者とも HHL アルゴリズム等に用いられる。

Chapter 4. Known quantum algorithms for linear systems

本章は、Chapter 5,6 で説明するアルゴリズムの主なサブルーチンである線形方程式に対する量子アルゴリズムを紹介している。最初に LCU と呼ばれる一種のフレームワークと量子ウォークを用いた、D.W. Berry, A.M. Childs, R. Kothari により提案された、ハミルトニアンシミュレーションアルゴリズムを紹介している。次に、この量子アルゴリズムと位相推定アルゴリズム、振幅増幅法などを利用した HHL アルゴリズムが説明されている。この章の最後で、LCU と量子ウォークを用いることで、HHL アルゴリズムの誤差に関する計算量を改善した A.M. Childs, R. Kothari, R.D. Somma により提案された量子アルゴリズムを説明している。特に、LCU を使うための適切な設定や具体的な量子回路を紹介している。

Chapter 5. Quantum algorithm for matrix functions by Cauchy's integral formula

本章は、行列関数 $f(A)$ とベクトル b に対して、行列-ベクトル積 $f(A)b$ に対応する量子状態を求める量子アルゴリズムを提案している。 $f(z)$ が実関数かつ A がエルミート行列であるとき、 $f(A)b$ に対応する量子状態を求める量子アルゴリズムが複数提案されている。その一方で、本章で提案する量子アルゴリズムは、 $f(z)$ が原点を中心とする円上で解析的な複素関数かつ A が非エルミート行列の場合でも計算できるもので、既存の量子アルゴリズムが実行できない計算を行える。

はじめに、問題設定とアルゴリズムが使うアイデア、そして提案量子アルゴリズムを使うことで得られる主定理を述べている。次にアイデアの要である近似式を説明している。この近似式は、Cauchy の積分公式により得られる $f(z)$ の積分表現に対して、台形則の適用により複数の線形方程式の解の重み付き和として構成されるもので、高精度に $f(A)$ を近似する。

次に、この近似を用いた $f(A)b$ に対応する量子状態を計算する量子アルゴリズムを説明している。この量子アルゴリズムは、2つのサブルーチンを用いている。1つめは線形方程式に対する量子アルゴリズムであり、2つ目は重みを掛けるためのユニタリ演算である。次の節で、この線形方程式の部分が詳細に説明されている。線形方程式の条件数の上界を導出し、HHL アルゴリズムの適用に関して詳細に議論し、計算量を示している。次の節では重みを掛けるためのユニタリ演算の構成と計算量を示している。

この章の最後で、提案した量子アルゴリズムの計算量と誤差、そして成功確率を、数学的に厳密に論じている。まず誤差解析を、理想的な量子状態と、誤差を含む量子状態それぞれを記述するベクトルを定義し、それらのベクトル間の距離の上界を考え、量子状態間の誤差の上界を導出することで論じている。そして、誤差を抑えるための、アルゴリズムに関わるパラメータに課す条件を述べ、その条件の下での成功確率の下界を導出している。最後に、計算量と誤差評価、成功確率と振幅増幅法を組み合わせ、主定理の証明を述べている。

Chapter 6. Quantum-classical hybrid algorithm for solving linear systems

本章は $f(A) = A^{-1}$ の場合に、 $f(A)b$ に対応する量子状態から、 $f(A)b$ そのもの、つまり線形方程式 $Ax = b$ の解ベクトルを計算することが考察されている。特に、ある成分を量子コンピュータによって推定し、その成分から残りの成分を、古典コンピュータを用いて計算する量子アルゴリズムを提案している。さらに、スプライン補間やADI法にて現れる3重対角行列を係数とする線形方程式について、具体的なアルゴリズムを示している。

はじめに、HHL アルゴリズムと Hadamard テスト、振幅推定法を組み合わせることで、任意の成分が、 $\text{poly log } N$ の計算量で得られることを説明している。次に、解のある成分を得ることが、元の線形方程式 $Ax = b$ を解く問題を、 A の小行列を係数とする線形方程式を解く問題へと変換できることを説明している。この小行列を係数とする線形方程式を解いたときに、量子部分における推定誤差が、解の誤差にどのように影響するのかを論じている。

以上の一般論に加え、具体例として3重対角行列を係数とする線形方程式に対し、古典

コンピュータがシングルコアプロセッサ、マルチプロセッサをもつ場合それぞれで、どのような小行列を導出すれば良いかを考察している。古典シングルコアプロセッサの場合では三角行列を導出することを、マルチプロセッサの場合では、ブロックが 3 重対角行列であるブロック対角行列を導出することを説明している。それぞれの場合で、計算量と誤差を導出し、誤差に関する数値実験の結果を載せている。

Chapter 7. Solving $(k, k + 1)$ -tridiagonal linear systems using bidiagonalization by permutation matrix and hybrid algorithm

本章は、 $(k, k + 1)$ -3 重対角行列の置換行列による二重対角化を議論している。ここで $(k, k + 1)$ -3 重対角行列とは、対角成分と k 番目の下副対角成分、 $k + 1$ 番目の上副対角成分が非ゼロであるような行列であり、3 重対角行列の一般化である k -3 重対角行列の変種である。 k -3 重対角行列は、置換行列によって 3 重対角行列がブロックであるブロック対角行列へ変換できることが知られており、このブロック対角化を経由することで、 k -3 重対角行列 A の逆行列とベクトルの積 $A^{-1}b$ の計算を、ハイブリッド計算により高速化できることが説明されている。そこで本章では、対角化と同様な二重対角化が考察されている。

はじめに、二重対角化のための必要条件を述べている。次に $(k, k + 1)$ -3 重対角行列を二重対角化する置換行列の存在を仮定し、二重対角化後の行列構造を考察している。そして、その行列構造となるための置換行列の構造を導出している。さらに、その置換行列が二重対角化することを証明し、定理としてまとめている。この系として、元の構造では非自明である $(k, k + 1)$ -3 重対角行列の固有値と行列式の解析的な表現を示している。

この章の最後では、 $(k, k + 1)$ -3 重対角行列 A の逆行列とベクトルの積 $A^{-1}b$ の計算を、導出した二重対角化を経由して行う量子-古典ハイブリッド計算が述べられており、マルチプロセッサをもつ古典コンピュータを用いることにより、高速化できることが説明されている。

Chapter 8. Conclusion

本論文では、Cauchy の積分公式と台形則を使うことで、行列関数が線形方程式の解の重み付き和として表現できることに着目し、HHL アルゴリズムと組み合わせることで、 A がエルミート行列でなくとも、 $f(A)b$ に対応する量子状態を計算する量子アルゴリズムを提案している。この量子アルゴリズムは、従来行えないタスクを実行でき、他の量子アルゴリズムのサブルーチンとして利用されることが期待できる。加えて、 $f(A) = A^{-1}$ のとき、量子状態から対応するベクトルの全ての成分を計算する、量子-古典ハイブリッド計算が提案されている。特に、行列 A が 3 重対角行列であるとき、並列計算機と組み合わせることで、効率的に $A^{-1}b$ の計算が行えることが説明されている。また、3 重対角行列から派生した $(k, k + 1)$ -3 重対角行列の置換行列による二重対角化を論じている。この二重対角化と量子-古典ハイブリッド計算を利用することで、 $(k, k + 1)$ -3 重対角行列を係数とする線形方程式を、より高速に解くことが期待できる。