

HHL アルゴリズムで連立 1 次方程式を解く

銭京華 (指導教員：工藤和恵)

1 はじめに

連立 1 次方程式は多くの分野で応用されているもので、様々な現象は微分方程式で表せる。これを離散化することで連立 1 次方程式に変換することができる。コンピュータの登場により、手計算とは比べ物にならないほど大きなサイズであっても解を求めることができるようになった。さらに、現在発展が期待されているゲート式量子コンピュータでは Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL) アルゴリズムによって連立 1 次方程式が解けることが知られている [1]。HHL アルゴリズムは誤り訂正機能付きゲート式量子コンピュータで実行できる量子アルゴリズムである。理論的な見積もりでは、HHL アルゴリズムは古典アルゴリズムより行列のサイズについて古典コンピュータより指数加速して計算できる [2]。行列のサイズが N のとき、 N に関する計算量が古典アルゴリズムで $\mathcal{O}(N)$ 、HHL アルゴリズムで $\mathcal{O}(\text{poly}(\log N))$ である。そこで HHL アルゴリズムを用いて実際に連立 1 次方程式を解いた。

2 HHL アルゴリズム

HHL アルゴリズムは行列 A とベクトル $|\mathbf{x}\rangle, |\mathbf{b}\rangle$ が $A|\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{b}\rangle$ という関係にあるとき $|\mathbf{x}\rangle = A^{-1}|\mathbf{b}\rangle$ を求めるアルゴリズムである。 $|\mathbf{x}\rangle, |\mathbf{b}\rangle$ はそれぞれ

$$|\mathbf{x}\rangle = \frac{\sum_i x_i |i\rangle}{\sqrt{\sum_i |x_i|^2}}, \quad |\mathbf{b}\rangle = \frac{\sum_i b_i |i\rangle}{\sqrt{\sum_i |b_i|^2}} \quad (1)$$

で与えられる。 x_i, b_i はベクトル $|\mathbf{x}\rangle, |\mathbf{b}\rangle$ の $i = 1, 2, \dots, N$ に対応する成分で、 $|i\rangle$ は i の 2 進数表示に対する計算基底である。

図 1 は HHL アルゴリズムの回路図である。 HHL ア

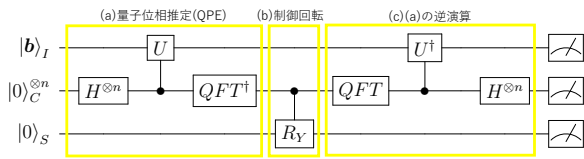


図 1: HHL アルゴリズムの回路図

ルゴリズムは (a) 量子位相推定, (b) 制御回転, (c) 量子位相推定の逆演算からなる。図 1 の $|\cdot\rangle_S$ には 1 量子ビット, $|\cdot\rangle_C$ と $|\cdot\rangle_I$ には問題によって適切になるような数の量子ビットを必要とする。

2.1 問題設定

HHL アルゴリズムを使用し、以下の連立 1 次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の解 \mathbf{x} を求めた。

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{bmatrix} \quad (2)$$

A の固有値と固有ベクトルはそれぞれ

$$\begin{aligned} \lambda_1 = \frac{2}{3} \quad \text{のとき} \quad \mathbf{u}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\ \lambda_2 = \frac{4}{3} \quad \text{のとき} \quad \mathbf{u}_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3)$$

A には逆行列 A^{-1} が存在するので、解 \mathbf{x} は一意に求めることができ、

$$\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b} = \begin{bmatrix} \frac{9}{8} \cos \theta + \frac{3}{8} \sin \theta \\ \frac{3}{8} \cos \theta + \frac{9}{8} \sin \theta \end{bmatrix} \quad (4)$$

である。パラメータ θ は $\theta = 0, \pi/12, \pi/6, \pi/4$ でそれぞれ実行した。

A の固有値 $2/3, 4/3$ は量子ビットでそれぞれ $|01\rangle, |10\rangle$ と 2 量子ビットに格納できる。そのため $|\cdot\rangle_C$ に 2 量子ビット用意する。 $|\mathbf{b}\rangle$ は 2 成分なので、 $|\cdot\rangle_I$ に 1 量子ビット用意する。

2.2 初期化と量子位相推定

まず (1) 式を満たす量子状態 $|\mathbf{b}\rangle$ を用意する。入力状態に用いる量子ビットに添字 I をつけて $|\mathbf{b}\rangle_I$ とする。この問題では \mathbf{b} がすでに規格化されているため、 $\mathbf{b} = |\mathbf{b}\rangle$ である。他の量子ビットは 0 に初期化する。

入力状態を用意した後に量子位相推定を行う。量子位相推定はユニタリ行列 $U = e^{iAt}$ の固有値 $e^{i\lambda}$ の位相 λ を 2 つの量子ビット $|\cdot\rangle_C$ に格納するアルゴリズムである。 2 量子ビットある $|\cdot\rangle_C$ にそれぞれ H ゲートを作用させる。

H ゲートは次式で表されるゲートである。

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (5)$$

初期状態 $|0\rangle$ から均等な重ね合わせ状態 $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ を作ることができる。

次に $|\cdot\rangle_C$ にあるビットを制御ビット, $|\cdot\rangle_I$ にあるビットを標的ビットとして制御ユニタリ演算を作用させる。制御ユニタリ演算は制御ビットが 1 のとき標的ビットにユニタリゲート U を作用させるものである。

用いるユニタリ行列 U は $U = e^{iAt}$ で、 t はパラメータである。 $t = 3/8$ にとると、 A の固有値を $|01\rangle, |10\rangle$ と 2 量子ビットで丸め誤差なく格納できる。 $|\cdot\rangle_C$ の 1 つ目にあるビットが制御ビットのとき $U^{2^0} = U$, 2 つ目のとき $U^{2^1} = U^2$ を $|\cdot\rangle_I$ にあるビットに作用させる。ここで $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle$ は A の固有ベクトル $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ を表現したケットとする。今回は $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ が規格化されているので、 $|\mathbf{u}_1\rangle = \mathbf{u}_1, |\mathbf{u}_2\rangle = \mathbf{u}_2$ である。 $|\mathbf{b}\rangle$ は A の固有ベクトル $|\mathbf{u}_1\rangle, |\mathbf{u}_2\rangle$ を用いて $|\mathbf{b}\rangle = b_1|\mathbf{u}_1\rangle + b_2|\mathbf{u}_2\rangle$ と展開できる (b_1, b_2 は係数で、それぞれ $b_1 = (\cos \theta + \sin \theta)/\sqrt{2}, b_2 = (\cos \theta - \sin \theta)/\sqrt{2}$)。 $U|\mathbf{u}_k\rangle = e^{i\lambda_k t}|\mathbf{u}_k\rangle$ (ただし $k = 1, 2$) である。位相キックバックにより、 $|\cdot\rangle_C$ の k 番目のビットは $e^{i\lambda_k t 2^k}$ という位相が得られる。

$|\cdot\rangle_C$ の状態が量子フーリエ変換の結果と同じ形をしているため、逆量子フーリエ変換を加える。これによって $|\cdot\rangle_C$ と $|\cdot\rangle_I$ の状態は

$$|01\rangle_C |\mathbf{u}_1\rangle_I + |10\rangle_C |\mathbf{u}_2\rangle_I \quad (6)$$

となる。

2.3 制御回転

次に制御回転を $|\cdot\rangle_S$ にある量子ビットに加える。

$$\sum_{k=1}^2 b_k |\mathbf{u}_k\rangle_I |\tilde{\lambda}_k\rangle_C \left(\sqrt{1 - \frac{c^2}{\lambda_k^2}} |0\rangle_S + \frac{c}{\lambda_k} |1\rangle_S \right) \quad (7)$$

全体の状態が (7) 式になるように R_Y ゲートを作用させる ($\tilde{\lambda}_k$ は λ の 2 進数表示である)。 c はパラメータで、固有値の絶対値 $|\lambda_k|$ で最小のものより小さく取る必要がある。今回は $c = 1/5$ にした。

2.4 量子位相推定の逆演算と測定

最後に量子位相推定の逆演算を行い、 $|\cdot\rangle_C$ にあるビットを初期状態 $|00\rangle$ に戻す。よって量子ビットは

$$\sum_{k=1}^2 b_k |\mathbf{u}_k\rangle_I |00\rangle_C \left(\sqrt{1 - \frac{c^2}{\lambda_k^2}} |0\rangle_S + \frac{c}{\lambda_k} |1\rangle_S \right) \quad (8)$$

という状態になる。

量子ビットに加えた操作は以上である。この後に $|\cdot\rangle_S$ の量子ビットを測定する。このとき $|\cdot\rangle_S$ 以外の量子ビットは $|\cdot\rangle_S$ が $|1\rangle$ のとき

$$\sum_{k=1}^2 b_k |\mathbf{u}_k\rangle_I \frac{c}{\lambda_k} |00\rangle_C \quad (9)$$

という状態になっている。量子位相推定をした後 $|\cdot\rangle_I$ は $|00\rangle$ になるので、このビットも射影測定する。測定されずに残っている $|\cdot\rangle_I$ の状態は

$$\sum_{k=1}^2 c \cdot \frac{b_k}{\lambda_k} |\mathbf{u}_k\rangle_I \quad (10)$$

である。

A は固有値、固有ベクトルを用いると $A = \sum_k \lambda_k \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k^\dagger$ と固有値分解できる。ゆえに $A^{-1} = \sum_k (\lambda_k)^{-1} \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k^\dagger$, $A^{-1} \mathbf{b} = \sum_k b_k (\lambda_k)^{-1} \mathbf{u}_k$ である。以上から (10) 式は c の定数倍を除いて $|\mathbf{x}\rangle$ と等しいので、方程式の解を求められる。

3 結果

(10) 式の状態を作り測定することを、それぞれの θ について Qiskit1.0 のシミュレータで 10000 回実行した。その結果得られた頻度分布が図 2 である。

図 2 の横軸は得られた計算基底のビット列、縦軸は 10000 回のうちそのビット列を得た割合を表している。左から I ビット 1 つ、 C ビット 2 つ、 S ビット 1 つが 0 または 1 であることを表している。解を求めるのに必要なのは $|\cdot\rangle_S$ が $|1\rangle$ のときのみなので、図 2 の状態ケットのうち一番右が $|1\rangle$ のものだけを見る。測定結果の理論値は (8) 式の係数の 2 乗である。そのため $|\cdot\rangle_I$ が 0、

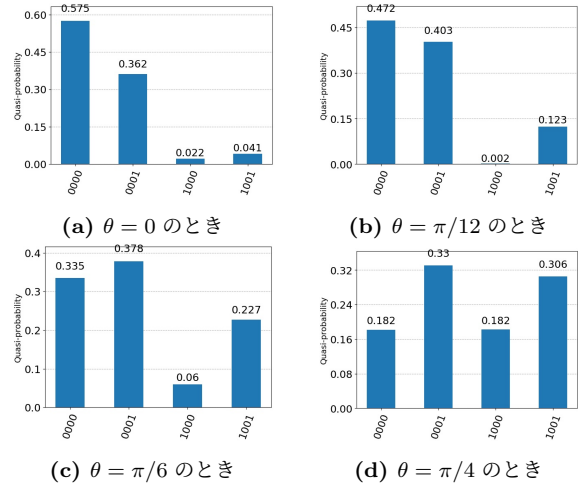


図 2: HHL アルゴリズムの実行結果

$|1\rangle$ のとき両方について測定結果の平方根を取ったものから解 \mathbf{x} に平行なベクトル $\hat{\mathbf{x}}$ を作った。ここから $\hat{\mathbf{x}}$ の大きさが解 \mathbf{x} と同じになるよう操作を加えた。今回は解 \mathbf{x} が簡単に求められるため、 $\hat{\mathbf{x}}$ の 0 番目の成分 \hat{x}_0 と \mathbf{x} の 0 番目の成分 x_0 の比 x_0/\hat{x}_0 を求めてこれを $\hat{\mathbf{x}}$ に掛けた。

(2) 式を満たす解 \mathbf{x} を求めた結果は以下の表 1 のようになった。割り切れないものは小数第三位で四捨五入した。

表 1: HHL 解と正しい解

θ [rad]	HHL 解	正しい解
0	1.125	1.125
	0.380	0.375
$\pi/12$	1.184	1.184
	0.654	0.653
$\pi/6$	1.162	1.162
	0.900	0.887
$\pi/4$	1.061	1.061
	1.020	1.061

4 まとめ

本研究では HHL アルゴリズムをシミュレータ上で実行し、2次元の連立1次方程式を解いた。結果が正しい解から大幅に外れることはなかった。

行列 A を変えることが今後の課題である。 C ビットに格納される固有値が $|01\rangle, |11\rangle$ と表される場合などを正しく実装したい。

参考文献

- [1] A. Harrow, A. Hassidim, and S. Lloyd, Quantum algorithm for linear systems of equations, *Physical Review Letters* **103**, 150502 (2009).
- [2] QunaSys, 7-2. Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL) アルゴリズム, <https://dojo.qulacs.org/ja/latest/index.html> (2025年1月20日アクセス)