1 複素数とは

複素数 実数 √7 √3 4i 有理数 2+√3i -23 2 1.5 i 8+5i

2 虚数と虚数単位

2乗して-1になる数を「虚数単位i」と定義する。 虚数単位iとは

$$i^2 = -1$$
 $\pm t$ $i = \sqrt{-1}$

を満たす数であり、iを含む数を虚数という。

3 複素数の定義

実数a、bと虚数単位iを用いて

$$a + bi$$

と表せる数を複素数という。 aを「実部」、bを「虚部」と呼ぶ

4 複素共役

複素共役、または共役複素数という。 複素数a + biに対して、a - biのことを共役な複素数という。 (ただし、a、bは実数)

例えば、2 + 3*i*に対して共役な複素数は2-3*i*

5 オイラーの公式

オイラーの公式とは、1740年頃にオイラーにより証明された等式である。 左辺はネイピア数(自然対数を底する複素指数関数)で、iは虚部、右 辺のcos、sinは三角関数(正弦、余弦)を意味する。

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

ここで、指数関数 e^x のマクローリン展開を複素数に拡張し、 $\theta = \pi$ を代入する $\cos \theta + i \sin \theta = 1$ となり、

$$e^{i\pi} = -1$$

が成り立ち、これをオイラーの等式という。神秘的な3つの数i、e、πを組み合わせた等式で、美しい等式といわれることが多い。

6 参考文献

複素数とは?公式やiの2乗の意味、計算問題の解き方 | 受験辞典 (univ-juken.com)

共役複素数の覚えておくべき性質 | 高校数学の美しい物語 (manabitimes.jp) オイラーの公式 | 三角関数・複素指数関数・虚数が等式として集約されるまでの物語 - 空間情報クラブ | 株式会社インフォマティクス (informatix.co.jp)

1 複素数の四則演算の公式

複素数には以下の法則が成り立つ。 a、b、c、dを実数とする。

複素数の加法(足し算)

$$(a + bi) + (c + di) = (a + c) + (b + d)i$$

複素数の減法(引き算)

$$(a + bi) - (c + di) = (a - c) + (b - d)i$$

複素数の乗法(掛け算)

$$(a+bi)(c+di) = (ac-bd) + (ad+bc)i$$

2 共役複素数の基本的な性質

複素数zの共役複素数をzと書くことが多い。 共役複素数は以下のような性質がある。

任意の複素数zに対して、 $\overline{z} = z$ 「共役」を2回とるともとに戻る

任意の複素数z、wに対して、 $\overline{z+w} = \overline{z} + \overline{w}$ 「共役」と「足し算」の順序は交換できる同様に、引き算、掛け算、割り算も成り立つ

任意の複素数a + biに対して、 $z\bar{z}$ は0以上の実数

例えば、2+3iとその共役な複素数2-3iの積は、 $(2+3i)(2-3i)=2^2+3^2=13$ となる。 より一般的にa+biとa-biの積は、 $(a+bi)(a-bi)=a^2+b^2\geq 0$ となる。 $\sqrt{a^2+b^2}$ はz=a+biの絶対値と呼ばれ|z|と書くことが多い。 つまり、 $z\bar{z}=|z|^2$ が成り立つ。

3 参考文献

複素数とは?公式やiの2乗の意味、計算問題の解き方 | 受験辞典 (univ-juken.com) 共役複素数の覚えておくべき性質 | 高校数学の美しい物語 (manabitimes.jp)

1

ベクトルとは?

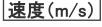
ベクトルとは、一般的には「大きさと向きをもつ量」であり「矢印で表すことのできる量」と説明されている。

「温度」や「重さ」といった量は、大きさがあるだけで向きはない。一方で「速度」や「カ」といった量は、大きさだけではなく向きも含む。

大きさだけをもつ量のことを「**スカラー**」、大きさと向きの二つをもつ量のことを「**ベクトル**」というように呼び分ける。

ベクトル:大きさと向きをもつ







力(N) 温度(℃)





重さ(g)

スカラー:数値の大きさで表す

Tips

ベクトルの定義は、物理学・コンピューターサイエンス・数学ごとに、それぞれ次のように解釈されている。

- 物理学:長さと向きをもつ矢印
- コンピュータサイエンス:数字のリスト
- ・ 数学:上の二つの定義を一般化したもの

2

状態ベクトルとは?

量子力学における状態のすべては波動関数で表される。 波動関数というのは位置や時間の変数に対して複素数を返す関数である。量子ビットは、ブラケット記法(|〇>という記号の形)を使って次のように量子の状態を表す。

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$
, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

 $|\psi\rangle$ は波動関数で複素ベクトルを用いて量子の状態をあらわしたもので「状態ベクトル」と呼ぶ。

3 ベクトル空間とは?

線形代数では、ベクトルの持つ性質を抽出して、より一般的な集合についても適用可能なものとしてベクトル空間という概念を定義する。 任意のベクトルについて、定数倍したりベクトル同士を足し合わせたりした結果得られるものが、またベクトルの集合に含まれるものと一致するならば、その集合はベクトル空間とみなされる。

例)

- 1. (u + v) + w = u + (v + w)(結合法則)
- 2. u + v = v + u (交換法則)
- ※その他法則は、「詳説」2項参照

4 参考文献

<u>ベクトルとは?誰でも理解できるように簡単に解説 | HEADBOOST ブラケット記法 - EMANの量子力学 (eman-physics.net)</u> ベクトル空間と次元 | 高校数学の美しい物語 (manabitimes.jp)

1 ブラ・ケット記法と量子コンピュータの関係

古典コンピュータでは、基本単位はビットで"0"または"1"の値をとる。

量子コンピュータでは、古典コンピュータのビットに対応する状態のことを量子ビット(qubit)と呼ぶ。

量子コンピュータでは10>、11>という状態とその組み合わせとなる。つまり、古典コンピュータで"0"または"1"という状態は、10>、11>という状態にあたる。

量子ビットは古典ビットとは異なり、|0>、|1>以外の状態をとることができ、例えば|0>、|1>は線形結合により新しい状態 | Ψ>を表現することができる。 |ψ>=α|0>+β|1> (α、βは複素数)

このような量子ビットの線形結合のことを「重ね合わせ状態⟨□シラバス 3.2⟩」と呼ぶ。

1量子ビットは2次元の複素ベクトル空間上で表現され、それぞれ、量子ビット|0>、|1>に対応する。

$$|0\rangle \coloneqq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle \coloneqq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

2 ベクトル空間の定義

定義:集合Vがベクトル空間あるいは線形空間であるとは、Vの任意の2元u、vについて

- •u + ν ∈ V(和)
- •av ∈ V(スカラ―倍)

が定められ、任意の $u,v,w \in V \succeq a,b \in R$ について以下の性質が成り立つことをいう:

- 1. (u + v) + w = u + (v + w)(結合法則)
- 2. u + v = v + u (交換法則)
- 3. 0 + v = vが成り立つゼロベクトル $0 \in V$ が存在する。
- $v + v' = o と t d v' \in V が 存在する (このとき v'を v と 書き、v の 逆 ベクトルという)。$
- 5. (a + b)v = av + bv
- 6. a(u + v) = au + av
- 7. (ab)v = a(bv)
- 8. 1v = v

このとき、Vの元をベクトル(vector)Rの元をスカラー(Scalar)という。

4 参考文献

IBMQで学ぶ量子コンピュータ(湊雄一郎/比嘉恵一郎/永井隆太郎/加藤拓己、秀和システム、2021年) ベクトル空間と次元 | 高校数学の美しい物語 (manabitimes.jp)

1 ベクトルの加算

2つのベクトル \vec{a} 、 \vec{b} が与えられたとき、それらを加えたベクトル \vec{a} + \vec{b} は以下のように図示、計算される。

例:

 \vec{a} =(1,2) と \vec{b} =(3,4) の足し算は、 \vec{a} + \vec{b} =(1+3,2+4)=(4,6)

 $\vec{a} + \vec{b}$ \vec{b} 図で理解

成分表示(座標)で理解

2 内積と外積

2つの線形独立な任意のベクトルaとb に対して、積を考えるとき、次の2つの積がある。

内積と外積

•内積(スカラー積): a•b

外積(ベクトル積): a×b

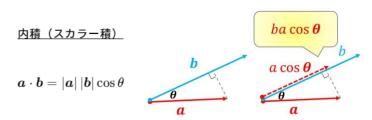
量子コンピュータの基礎を理解する上では、 まずは内積を知っておけば良い。

量子コンピュータにおける外積については、以下が参考となる。 https://qiskit.org/textbook/ja/ch-gates/proving-universality.html#outer

3 内積(スカラー積)

2つの線形独立な任意のベクトルaとbに対して、積を考えるとき、内積は以下のように定義される。

内積の結果は、「向き」という概念がなくなり、「大きさのみ(スカラーのみ)」になっているため、スカラー積と呼ばれる。



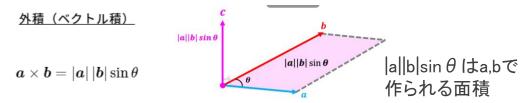
どちらか片方のベクトル を相手側のベクトルに 垂線を下した方向に射 影して掛け算を行う

4 [参考] 外積(ベクトル積)

2つの線形独立な任意のベクトルaとbに対して、積を考えるとき、 外積は以下のように定義される。

外積はベクトル積と呼ばれているように外積の結果はベクトルになっているため「外積の結果は大きさと向き」がある。

a×b=cとすると、cはaとbで張られる平面に垂直な方向になる。



参考文献

ベクトルの内積と外積の意味と嬉しさ 高校数学の美しい物語 (manabitimes.jp)

1 内積0は、2つのベクトルが直交していることを意味

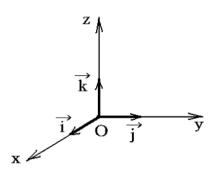
2つの任意のベクトルa、bの内積を計算して0になったらそれらのベクトルは直行しているということを表す。 内積 の定義から、 $a \cdot b = |a| |b| \cos\theta = 0$ ということは $\cos\theta = 0$ 、すなわち $\theta = 90$ ° であることを意味する。 なお、平行である場合、内積が1となる($\theta = 0$ °、もしくは $\theta = 180$ °)。

2 直交単位ベクトルの内積

直交座標のx、y、z方向の単位ベクトルをそれぞれi、、j、kとすると、内積の意義によりベクトル \vec{i} 、 \vec{j} 、 \vec{k} の大きさはすべて1だから、直ちに \vec{i} · \vec{i} = \vec{i} · \vec{i} = \vec{k} · \vec{k} = 1

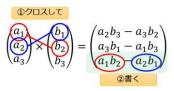
 $\vec{i} \cdot \vec{i} = \vec{j} \cdot \vec{j} = \vec{k} \cdot \vec{k} = 1$ $\vec{i} \cdot \vec{j} = \vec{j} \cdot \vec{i} = \vec{j} \cdot \vec{k} = \vec{k} \cdot \vec{j} = \vec{k} \cdot \vec{i} = \vec{i} \cdot \vec{k} = 0$ が言える。

これらの単位ベクトルを用いると、任意ベクトルA、Bは $\vec{A}=A_x\vec{\iota}+A_y\vec{j}+A_z\vec{k}$ 、 $\vec{B}=B_x\vec{\iota}+B_y\vec{j}+B_z\vec{k}$ 、・・・等 のように表される A_x 、 A_y 、 A_z 、・・・等はそれぞれベクトルを×座標、y座標、z座標に投影したときに長さを意味する。

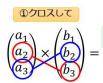


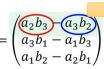
3 外積の計算方法

外積計算は内積に比べると計算方法が厄介です。ベクトルの要素をクロスさせて計算する方法は、次の通りである。

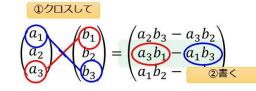












まとめると、
$$oldsymbol{a} imesoldsymbol{b} imesoldsymbol{a} imesoldsymbol{b} = \left(egin{array}{c} a_2b_3-a_3b_2\ a_3b_1-a_1b_3\ a_1b_2-a_2b_1 \end{array}
ight)$$

4 参考文献

ベクトルの内積(スカラー積)と外積(ベクトル積)の成分表示 (fnorio.com) 外積とは(ベクトル積とは)?具体的な計算方法と力学のモーメントを理解する。 | 宇宙に入ったカマキリ (takun-physics.net)

1 行列とは

行列は、ベクトルを拡張したものといえる. 具体的にはベクトルが横方向にも配置され、括弧でくくられたものである。

 $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}$

数学においては、長い計算を簡単に解くことを可能としてくれるツールである。コンピューターグラフィクスにおいては、空間を思うままに変換するための写像である。また統計学では、最も信頼できる検定法の一つである最小二乗法の核である。このように、行列には、さまざまな分野で使われる数々の便利な性質がある。

2 ベクトルと行列の違い

 $\begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix}$

実際には1行だけや1列だけの行列もあるので、この分類は正しくない。行列とベクトルの違いは、それを関数として扱うのか、それとも入力値・出力値として扱うのかの違い。

関数として扱うのなら、それは行列であり、入力値・出力値として扱うのなら、それはベクトルとなる。

3 行列基本計算(四則演算)

足し算: それぞれの行と列の成分同士を足す。 引き算: それぞれの行と列の成分同士を引く。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} - b_{11} & a_{12} - b_{12} \\ a_{21} - b_{21} & a_{22} - b_{22} \end{pmatrix}$$

要素同士を加算・減算!

2つの行列の形が違った行列の足し算と引き算をすることはできない。

掛け算:対応する行と対応する列を最初に選んでから、対応する行の列番号と対応する列の行番号を掛け合わせてそれをすべて足した値になる。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{pmatrix}$$

1行1列:1行1列×1行1列+1行2列×2行1列

割り算:行列の割り算はない。ただし、逆行列を掛け算することで割り算相当の処理を代替する。逆行列は次項参照。

4 参考文献

<u>うさぎでもわかる線形代数 第00羽 行列の四則演算+用語まとめ 工業大学生ももやまのうさぎ塾 (momoyama-usagi.com</u> <u>9Vector.pdf (kochi-tech.ac.jp)</u>

1 正方行列

行数と列数の等しい行列のことを正方行列という。2行2列の行列は2次正方行列、 3行3列行列は3次正方行列という。

例
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$
 $B = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 2 \\ 2 & -1 & 3 \\ 0 & 2 & -1 \end{pmatrix}$

2 対角行列

正方行列の中で、対角成分以外の成分が0である行列を対角行列という。

例
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$
 $B = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$

3 単位行列

正方行列の中で、対角成分以外の成分が0である行列、対角成分が1の行列を単位 行列という。

単位成分のことを記号でIやEと表す。

例
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
 $B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

4 転置行列

行列の行と列を入れ替えた行列を転置行列といい、記号で t Aや A^{T} と表す。なお、のような正方行列ではない場合は行列の形が変わるので注意が必要。

例
$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 \\ -2 & 3 \\ -3 & 0 \end{pmatrix}$$
 $B = \begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 \\ -1 & 0 & 4 \\ 2 & 5 & -3 \end{pmatrix}$

$${}^{t}A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & -3 \\ -1 & 3 & 0 \end{pmatrix}$$
 ${}^{t}B = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \\ 3 & 0 & 5 \\ -2 & 4 & -3 \end{pmatrix}$

5 参考文献

<u>うさぎでもわかる線形代数 第00羽 行列の四則演算+用語まとめ | 工業大学生ももやまのうさぎ塾 (momoyama-usagi.com)</u>

1 共役転置

共役転置、あるいは随伴行列、エルミート転置と呼ばれる行列は、元の行列の各成分で複素共役を取り、それを転置させた行列のことを言う。

 $A = (a_{ij})$ をm×n行列とする。

Aの各成分で複素共役を取り、転置させたn×m行列

$$\mathbf{A}^* = \bar{A}^{\mathrm{T}} = \left(\bar{\mathbf{a}}_{ij}\right)^{\mathrm{T}} = \left(\bar{\mathbf{a}}_{ji}\right)$$

A*と書くことが多い。ほかにA[†]と書くこともある。

共役転置の具体例

2 行列式

行列式とは、線形変換後に空間が何倍になるかを明らかにする計算式のこと。

行列式には、いくつかの表記方法があります。

行列を A としたら、行列式には "determinant" を表す det をつけて、 detA と表したり、行列を絶対値記号 | で囲んで |A| と表したりします。

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$
, $det A = |A| = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc(サラスの公式)$

行列式のサラスの公式 例えば、2×2の行列式は次のように計算する。

$$\begin{vmatrix} 3 & 2 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} = 3 \cdot 2 - 2 \cdot 0 = 6$$

これは空間の面積が6倍になることを示している。

3 逆行列

逆行列 A^{-1} とは、正則行列A(逆行列を持つ正方行列のこと)と掛け算をしたときに単位行列Eになる行列のこと。これを満たす A^{-1} をAの逆行列と呼ぶ。

正則行列A、逆行列A-1、単位行列Eの関係

$$AA^{-1} = E = A^{-1}A$$

2×2行列Aと逆行列A-1は下式となる。

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$$
$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix}$$

Aが正則行列になり、 A^{-1} を持つのは $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \neq 0$ の時のみ。

4 参考文献

<u>随伴行列(エルミート転置,共役転置)の定義と性質10個 | 数学の景色</u> (mathlandscape.com)

行列式とは?誰でも理解できるようにわかりやすく解説 | HEADBOOST

<u>逆行列の定義・逆行列を求める2通りの方法と例題 | 高校数学の美しい</u>物語 (manabitimes.jp)

1 3×3の行列式

公式
$$det A = \begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = a \cdot \begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} - b \cdot \begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} + c \cdot \begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix}$$
$$= a \cdot (ei - fh) - b \cdot (di - fg) + c \cdot (dh - eg)$$

行列式のサラスの公式

例えば、3×3の行列式は次のように計算する。

2*2行列の逆行列の計算例

2×2行列Aの逆行列A⁻¹の例は以下の通り。

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$$

$$A^{-1} = \frac{1}{detA} \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -3 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{1*4+2*3} \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 1 \\ 1.5 & -0.5 \end{bmatrix}$$

3 参考文献

随伴行列(エルミート転置,共役転置)の定義と性質10個 | 数学の景色 (mathlandscape.com) 行列式とは?誰でも理解できるようにわかりやすく解説 | HEADBOOST 逆行列の定義・逆行列を求める2通りの方法と例題 | 高校数学の美しい物語 (manabitimes.jp)

1 内積

「通常の」行列の積は、図のようにベクトルの内積を使って定義される。

$$\left(egin{array}{c} a & b \ c & d \end{array}
ight) \left(egin{array}{c} e \ g \end{array}
ight) = \left(egin{array}{c} ae + bg & af + bh \ ce + dg & cf + dh \end{array}
ight)$$

例えば、

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

のとき、

$$A \cdot B = a_{11}b_{11} + a_{12}b_{12} + a_{21}b_{21} + a_{22}b_{22}$$
 です。

2 固有ベクトル・固有値

固有値・固有ベクトルは行列が登場するあらゆるところに出てくる重要な概念である。

固有値・固有ベクトルの定義:

 $A\vec{x} = \lambda \vec{x}$

が成立するときxを固有ベクトル(eigenvector)、λをAの固有値 (eigenvalue)という。

ただし、Aは正方行列、 \vec{x} は $\vec{0}$ ではないベクトル、 λ はスカラー。

固有値と固有ベクトルに関連する概念として、「固有空間」がある。

固有空間の定義:

正方行列Aの固有値 λ に対し、

$$W_{\lambda} = \left\{ \overrightarrow{x} \middle| A\overrightarrow{x} = \lambda \overrightarrow{x} \right\}$$

で定まる線形空間 W_{λ} のことを、Aの固有値 λ の固有空間という。

つまり、固有空間とは同じ固有値 λ に対応する固有ベクトルを集めた集合。ただし、ゼロベクトルも固有空間の元である。

固有値、固有ベクトルを計算するために必要な定理があります。理解するには行列式(det)に関する知識が必要。

固有値を求めるために必要な定理:

 λ がAの固有値 \Leftrightarrow $det(A - \lambda I) = 0$

 $det(A - \lambda I) = 0$ をAの特性方程式(固有方程式)という。

3 固有値・固有ベクトルは、何に使われているの?

例)

- •アダマールテスト
- ・ショアのアルゴリズム(位相推定)
- HHL
- •量子化学計算

4 参考文献

<u>行列の内積の定義と性質 - 具体例で学ぶ数学 (mathwords.net)</u>

<u>行列の固有値・固有ベクトルの定義と具体的な計算方法 | 高校数学の美しい物語 (manabitimes.jp)</u>

1 量子ビットとテンソル積の関係・テンソル積の性質

量子コンピュータを理解する上では、テンソル積(記号では \otimes)を理解する必要がある。2つの1量子ビット $|\psi\rangle$ 、 $|\Phi\rangle$ のテンソル積 $|\psi\rangle\otimes|\Phi\rangle$ は以下のように定義される。

$$\begin{split} |\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}, & |\Phi\rangle = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \\ |\psi\rangle \otimes |\Phi\rangle &\coloneqq \begin{pmatrix} a_0 |\Phi\rangle \\ a_1 |\Phi\rangle \end{pmatrix} \coloneqq \begin{pmatrix} a_0 b_0 \\ a_0 b_1 \\ a_1 b_0 \\ a_1 b_1 \end{pmatrix} \end{split}$$

この定義から2量子ビットの状態は1量子ビットのテンソル積で表すことができる。

$$|0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

テンソル積の定義からn量子ビットは2n次元ので表現できることがわかる。

またテンソル積の定義から次の性質を満たす。

$$\begin{array}{l} \alpha \ (|\psi\rangle \otimes |\Phi\rangle) = (\alpha|\psi\rangle) \ \otimes |\Phi\rangle = |\psi\rangle \otimes (\alpha|\Phi\rangle) \\ (|\psi_0\rangle + |\psi_1\rangle) \otimes |\Phi\rangle = |\psi_0\rangle \otimes |\Phi\rangle + |\psi_1\rangle \otimes |\Phi\rangle \\ |\psi\rangle \otimes \ (|\Phi_0\rangle + |\Phi_1\rangle) = |\psi\rangle \otimes |\Phi_0\rangle + |\psi\rangle \otimes |\Phi_1\rangle \end{array}$$

ここで $|\psi\rangle$ 、 $|\Phi\rangle$ 、 $|\psi_0\rangle$ 、 $|\psi_1\rangle$ 、 $|\Phi_0\rangle$ 、 $|\Phi_1\rangle$ は量子ビット、 $|\Phi_1\rangle$ は量子ビット、 $|\Phi_1\rangle$ は量子ビット、 $|\Phi_1\rangle$

2 固有値と固有ベクトルを求める(例題)

例題

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$$

の固有値と固有ベクトルを求めよ。

解答

・
$$A-\lambda I = \begin{pmatrix} 3-\lambda & 1 \\ 2 & 2-\lambda \end{pmatrix}$$
 より特性方程式は、 $(3-\lambda)(2-\lambda)-2=0$ これを解くと $\lambda=1$ 、4となり固有値が求まった。

- ・ λ =1に対応する固有ベクトルは、 $(A-I) \stackrel{?}{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \stackrel{?}{\mathbf{x}} = 0$ の解なので固有ベクトルは $\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$ (の定数倍)
- ・ λ =4に対応する固有ベクトルは、 (A-I) $\vec{x}=\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 2 & -2 \end{pmatrix} \vec{x}=0$ の解なので固有ベクトルは $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ (の定数倍)

3 参考文献

IBMQで学ぶ量子コンピュータ(湊雄一郎/比嘉恵一郎/永井隆太郎/加藤拓己、秀和システム、2021年) 行列の固有値・固有ベクトルの定義と具体的な計算方法 | 高校数学の美しい物語 (manabitimes.jp)

行列の対角化

対角行列を使うと、行列のべき乗の計算がとても楽になる。対角行列ではない行列 A を、対角行列に変換できるとしたら、とても助かる。 それを可能にする方法が「行列の対角化」である。

[行列の対角化の方法]

 $P^{-1}AP = D$ 逆行列 P^{-1} は「行列(2)」を参照。

例 $A = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ を対角化する。

行列Pが固有ベクトルを並べて作れる。

行列Aの固有ベクトルは $\binom{1}{0}$ と $\binom{-1}{1}$ である。

 \mathcal{F} \mathcal{F}

このPを用いてAの対角化行列は次のように求められる。

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

[行列の対角化の条件]

- ・Aのn本の固有ベクトルが線形独立なら(=Aが異なる固有値をn個持てば)Aは対角化可能。
- ・Aが対称行列、エルミート行列(「行列(4)」を参照)のとき、直交行列で対角化可能。

参考文献

行列の対角化の意味と具体的な計算方法 | 高校数学の美しい物語 (manabitimes.jp) 行列の対角化とは?意味と方法と使い方[練習問題付き] | HEADBOOST

エルミート行列

n×n複素行列Hが

$$H^{\dagger} = H$$

を満たすとき、(n次の)エルミート行列(Hermitian matrix)という。 ただし $H^{\dagger} = H^{T}$ は転置して複素共役をとった行列。

例

例えば、

$$H = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

はエルミート行列である。実際に転置して共役をとってみると

$$\mathbf{H}^{\dagger} = \overline{\begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

となり、H自身に一致する。

他にも実対称行列、つまり $S^T = S$ を満たす実行列は常にエルミート行 列となることがわかる。

「補足」量子力学において、エルミート演算とは、「実測値が実数となる」と いうことを示しており、量子コンピュータを理解する上で重要な概念となる。

2 ユニタリ行列

次の関係

$$U^{\dagger}U = UU^{\dagger} = I$$

を満たす行列をユニタリ行列という。ここで†(ダガー)は随伴行列(共役 転置)を表す行列である。

行列

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{bmatrix}$$

はユニタリ行列である。

参考文献

エルミート行列とその性質、ユニタリ対角化の証明 | 高校数学の美し い物語 (manabitimes.jp)

ユニタリ行列とは? ~公式と性質~ (証明付) - 理数アラカルト -(risalc.info)

1 エルミート行列の性質

性質1: n次エルミート行列の自由度(次元)は n^2 である。

性質2: エルミート行列の固有値は実数である。

性質3: エルミート行列の異なる固有値 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ に対応する固有空間 W_{λ_1} 、 W_{λ_2}

は直行する。

性質4: エルミート行列Hに対して、適切なユニタリ行列Uをとることで、

 $U^{-1}HU = U^*HUを対角行列にできる。$

2 エルミート行列(練習問題)

例題

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 3 + 2i \\ \chi & 3 \end{pmatrix}$$

がエルミート行列になるようなxの値を求めよ。

解答

共役転置は

$$H^* = \overline{\begin{pmatrix} 1 & x \\ 3+2i & 3 \end{pmatrix}} = \begin{pmatrix} 1 & \overline{x} \\ 3-2i & 3 \end{pmatrix}$$

となる。これがHと一致する条件は、x=3-2iである。

3 ユニタリ行列の証明

列 行列

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{bmatrix}$$

はユニタリ行列である。

証明

$$\begin{split} \mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{i} \\ 1 & -\mathbf{i} \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\mathbf{i} & \mathbf{i} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I} \\ \mathbf{U}\mathbf{U}^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -\mathbf{i} & \mathbf{i} \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{i} \\ 1 & -\mathbf{i} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I} \end{split}$$

が成り立つのでユニタリ行列である。

4 [参考]量子コンピュータのゲート

パウリゲートX、Y、ZとアダマールゲートHはユニタリ行列である。 パウリゲート: $X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$, $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ アダマールゲート: $H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ $X^2 = Y^2 = Z^2 = I$ 、 $H^2 = I$

参考文献

エルミート行列とその性質、ユニタリ対角化の証明 | 高校数学の美しい物語 (manabitimes.jp)

本資料の著作権は、日本アイ・ビー・エム株式会社(IBM Corporationを含み、以下、IBMといいます。) に帰属します。

ワークショップ、セッション、および資料は、IBMまたはセッション発表者によって準備され、それぞれ独自の見解を反映したものです。それらは情報提供の目的のみで提供されており、いかなる参加者に対しても法律的またはその他の指導や助言を意図したものではなく、またそのような結果を生むものでもありません。本資料に含まれている情報については、完全性と正確性を期するよう努力しましたが、「現状のまま」提供され、明示または暗示にかかわらずいかなる保証も伴わないものとします。本資料またはその他の資料の使用によって、あるいはその他の関連によって、いかなる損害が生じた場合も、IBMまたはセッション発表者は責任を負わないものとします。本資料に含まれている内容は、IBMまたはそのサプライヤーやライセンス交付者からいかなる保証または表明を引きだすことを意図したものでも、IBMソフトウェアの使用を規定する適用ライセンス契約の条項を変更することを意図したものでもなく、またそのような結果を生むものでもありません。

本資料でIBM製品、プログラム、またはサービスに言及していても、IBMが営業活動を行っているすべての国でそれらが使用可能であることを暗示するものではありません。本資料で言及している製品リリース日付や製品機能は、市場機会またはその他の要因に基づいてIBM独自の決定権をもっていつでも変更できるものとし、いかなる方法においても将来の製品または機能が使用可能になると確約することを意図したものではありません。本資料に含まれている内容は、参加者が開始する活動によって特定の販売、売上高の向上、またはその他の結果が生じると述べる、または暗示することを意図したものでも、またそのような結果を生むものでもありません。パフォーマンスは、管理された環境において標準的なIBMベンチマークを使用した測定と予測に基づいています。ユーザーが経験する実際のスループットやパフォーマンスは、ユーザーのジョブ・ストリームにおけるマルチプログラミングの量、入出力構成、ストレージ構成、および処理されるワークロードなどの考慮事項を含む、数多くの要因に応じて変化します。したがって、個々のユーザーがここで述べられているものと同様の結果を得られると確約するものではありません。

記述されているすべてのお客様事例は、それらのお客様がどのようにIBM製品を使用したか、またそれらのお客様が達成した結果の実例として示されたものです。実際の環境コストおよびパフォーマンス特性は、お客様ごとに異なる場合があります。

IBM、IBM ロゴは、米国やその他の国におけるInternational Business Machines Corporationの商標または登録商標です。他の製品名およびサービス名等は、それぞれIBMまたは各社の商標である場合があります。現時点での IBM の商標リストについては、ibm.com/trademarkをご覧ください。