

初期状態が不完全なグローバーのアルゴリズムの振る舞いについて

9BSP1118 村岡海人

2022 年 12 月 31 日

目次

1	はじめに	2
1.1	研究の背景	2
1.2	研究の目的	2
1.3	本論文の構成	2
2	基本的内容	2
2.1	量子ビット	2
2.1.1	単一量子ビット	2
2.1.2	多量子ビット	4
2.2	量子計算	4
2.2.1	単一量子ビットゲート	4
2.2.2	1 量子ビットの任意の回転	5
2.3	量子アルゴリズム	6

1 はじめに

1.1 研究の背景

量子コンピュータとは、量子力学を利用して計算を行うコンピュータである。この量子コンピュータで行う計算を量子計算と呼び、量子計算におけるアルゴリズムのことを量子アルゴリズムと呼ぶ。例えば、多項式時間で整数を因数分解するショアのアルゴリズムや、整列化されていないデータベースからデータベースから特定のデータを探索するグローバーのアルゴリズムがある。

1.2 研究の目的

従来の計算機が論理演算から構成されているのと同様、量子計算も量子演算から構成されており、この量子演算は、時間に依存するシュレディンガー方程式から記述することができる。量子計算を行う際に、ハミルトニアンや時間がズレてしまうと実現したい操作からズレた操作を行うことになり、アルゴリズム自体の出力に対するエラーになってしまう。本研究では、初期状態を準備する操作が不完全な場合に、グローバーのアルゴリズムがどれだけ機能するか調べることを目的とした。

1.3 本論文の構成

2 基本的内容

2.1 量子ビット

ビットは古典計算と古典情報の基本概念である。量子計算と量子情報は類似の概念である量子ビットの上に構築される。

2.1.1 単一量子ビット

まず、量子ビットの説明をする。古典ビットに1あるいは0の状態に対応した、状態 $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ と $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ がある。ここで、量子状態を表すために、ケット記号 ($| \rangle$) を使ったディラックの記法を用意した。量子ビットと古典ビットの違いは、量子ビットは $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の重ね合わせ状態を取り得ることである。これは次のように $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の線型結合として、

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (2.1)$$

と表される。ここで、 α, β は複素数であり、複素確率振幅と呼ぶ。量子ビットの状態は2次元複素ベクトル空間のベクトルで表される。特に $|0\rangle$ と $|1\rangle$ 計算基底状態と呼び、この2次元複素ベクトル空間の正規直交基底を構成する。

古典計算では、古典ビットを調べてそれが0, 1のいずれの状態にあるかを定めることができる。例えば、コンピュータがメモリの内容を取り出す時にいつもこれを行なっている。量子ビットは量子ビットを調べてその量子状態、つまり、 α と β の値を決めることはできない。量子ビットに対して $|0\rangle$ と $|1\rangle$ のいずれの状態にあるかを調べる測定を行うと、確率 $|\alpha|^2$ で $|0\rangle$ 、確率 $|\beta|^2$ で $|1\rangle$ が得られる。全確率の和は1なので、 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ である。幾何学的解釈ではこれは量子ビットの状態が長さ1に正規化される条件である。したがって、一般的に量子ビットの状態は2次元複素ベクトル空間の単位ベクトルを表す。

量子ビットは自由度が2の多くの系で実現されている。例えば、核スピン、単一光子の2つの異なる偏光、単一原子における電子軌道の2つの状態などがある。原子モデルで電子は基底状態、または励起状態に存在しそれぞれを $|0\rangle, |1\rangle$ と呼ぶ。

次のような幾何学的表現が量子ビットを考える上で有用な描像である。 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ であるので、式 (2.1) を次のように書き換える。

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \quad (2.2)$$

ここで、 θ, φ は実数である。図に示すように、 θ, φ は3次元単位球面上の点を定義する。この球面をブロッホ球と呼ぶ。

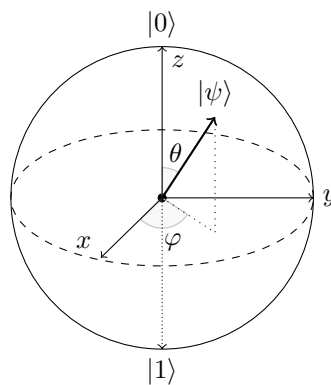


図1 量子ビットのブロッホ球表示

これは単一量子ビット状態を視覚化する便利な方法である。単一量子ビットの操作はブロッホ球上の描像で記述できる。しかし、ブロッホ球は多量子ビットに対して一般化できないことに注意する。

2.1.2 多量子ビット

多量子ビットの状態について考えてみる。簡単のため、2 個の量子ビットがあるとする。これが古典ビットならば 4 つの取り得る状態 00, 01, 10, 11 がある。これに対して 2 個の量子ビットの系には $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ で表される計算基底状態がある。2 個の量子ビットを記述する状態ベクトルは、

$$|\psi\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle \quad (2.3)$$

で与えられる。ここで、 $\alpha_{00}, \alpha_{01}, \alpha_{10}, \alpha_{11}$ はそれぞれの基底の複素確率振幅である。単一量子ビットの場合と同様に、測定結果 $x (= 00, 01, 10, 11)$ は確率 $|\alpha_x|^2$ で生じ、測定後の量子ビットの状態は $|x\rangle$ となる。確率の合計が 1 になる条件は正規化状態 $\sum_{x \in \{0,1\}^2} |\alpha_x|^2 = 1$ で表される。ここで、記号「 $\{0,1\}^2$ 」は「各文字が 0 または 1 であり、長さ 2 の記号列の集合」を意味する。

一般に n 個の量子ビットを考えると、この系の計算基底は $|x_1 x_2 \cdots x_n\rangle$ の形をしており、この系の量子状態は 2^n 個の振幅で規定される。ここで、 $x = x_1 x_2 \cdots x_n$ は、 $x \in \{0,1\}^n$ であり、 $x \in \{0,1\}^n$ は各文字が 0 または 1 であり、長さ n の記号列の集合を表す。

2.2 量子計算

2.2.1 単一量子ビットゲート

量子ビットに対する論理ゲートを説明するために、まず古典コンピュータについて考える。古典コンピュータ回路は配線と論理ゲートより構成される。配線は回路中の情報を運び、論理ゲートは情報を変換して操作する。例えば、古典的単一ビット論理ゲートである NOT ゲートを考える。NOT ゲートの働きは表に示す真理値表で定義され、 $0 \rightarrow 1$ 及び $1 \rightarrow 0$ つまり、状態 0, 1 の入れ替えが行われる。真理値表とは入力と出力の対応を表すための表である。

量子ビットに対しても同様に NOT ゲートを定義することができる。量子ビットへの操作は線形変換であり、単一量子ビットに作用する量子ゲートは 2×2 の行列で記述できる。特に量子ビットに対する NOT ゲートは次のように定義される行列で表される。

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

この行列のことを X ゲートと呼ぶ。また、量子状態 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ をベクトル表記で次のように記述する。

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

ここで、上の要素は $|0\rangle$ に対する振幅、下の要素は $|1\rangle$ に対する振幅に相当する。量子 NOT ゲートの出力は、

$$X \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

で与えられる。この X ゲートはブラケット表記で次のようにも記述できる。

$$X = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \quad (2.7)$$

量子ゲートの行列に対する制約について議論する。量子状態 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ に対して正規化条件 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ が必要であることを考慮すると、正規化条件はゲート作用後の量子状態 $|\psi'\rangle = \alpha'|0\rangle + \beta'|1\rangle$ に対しても成立しなければならない。この条件を満たすのは、単一量子ビットゲートを記述する行列 U がユニタリ、つまり $U^\dagger U = I$ を満たす場合である。ここで、 U^\dagger は U のエルミート共役、 I は 2×2 の単位行列である。

単一量子ビットに対する量子ゲートとして、後で用いる 3 つのゲートを導入する。Z ゲートは、

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \quad (2.8)$$

と定義される。Y ゲートは、

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = -i|1\rangle\langle 0| + i|0\rangle\langle 1| \quad (2.9)$$

と定義される。アダマールゲートは、

$$H \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 1|) \quad (2.10)$$

と定義される。アダマールゲートを $|0\rangle$ または $|1\rangle$ に作用させると、

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \quad (2.11)$$

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \quad (2.12)$$

に変換される。これらは簡単な代数計算で、 $X^2 = Y^2 = Z^2 = H^2 = I$ とわかる。

2.2.2 1 量子ビットの任意の回転

任意のユニタリ回転ゲートを作成する。 x, y, z 軸周りに 1 量子ビットを回転させる行列は、次のようにパウリ演算子 X, Y, Z から求められる。

$$R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2} = \cos \frac{\theta}{2} I - i \sin \frac{\theta}{2} X = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

$$R_y(\theta) = e^{-i\theta Y/2} = \cos \frac{\theta}{2} I - i \sin \frac{\theta}{2} Y = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

$$R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2} = \cos \frac{\theta}{2} I - i \sin \frac{\theta}{2} Y = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

そして、1量子ビットの任意のユニタリ回転ゲートは、これらの $Z-Y$ 回転行列で分解できる。実数 $\gamma, \phi, \theta, \lambda$ を用いて、

$$U(\theta, \phi, \lambda) = e^{i\gamma} R_z(\phi) R_y(\theta) R_z(\lambda) = e^{i(\gamma - \frac{\theta}{2} - \frac{\phi}{2})} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -e^{i\lambda} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} & e^{i(\lambda+\phi)} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

上記で用いられる $e^{i(\gamma - \frac{\theta}{2} - \frac{\phi}{2})}$ は、全体位相と呼ばれ、ブロッホ球上の回転操作や回転角に直接関わることなく、また実際に観測される量ではないため、実際の任意の回転行列は、

$$U(\theta, \phi, \lambda) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -e^{i\lambda} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} & e^{i(\lambda+\phi)} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

となる。

2.3 量子アルゴリズム

ここでは量子アルゴリズムのことについて記述する。

量子アルゴリズムというのは、