量子科学入門ゼミ　第 1 章から第 3 章まで

東工大物理学系 B4 松本侑真

2023 年 9 月 30 日

概要

量子科学入門の第 1 章から第 3 章の終わりまでについて、本の行間などをまとめた。第 1 章では量子ビットを記述するための簡単な線形代数の基礎と、Dirac のブラケット記法の準備を行う。第 2 章では古典回路モデルと量子回路モデルの基礎を扱い、特に量子回路がユニタリ演算子によって構成されることを見る。第 3 章では量子アルゴリズムの代表例として、

- Deutsch-Jozsa のアルゴリズム（定数関数/バランス関数判定問題）
- Glover のアルゴリズム（探索問題）
- Shor のアルゴリズム（素因数分解問題）

について扱う。なお、第 0 章のお話はまとめていない。

目次

1　第 1 章

1.1　Dirac の表記法

Dirac の表記法とは、ベクトルや行列を簡潔に表すことのできる表記法である。LaTeX では、braket パッケージや physics パッケージを用いると簡単に書くことができる。自分は physics パッケージを用いている。縦ベクトルをブラ、横ベクトルをケットで表すことで、行列やベクトルの演算を直感的に操作できるようになる。量子情報で良く出てくる記号として、

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2 \tag{1.1}$$

の計算基底（z 基底）がある。計算 “基底” と言っているのは、任意の $\mathbb{C}^2$ のベクトルは、$a, b \in \mathbb{C}$ として、

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle \tag{1.2}$$

と展開できるためである。すなわち、1 つの量子ビットの状態は、計算基底の線形結合によって表される。そして、計算基底は正規直交基底となっている。$i, j \in \{0, 1\}$ として

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \tag{1.3}$$

が成立する。ここで出てくる記号

$$\langle \cdot|\cdot\rangle \tag{1.4}$$

は 2 つのベクトルの内積を表す。例えば、

$$\langle 0|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \tag{1.5}$$

である。すなわち、ブラベクトルとは、ケットベクトルの共役転置（Hermite 共役）である：

$$\langle x| = |x\rangle^\dagger \text{ 。} \tag{1.6}$$

他にも、Hadamard 基底（x 基底）

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \tag{1.7}$$

や、円基底（y 基底）

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i\,|1\rangle), \quad |i-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i\,|1\rangle) \tag{1.8}$$

などが良く出てくる。これらは、計算基底に特定のユニタリ演算子を作用させることで変換することができる。

ブラとケットをその順番に並べたものは内積を意味するのであった。ケットとブラの順番に並べたものは行列を意味する。例えば、

$$|0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.9}$$

である。この演算（ケットブラ）は慣れるまで分かりづらいかもしれないが、行列とは最終的になんらかのベクトル $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}^\top \in \mathbb{C}^2$ に作用するものなので、

$$(|0\rangle\langle 1|)\,|\psi\rangle = |0\rangle\,(\langle 1|\psi\rangle) = \langle 1|\psi\rangle\,|0\rangle \tag{1.10}$$

と理解する方が簡単である。この計算を行列の成分表示に翻訳すると、

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \times a + 1 \times b) = b \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{1.11}$$

となる。行列の成分表示での計算は面倒であるが、ブラケット記法に慣れてくると一瞬で計算することができる。

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle \tag{1.12}$$

であるため、

$$|0\rangle\langle 1|\psi\rangle = |0\rangle\langle 1|\,(a\,|0\rangle + b\,|1\rangle) = b\,|0\rangle \tag{1.13}$$

といった要領である。ここで、$|0\rangle$, $|1\rangle$ の正規直交性を頭の中で用いた。ブラケット記法のまま計算できないと、量子計算の意味を捉えにくいため、早めにこの記法に慣れておこう。大事なことは、ブラケット演算はスカラーとなり、ケットブラ演算は行列になるということである。また、

$$\sum_{i=0}^{1} |i\rangle\langle i| = I\,(\text{単位行列}) \tag{1.14}$$

となることも重要な性質であり、式変形で良く出てくる。これは、$|0\rangle$, $|1\rangle$ が基底であることから得られる性質である。

1.2 量子ビット系

量子ビット系とは、2 つの基底 $|\phi_0\rangle$, $|\phi_1\rangle$ の線形結合により表される状態からなる系のことである。状態 $|\psi\rangle$ を基底 $\{|\phi_0\rangle\,,|\phi_1\rangle\}$ の元で測定すると、$|\phi_0\rangle$ もしくは $|\phi_1\rangle$ の状態が得られる。その確率はそれぞれ

$$P_0 \propto |\langle\phi_0|\psi\rangle|^2, \quad P_1 \propto |\langle\phi_1|\psi\rangle|^2 \tag{1.15}$$

である。

1.2.1 状態の規格化とグローバル位相について

α を 0 でない任意の複素数として、状態 $|\psi\rangle$ と状態 $\alpha\,|\psi\rangle$ は同じ状態とみなす。そのため、$\langle\psi|\psi\rangle = 1$ となるように規格化をしているものとする。一般の量子力学の問題では規格化を考えないことも考えることもあるが、量子コンピュータの文脈では必ず規格化していることに注意。規格化条件を課してもなお状態に不定性が残る。なぜなら、状態 $|\psi\rangle$ に絶対値 1 の複素数 β をかけてもノルムは 1 だからである。また、絶対値 1 の複素数 β は、実数 ϕ を用いて

$$\beta = e^{i\phi} = \cos\phi + i\sin\phi \tag{1.16}$$

と表すことができる。この実数を位相 (phase) と呼ぶ。それぞれの基底の観測確率は変わらないため、位相が状態にかかったものは元と同じ状態とみなすことができる。このような不定性を、グローバル位相による不定性と呼び、普通は $\phi = 0$ として考える。しかし、“グローバル” でない位相のかかり方をしているものは異なることに注意。すなわち、

$$|\psi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle \tag{1.17}$$

と、

$$|\psi'\rangle = a\,|0\rangle + e^{i\phi}b\,|1\rangle \tag{1.18}$$

は異なる状態である。確かに $|0\rangle$ と $|1\rangle$ を観測する確率は変化してないが、異なる基底に変換した際に、その基底で観測する確率は $|\psi\rangle$ と $|\psi'\rangle$ で異なる。これは、密度行列が異なるため（$|\psi\rangle\langle\psi| \neq |\psi'\rangle\langle\psi'|$）とも理解できる。基底ベクトル $|\phi_i\rangle$ によって展開される一般の状態

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} C_i\,|\phi_i\rangle \tag{1.19}$$

に対して、物理量 $\hat{O}$ の期待値は、

$$\left\langle \hat{O} \right\rangle = \sum_{i=1}^{n} p_i\,\langle\phi_i|\hat{O}|\phi_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} |C_i|^2\,\langle\phi_i|\hat{O}|\phi_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle|\rangle \tag{1.20}$$

2　第 2 章

3　第 3 章