量子コンピューティング基礎

2016 年 2 月 22 日

1　この章の目的

この章では，量子情報科学を学習する上での必須知識をいくつか解説したあと，量子ゲートとそれを用いた回路について紹介する．

2　量子系の時間発展

閉じた量子系[*1]はシュレディンガー方程式に従って発展する．

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi_t\right\rangle = H\left|\psi_t\right\rangle \tag{1}$$

$\left|\psi_t\right\rangle$ は時刻 t の状態を表す．量子力学の理論を議論する上では $\hbar$ の大きさはあまり意味が無いので，今後は $\hbar$ が 1 となるような単位系を用いている前提で解説する．この方程式の一般解は，**時間発展演算子** $U_t \equiv e^{-iHt}$ を用いて

$$\left|\psi_t\right\rangle = U_t\left|\psi_0\right\rangle \tag{2}$$

と書ける．この時間発展演算子は

$$U_t^\dagger = U_t^{-1} \tag{3}$$

を満たす．この関係を満たす演算子を**ユニタリ演算子**という．

(3) 式を満たすことを説明するには e^{-iHt} をマクローリン展開[*2]すればよい．

$$e^{-iHt} = 1 + \frac{1}{1!}(-iHt) + \frac{1}{2!}(-iHt)^2 + \cdots \tag{4}$$

ハミルトニアン H は $H^\dagger = H$ を満たす**エルミート演算子**であるので，

$$\begin{aligned}(e^{-iHt})^\dagger &= 1 + \frac{1}{1!}(-iHt)^\dagger + \frac{1}{2!}\{(-iHt)^2\}^\dagger + \cdots &(5)\\ &= 1 + \frac{1}{1!}(iHt) + \frac{1}{2!}(iHt)^2 + \cdots &(6)\\ &= e^{iHt} &(7)\end{aligned}$$

と導ける．

以下では波動関数を表していた $\left|\psi\right\rangle$ を量子ビットとして扱う．

[*1] 量子系とは量子で構成されるシステムのこと．例えば後述する量子ゲートが量子系の 1 つといえる．「閉じた」とはシステムの外側とエネルギーのやり取りがないという意味で，量子ゲートでいえば回路の入力に変化がないことにあたる．

[*2] 解析学基礎 - 「べき級数とマクローリン展開」

3　量子ビット

一般的な量子ビット（以下 qubit と書く）$|\psi\rangle$ は 2 つの複素数 α, β を使って以下のような 2 次元複素ベクトルで表される．

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \alpha \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \beta \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{8}$$

基底ベクトルを

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{9}$$

とおくと

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \tag{10}$$

と書くこともできる．ただし，α, β は以下の関係を満たす．

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1 \tag{11}$$

もう 1 つの qubit の表現方法として，実数パラメータ θ, ϕ を使う以下のような式がある．

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \tag{12}$$

(12) 式は図 1 のように半径 1 の球上の任意の点へのベクトルと見なすことができる．このときの球をブロッホ球（bloch sphere）と呼ぶ．z 軸正方向が $|0\rangle$ にあたり，逆に負方向が $|1\rangle$ にあたる．そもそもユニタリ行列は任意のベクトルに対して，かけてもベクトルの長さが変わらないという性質を持つ．ブロッホ球を用いれば，ベクトルは必ず球面上にあり，どのように変化しても長さが 1 であることがわかりやすい．

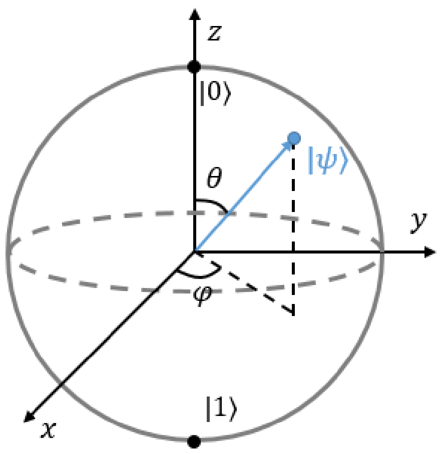

図 1　ブロッホ球

入出力が 2qubit の場合，まず 2 つの qubit

$$|x\rangle = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \qquad |y\rangle = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \tag{13}$$

を考える．この 2 つを合成すると

$$|x\rangle \otimes |y\rangle \equiv \begin{bmatrix} x_1 |y\rangle \\ x_2 |y\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 y_1 \\ x_1 y_2 \\ x_2 y_1 \\ x_2 y_2 \end{bmatrix} \tag{14}$$

と 4 次元の複素ベクトルで表される．記号 $\otimes$ はテンソル積と呼ばれる演算である．また，これらの基底を

$$|00\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |01\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |11\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{15}$$

と書く．

$|0\rangle$ と $|1\rangle$ を用いた 2qubit における具体的な演算例を示す．

$$|0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{bmatrix} 11 \\ 10 \\ 01 \\ 00 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |00\rangle \tag{16}$$

$$|0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{bmatrix} 10 \\ 11 \\ 00 \\ 01 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |01\rangle \tag{17}$$

$$|1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{bmatrix} 01 \\ 00 \\ 11 \\ 10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |10\rangle \tag{18}$$

$$|1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{bmatrix} 00 \\ 01 \\ 10 \\ 11 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |11\rangle \tag{19}$$

4 量子ゲート

量子ゲートは，古典的な論理回路における AND 回路や NOT 回路にあたるものである．しかし，古典的な回路とは異なり，量子回路では入力したビットを制約なく自由に変化させられるわけではない．

前述のとおり，量子ビットはユニタリ演算子により時間発展する（これをユニタリ発展とよぶ）．出力量子ビットを $|\psi\rangle'$，入力量子ビットを $|\psi\rangle$，ユニタリ行列を U としたとき

$$|\psi\rangle' = U\,|\psi\rangle \tag{20}$$

を満たさなければならない．様々なユニタリ行列が考えられるが，回路として使うのに有用なものをいくつか紹介する．

- 単位行列 I とパウリ行列 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$

$$\boldsymbol{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{21}$$

- アダマール行列（Hadamard matrix）H

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \tag{22}$$

- ブロッホ球上での回転 R_x, R_y, R_z

$$R_x(\theta) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sigma_x = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -i\sin(\theta/2) \\ -i\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \tag{23}$$

$$R_y(\theta) = \cos(\theta/2) I - i\sin(\theta/2)\sigma_y = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ -\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \tag{24}$$

$$R_z(\theta) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sigma_z = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{bmatrix} \tag{25}$$

2qubit 以上の量子ゲートとして制御 NOT ゲート（Controled NOT，以下 CNOT と略す）およびトフォリゲートを説明する．

CNOT ゲート 2 入力ゲートで，入力 A が $|0\rangle$ のとき，入力 B がそのまま出力され，入力 A$|1\rangle$ のときは入力 B は反転して出力される．CNOT の行列表現は以下のとおりである．

$$CNOT = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{26}$$

CNOT ゲートに $|00\rangle$ と $|10\rangle$ を入力した場合はそれぞれ次のような出力になる．

$$CNOT\,|00\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |00\rangle \tag{27}$$

$$CNOT\,|10\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |11\rangle \tag{28}$$

トフォリゲートは 3 入力ゲートで，入力 A と入力 B の論理積（AND）が 0 ならば入力 C がそのまま出力され，1 ならば入力 C は反転して出力される．行列表現は以下のとおりである．

$$\begin{bmatrix} I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{29}$$

CNOT ゲートとトフォリゲートの図記号は図 2，3 のように書く．

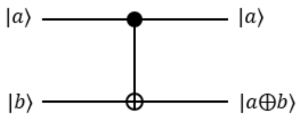

図 2　CNOT ゲート

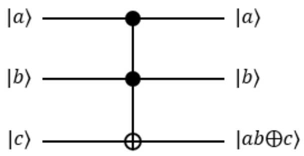

図 3　トフォリゲート

なお，出力ビットのうち入力ビットがそのまま出力されるものは，値を実際に利用するわけではないが，制御のためのに必要なビットである．これを**制御ビット**と呼ぶ．一方，出力が変化する方が実際に利用される値で，これを**標的ビット**と呼ぶ．

量子ゲートはこのように入出力のビット数が同じでなければならない．

参考文献

[1] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. **量子コンピュータと量子通信** I **-量子力学とコンピュータ科学-**. Trans. by 木村達也. オーム社, 2004.

[2] 石坂 智 et al. **量子情報科学入門**. 共立出版, 2012.