指数パウリ行列の構成方法

鴨下正彦

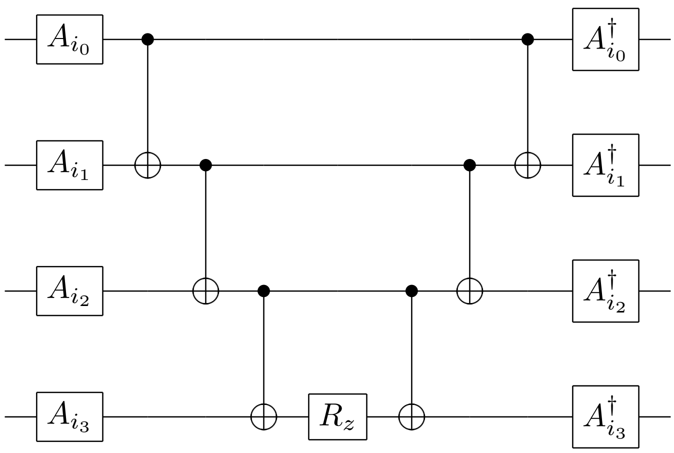
回転の演算子を次式のように定義する．

$$R^n_{x,y,z}(t) \equiv \exp\left(i \underbrace{\sigma_{x,y,z} \otimes \sigma \otimes \cdots \otimes \sigma}_{n\ \text{個}} t \right) \tag{1}$$

回転の演算子を量子回路で表現するための 2 つの方法を示す．1 つ目の方法は一般的なパウリ行列のテンソル積について成り立ち，2 つ目の方法は σ_x を 2 つ以上含まないテンソル積についてのみ成り立つ．以下では，σ_i $(i = x, y, z)$ を i の大文字で表記することがある (e.g. $\sigma_x = X$).

1　方法 1　一般的な場合

回転演算子を構築するための量子回路を



のようにして構築することができる．演算子 A_i は，ビットに作用する演算子が $i = x$ であるとき $H(= \frac{1}{\sqrt{2}}(X + Z))$，$y$ であるとき $R_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(I + iX)$，$z$ であるとき I である．

まず，ビットが 1 つのときは，

$$AR_z(t)A^\dagger = \begin{cases} \frac{1}{2}(Z + X)e^{iZt}(Z + X) = e^{iXt} \\ \frac{1}{2}(I + iX)e^{iZt}(I - iX) = e^{iYt} \\ e^{iZt} \end{cases} \tag{2}$$

が成り立つ．よって 1 ビットのときは CNOT ゲートを使わず SQG のみで回転演算子を

作ることができる．ちなみに

$$AXR_z(t)XA^\dagger = AR_z(-t)A^\dagger = \begin{cases} \frac{1}{2}(Z+X)Xe^{iZt}X(Z+X) = e^{-iXt} \\ \frac{1}{2}(I+iX)Xe^{iZt}X(I-iX) = e^{-iYt} \\ Xe^{iZt}X = e^{-iZt} \end{cases} \tag{3}$$

である．

次に，ビットが 2 つのときと 3 つのときの場合の計算をすることで，ビットが n こあるときをどのように計算していくかの見通しをよくする．まず，ビットが 2 つのときは，

$$\begin{aligned} &A_{i_1}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_1}^\dagger \otimes A_{i_0}R_zA_{i_0}^\dagger + A_{i_1}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_1}^\dagger \otimes A_{i_0}XR_zXA_{i_0}^\dagger \\ &A_{i_1}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_1}^\dagger \otimes \exp(i\sigma_0 t) + A_{i_1}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_1}^\dagger \otimes \exp(-i\sigma_0 t) \\ =&A_{i_1}(\left|0\right\rangle\left\langle 1\right| + \left|1\right\rangle\left\langle 1\right|)A_{i_1}^\dagger \otimes I\cos t + iA_{i_1}(\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| - \left|1\right\rangle\left\langle 1\right|)A_{i_1}^\dagger \otimes \sigma_{i_0}\sin t \\ =&I \otimes I\cos t + i\sigma_{i_1} \otimes \sigma_{i_0}\sin t \\ =&\exp\left(i\sigma_{i_1} \otimes \sigma_{i_0} t\right) \end{aligned} \tag{4}$$

となる．ビットが 3 つのとき，量子回路が表しているユニタリー行列は，

$$\begin{aligned} &A_{i_2}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_2}^\dagger \otimes A_{i_1}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_1}^\dagger \otimes A_{i_0}R_zA_{i_0}^\dagger \\ &+A_{i_2}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_2}^\dagger \otimes A_{i_1}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_1}^\dagger \otimes A_{i_0}XR_zXA_{i_0}^\dagger \\ &+A_{i_2}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_2}^\dagger \otimes A_{i_1}X\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| XA_{i_1}^\dagger \otimes A_{i_0}R_zA_{i_0}^\dagger \\ &+A_{i_2}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_2}^\dagger \otimes A_{i_1}X\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| XA_{i_1}^\dagger \otimes A_{i_0}XR_zXA_{i_0}^\dagger \\ =&A_{i_2}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_2}^\dagger \otimes A_{i_1}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_1}^\dagger \otimes A_{i_0}R_zA_{i_0}^\dagger \\ &+A_{i_2}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_2}^\dagger \otimes A_{i_1}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_1}^\dagger \otimes A_{i_0}XR_zXA_{i_0}^\dagger \\ &+A_{i_2}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_2}^\dagger \otimes A_{i_1}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_1}^\dagger \otimes A_{i_0}R_zA_{i_0}^\dagger \\ &+A_{i_2}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_2}^\dagger \otimes A_{i_1}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_1}^\dagger \otimes A_{i_0}XR_zXA_{i_0}^\dagger \\ =&A_{i_2}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_2}^\dagger \otimes \exp\left(i\sigma_{i_1} \otimes \sigma_{i_0} t\right) + A_{i_2}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_2}^\dagger \otimes \exp\left(-i\sigma_{i_1} \otimes \sigma_{i_0} t\right) \\ =&I\cos t + i(\sigma_{i_2} \otimes \sigma_{i_1} \otimes \sigma_{i_0})\sin t \\ =&\exp\left(i\sigma_{i_2} \otimes \sigma_{i_1} \otimes \sigma_{i_0} t\right) \end{aligned} \tag{5}$$

となる．このことから，ビットが $n+1$ こあるときの量子回路はビットが n こあるときの回転行列を用いて，

$$\begin{aligned} &A_{i_n}\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A_{i_n}^\dagger \otimes \exp\left(i\sigma_{i_{n-1}} \otimes \cdots \otimes \sigma_{i_0} t\right) \\ &+A_{i_n}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A_{i_n}^\dagger \otimes \exp\left(-i\sigma_{i_{n-1}} \otimes \cdots \otimes \sigma_{i_0} t\right) \end{aligned} \tag{6}$$

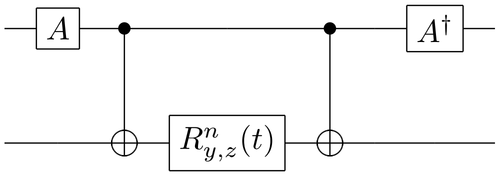
のようになることが予想され，実際にこれを帰納的に示すことができる．式 (6) の右辺を計算すると，

$$\exp\left(i\sigma_{i_n} \otimes \sigma_{i_{n-1}} \otimes \cdots \otimes \sigma_{i_0} t\right) \tag{7}$$

となる．

2　方法 2　限定的 (X についての制約あり．)

Y, Z からなる回転演算子を構築するための量子回路は，



のようになる．

コントロールビット，ターゲットビットに σ_i が作用するとき，σ_i のことをコントロール，ターゲットのパウリ行列と呼ぶことにすると，演算子 A はコントロールのパウリ行列が X であるとき $H(=\frac{1}{\sqrt{2}}(X+Z))$，$Y$ であるとき $R_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(I+iX)$，$Z$ であるとき I である．

量子回路がこのようにしてかけるのは，方法 1 で CNOT の X と $A_{y,z}$ が交換することから自明ではあるが，方法 1 の結果を使わずに計算してみる．

2.1　方針

量子回路が表しているユニタリー行列は次式のようになる．

$$\begin{aligned}
&A\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A^\dagger \otimes R^n_{y,z}(t) + A\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A^\dagger \otimes X R^n_{y,z}(t) X \\
=&A\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A^\dagger \otimes (I^{\otimes n}\cos t + i\sigma^{\otimes n}_{y,z}\sin t) + A\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A^\dagger \otimes (I^{\otimes n}\cos t - i\sigma^{\otimes n}_{y,z}\sin t)
\end{aligned} \tag{8}$$

式 (8) を用いて，A を適宜変えていくときと，ターゲット以降のパウリ行列を変えずにコントロールのパウリ行列が新たに適切に定まること示す．

2.2　証明

式 (8) を使う．

$$\begin{aligned}
&A\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A^\dagger \otimes R^n_{y,z}(t) + A\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A^\dagger \otimes X_1 R^n_{y,z}(t) X_1 \\
=&A\left|0\right\rangle\left\langle 0\right| A^\dagger \otimes (I^{\otimes n}\cos t + i\sigma^{\otimes n}_{y,z}\sin t) + A\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| A^\dagger \otimes (I^{\otimes n}\cos t - i\sigma^{\otimes n}_{y,z}\sin t)
\end{aligned} \tag{9}$$

$A = H$ のとき，

$$\begin{aligned}
&=\left|+\right\rangle\left\langle +\right| \otimes (I^{\otimes n}\cos t + i\sigma^{\otimes n}_{y,z}\sin t) + \left|-\right\rangle\left\langle -\right| \otimes (I^{\otimes n}\cos t - i\sigma^{\otimes n}_{y,z}\sin t) \\
&=I^{\otimes n+1}\cos t + i\left(\sigma_x \otimes \sigma^{\otimes n}_{y,z}\right)\sin t \\
&=\exp\left(i\sigma_x \otimes \underbrace{\sigma_{y,z} \otimes \cdots \otimes \sigma}_{n\text{ 個}}\, t \right)
\end{aligned} \tag{10}$$

$A=\frac{1}{\sqrt{2}}(I+\sigma_x)$ のとき,

$$
\begin{aligned}
&=\frac{1}{2}\left(I+\sigma_y\right)\otimes\left(I^{\otimes n}\cos t+i\sigma_{y,z}^{\otimes n}\sin t\right)+\frac{1}{2}\left(I-\sigma_y\right)\otimes\left(I^{\otimes n}\cos t-i\sigma_{y,z}^{\otimes n}\sin t\right)\\
&=I^{\otimes n+1}\cos t+i\left(\sigma_y\otimes\sigma_{y,z}^{\otimes n}\right)\sin t\\
&=\exp\left(i\sigma_y\otimes\underbrace{\sigma_{y,z}\otimes\cdots\otimes\sigma}_{n\text{ 個}}t\right)
\end{aligned}
\tag{11}
$$

$A=I$ のとき,

$$
\begin{aligned}
&=I^{\otimes n+1}\cos t+i\left(\sigma_z\otimes\sigma_{y,z}^{\otimes n}\right)\sin t\\
&=\exp\left(i\sigma_z\otimes\underbrace{\sigma_{y,z}\otimes\cdots\otimes\sigma_{y,z}}_{n\text{ 個}}t\right)
\end{aligned}
\tag{12}
$$

式 (10)(11)(12) により回転行列に演算子 A と CNOT を作用させる上の量子回路により

$$
\exp\left(i\sigma\otimes\underbrace{\sigma_{y,z}\otimes\cdots\otimes\sigma_{y,z}}_{n\text{ 個}}t\right)
\tag{13}
$$

を構築することができることがわかった.

X に関する制約があるのは CNOT による X と $A_x=H$ が交換しないためである.