大阪市大

集中講義

「基礎から学ぶ
量子コンピュータ」

① 量子力学、量子情報の基礎、

② 量子計算の基礎

③ 量子誤り訂正

① 量子力学・量子情報の基礎

◎ 量子状態 → 複素ベクトル

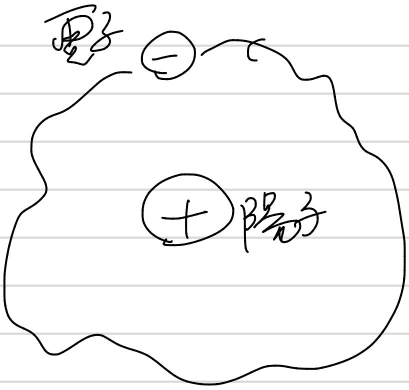
$$\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} = \alpha\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \beta\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$ 重ねあわせ

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \equiv |0\rangle \qquad \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \equiv |1\rangle$$

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$ 量子ビット

規格化 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. （量子情報の最小単位）

水素原子 シュレーディンガー方程式



$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)$$

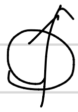
$$H\psi(r,\theta,\phi) = E\psi(r,\theta,\phi)$$

1s, 2s, 2p 軌道 …

$$\psi = \alpha\psi_s + \beta\psi_p$$

もし、2状態以外はほとんど出てこない。

スピン1/2 → $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$



→ $|\uparrow\rangle = |0\rangle \qquad |\downarrow\rangle = |1\rangle$

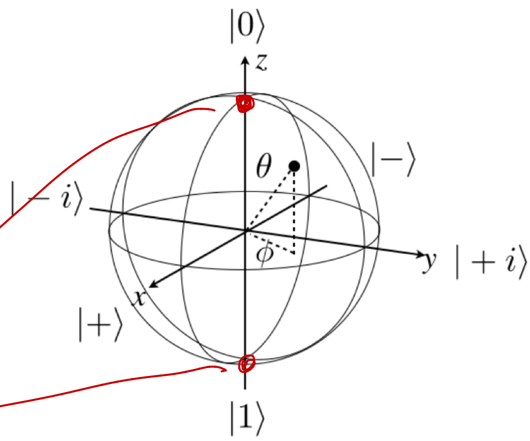
直交する2つの量子状態なら何でもOK.

○ブロッホ球

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

$$\alpha = \cos\frac{\theta}{2}, \quad \beta = e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}$$

$$(r_x, r_y, r_z) = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta),$$



古典ビットは2点しかとりえない。

球面上どの点もとりうる。

◎ 時間発展 → ユニタリ演算子.

U : 2×2 行列, $U U^{\dagger} = I$

エルミート共役

$\left(U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad U^{\dagger} = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} \right)$

単位行列 $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

シュレーディンガー方程式.

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= H |\psi(t)\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle \end{aligned}}$$

○ パウリ演算子.

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$X|0\rangle = |1\rangle, \quad X|1\rangle = |0\rangle$: bit flip.
(古典情報にもある)

$$\left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)$$

$Z|0\rangle = |0\rangle, \quad Z|1\rangle = -|1\rangle$

phase flip
(重ね合わせのある量子特有)

$$XZ = -ZX$$

$$Y = -iXZ, \quad X^2 = Y^2 = Z^2 = I$$

○ Hadamard演算子、Phase演算子、

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

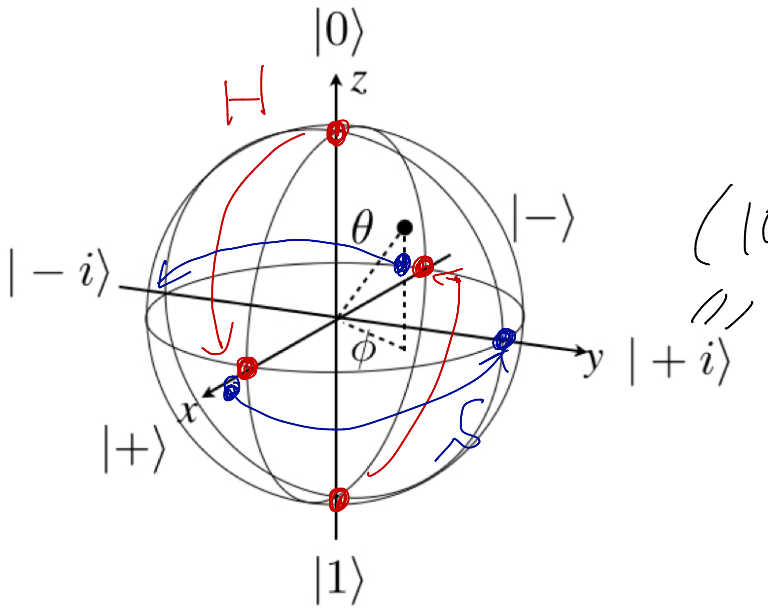
- $H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \equiv |+\rangle$
- $H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \equiv |-\rangle$
- $X|+\rangle = |+\rangle, \quad X|-\rangle = -|-\rangle$

→ Zの固有状態をXへ、、

・$S|0\rangle = |0\rangle, \quad S|1\rangle = i|1\rangle$

$S|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle)$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle) \equiv |-i\rangle$



$(|0\rangle + i|1\rangle)/\sqrt{2} =$

◦ 1量子ビット演算, SU(2)

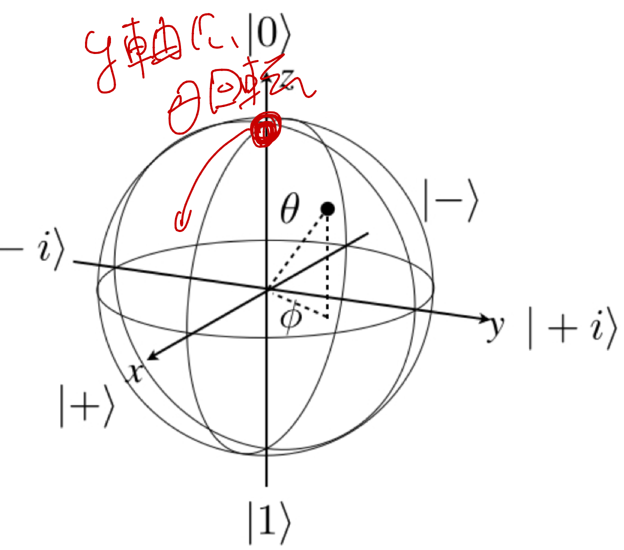
2×2 複素ユニタリ行列, $\det(U)=1$.

(例) $e^{-i\frac{\theta}{2}Y} = \cos\frac{\theta}{2} I - i\sin\frac{\theta}{2} Y$

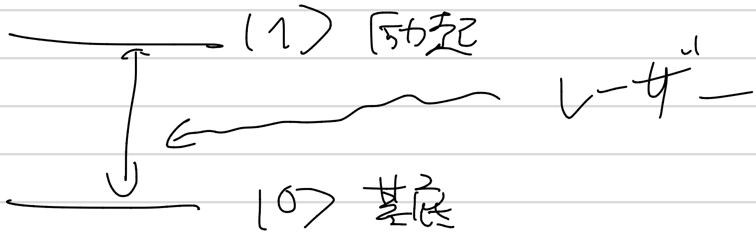
(テーラー展開 & $Y^2 = I$)

$$e^{-i\frac{\theta}{2}Y}(-)^\dagger = I$$

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$



$$e^{-i\frac{\theta}{2}Y}|0\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$



一般に任意のSU(2)は

$$U = e^{i\alpha X} e^{i\beta Z} e^{i\gamma X}$$

(オイラー分解).

◎ 測定

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

基底 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ の測定。 ボルン則。

0 を得る確率 $p_0 = |\langle 0|\psi\rangle|^2 = |\alpha|^2$

1 を得る〃 $p_1 = |\langle 1|\psi\rangle|^2 = |\beta|^2$

($\langle\psi| = (\alpha^*, \beta^*)$ 複素転置
ブラ
$|\psi\rangle$ ケット.)

もしくは、

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

射影演算子. $P_0 = |0\rangle\langle 0|$, $P_1 = |1\rangle\langle 1|$

$p_0 = \| P_0|\psi\rangle\|^2$, $p_1 = \| P_1|\psi\rangle\|^2$.

$= \| |0\rangle\langle 0| (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)\|^2$

$= |\alpha|^2$

($P_i^2 = P_i$, $P_iP_j = 0\ (i \neq j)$, $\sum_i P_i = I$)
確率の和が1.

基底 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ の測定.

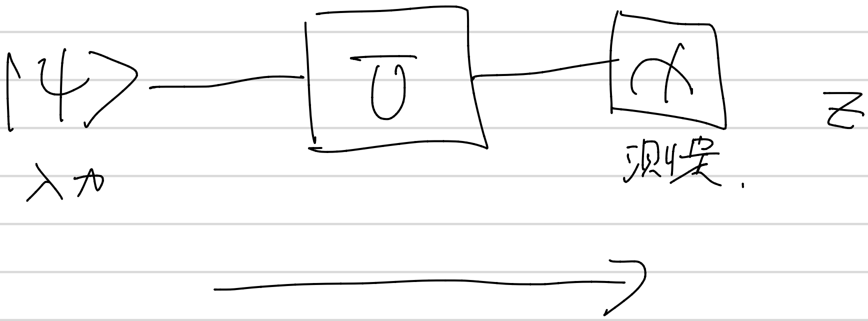
$$P_+ = |\langle +|\psi\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 0| + \langle 1|)(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)\right|^2$$

$$= \frac{1}{2}|\alpha + \beta|^2$$

$$P_- = |\langle -|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}|\alpha - \beta|^2$$

◎量子回路図.

$p_0 = \| P_0 U|\psi\rangle \|$



◎多量子ビット系.(テンソル積).

	A		B		
	($\lvert 0\rangle$	,	$\lvert 0\rangle$)	→	$\lvert 0\rangle\otimes\lvert 0\rangle$
これらの	($\lvert 0\rangle$	,	$\lvert 1\rangle$)	→	$\lvert 0\rangle\otimes\lvert 1\rangle$
重ねあわせ	($\lvert 1\rangle$	,	$\lvert 0\rangle$)	→	$\lvert 1\rangle\otimes\lvert 0\rangle$
もすべてOK.	($\lvert 1\rangle$	,	$\lvert 1\rangle$)	→	$\lvert 1\rangle\otimes\lvert 1\rangle$

直積状態. $(\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle)\otimes(\alpha'|0\rangle+\beta'|1\rangle)$

$= \alpha\alpha'|00\rangle + \beta\alpha'|10\rangle + \alpha\beta'|01\rangle + \beta\beta'|11\rangle$

$|0\rangle\otimes|0\rangle$ を省略.

クロネッカー積

$$\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}\alpha'\\ \beta'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha\times\begin{pmatrix}\alpha'\\ \beta'\end{pmatrix}\\ \beta\times\begin{pmatrix}\alpha'\\ \beta'\end{pmatrix}\end{pmatrix}=\begin{array}{cc}\begin{pmatrix}\alpha\alpha'\\ \alpha\beta'\\ \beta\alpha'\\ \beta\beta'\end{pmatrix} & \begin{array}{c}|00\rangle\\ |01\rangle\\ |10\rangle\\ |11\rangle\end{array}\end{array}$$

○エンタングル状態

$$(|0\rangle|0\rangle+|1\rangle|1\rangle)/\sqrt{2}$$

$$=(|+\rangle|+\rangle+|-\rangle|-\rangle)/\sqrt{2}$$

基底の選び方によらず相関

○演算子のテンソル積

$$(A\otimes B)|\psi\rangle\otimes|\phi\rangle=(A|\psi\rangle)\otimes(B|\phi\rangle)$$

$$(A\otimes B+C\otimes D)|\psi\rangle\otimes|\phi\rangle=(A\otimes B)|\psi\rangle\otimes|\phi\rangle+(C\otimes D)|\psi\rangle\otimes|\phi\rangle$$

$$((\langle\phi'|\otimes\langle\psi'|)(|\psi\rangle\otimes|\phi\rangle)=\langle\phi'|\phi\rangle\cdot\langle\psi'|\psi\rangle$$

$|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ を基底として

4×4行列で書くと、

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

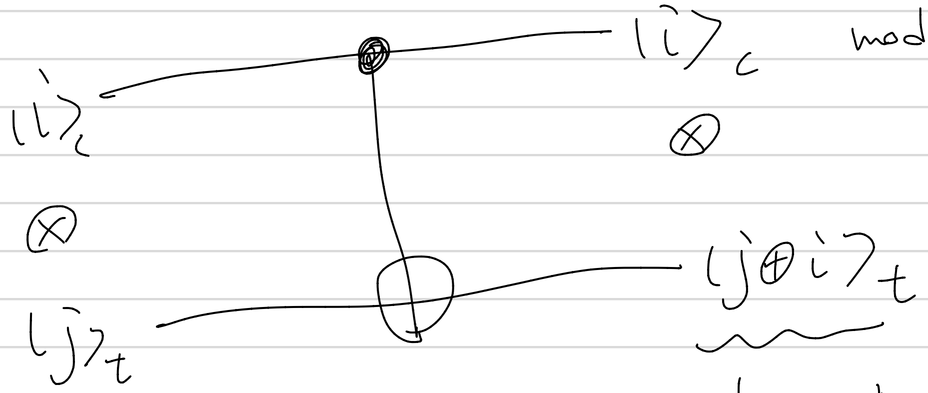
(例) $X\otimes I=\begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}$, $ZX=\begin{pmatrix} X & 0 \\ 0 & -X \end{pmatrix}$

○ CNOT演算.

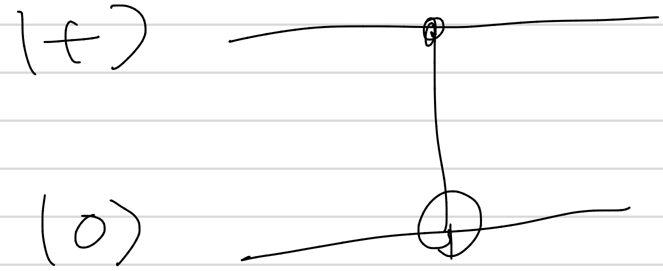
$$\Lambda(X) = |0\rangle\langle 0|_c \otimes I_t + |1\rangle\langle 1|_c \otimes X_t = \begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}$$

$$\Lambda(X)|i\rangle_c \otimes |j\rangle_t = |i\rangle_c \otimes |j \oplus i\rangle_t$$

mod 2の和.



↳ 古典計算ではXOR
排他的論理和.



$$\Lambda(X)\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)_c \otimes |0\rangle_t = \Lambda(X)\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle|0\rangle + \Lambda(X)\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle + |11\rangle\right)$$

エンタングル状態が発生.

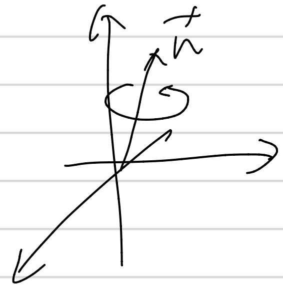
② 量子計算の基礎

① ユニバーサル量子計算

。CNOT と SU(2) を組みあわせて、
任意のN量子ビットユニタリ SU(2^n) が作れる。

。SU(2) は H と $e^{-i\frac{\pi}{8}Z}$ で作れる。
(Solovay-Kitaev の定理)
density implies fast approximation!

$e^{-i\frac{\pi}{8}Z} H e^{-i\frac{\pi}{8}Z} H \to \vec{n} = (\cos\frac{\pi}{8}, \sin\frac{\pi}{8}, \cos\frac{\pi}{8})$ 軸に、

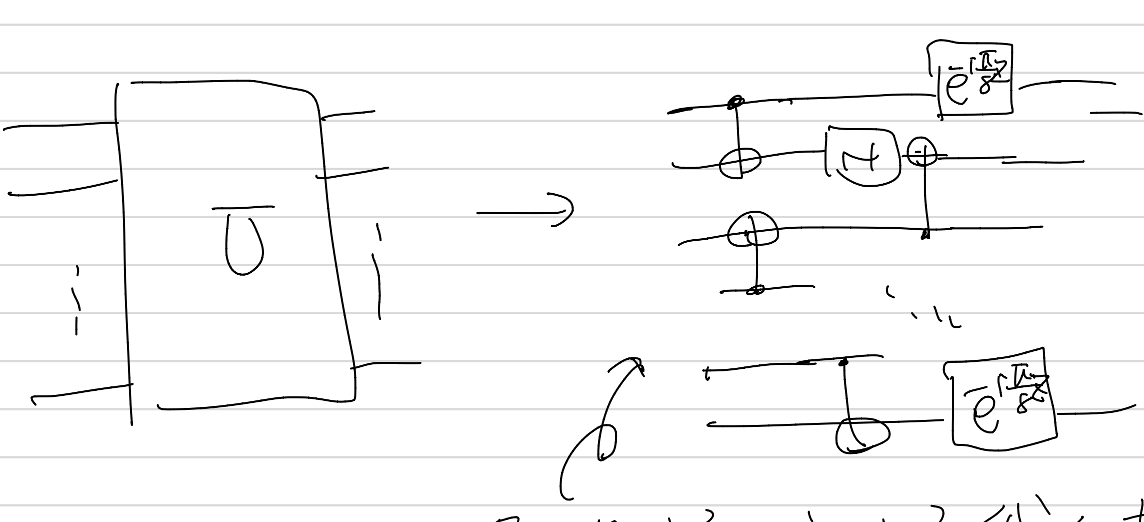


$\cos(\frac{\theta}{2}) = \cos^2\frac{\pi}{8}$ を満たす θ 回転

↑

π の無理倍、
→すべてをうめつくす

$\{ CNOT, H, e^{-i\frac{\pi}{8}Z} \}$ universal gate set.

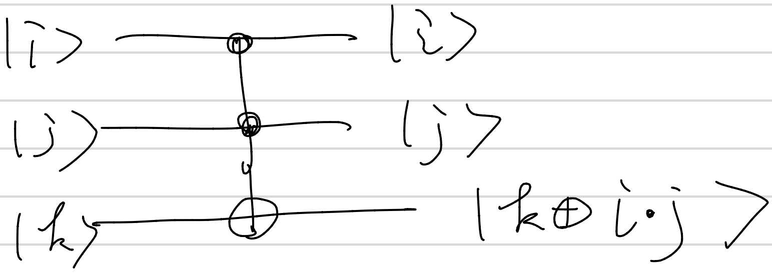


量子力学で記述される我々の世界。

⓪ 古典可逆計算

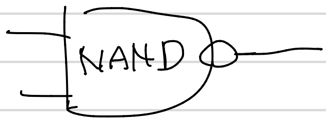
○ Toffoli 演算、(3量子ビット演算)

$$\Lambda^2(X) = |00\rangle\langle 00| \otimes I + |01\rangle\langle 01| \otimes I + |10\rangle\langle 10| \otimes I + |11\rangle\langle 11| \otimes X$$



$k=1$ にすると 古典では NAND に対応。

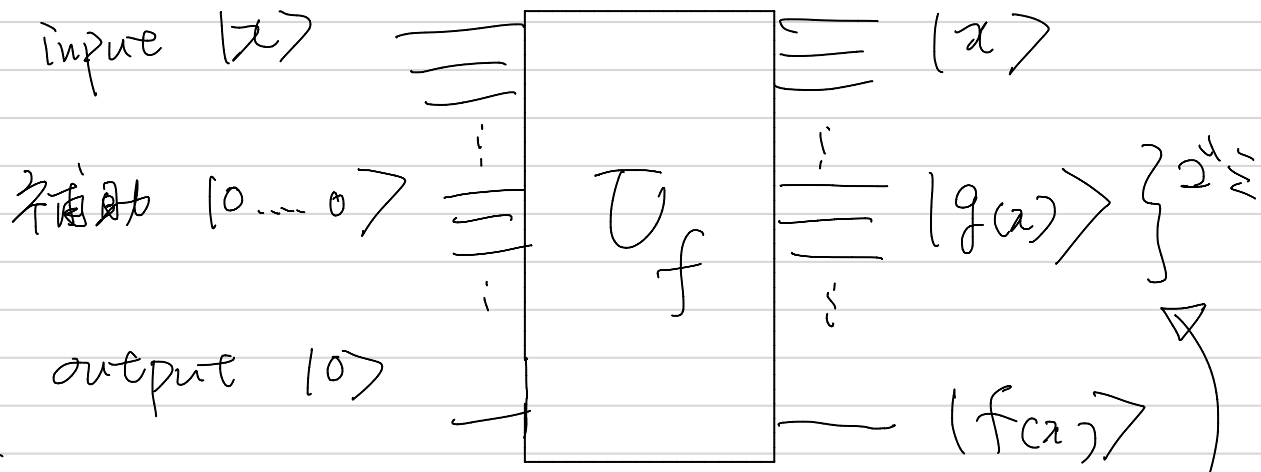
NAND だけで任意の古典計算を作れる。



0	0	→ 1
0	1	→ 1
1	0	→ 1
1	1	→ 0

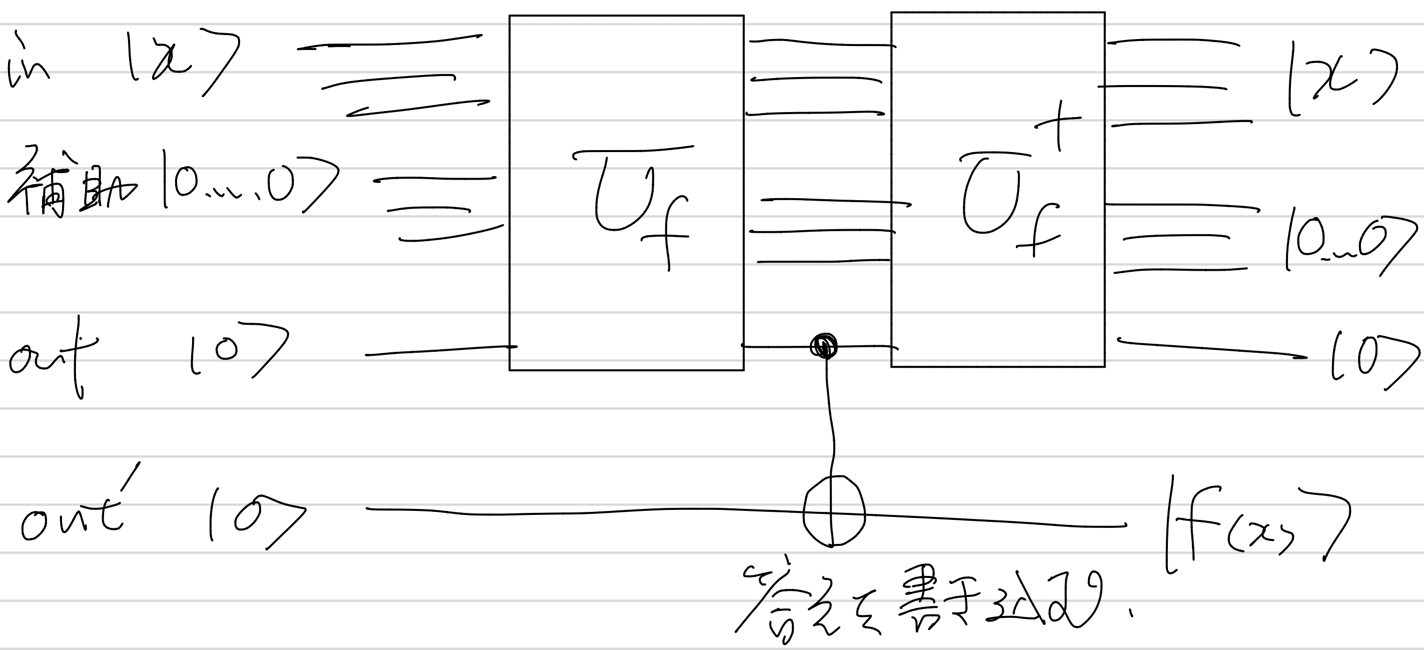
○ 可逆古典計算

input x ⟶ output $f(x)$



uncomputation

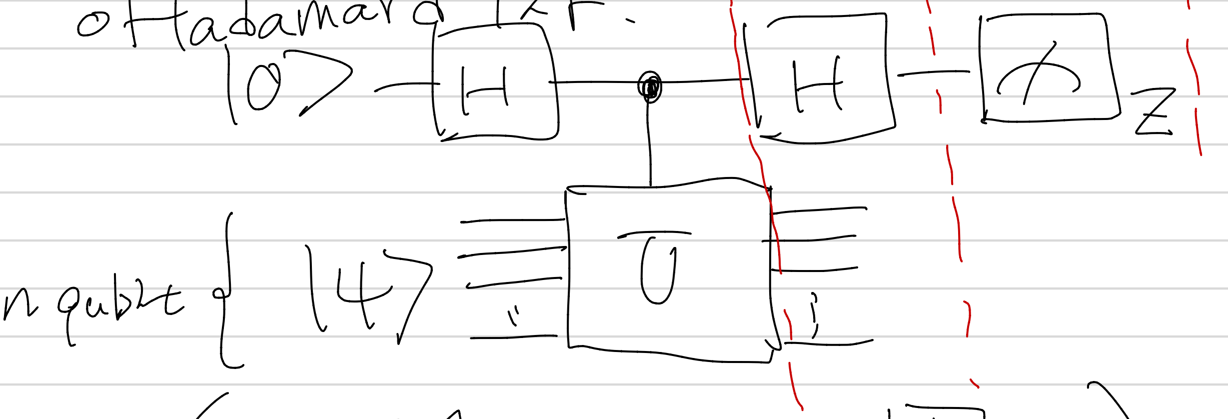
消すのにエネルギーが必要.



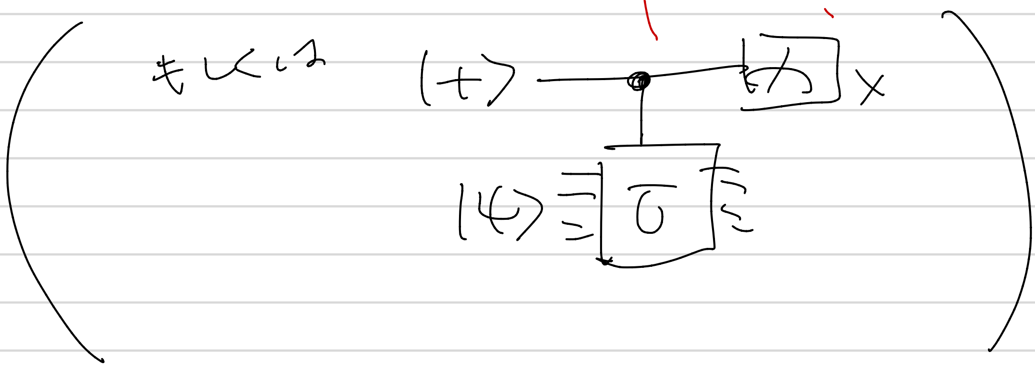
ゴミを残さずに可逆計算できる!!

⓪ 量子アルゴリズム

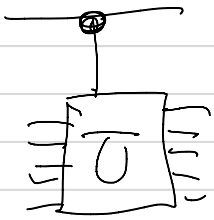
○Hadamard テスト.



もしくは



$\Delta(U)$: controlled-U



$= |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes U$

$2^n \times 2^n$ ユニタリ行列.

これまでの知識を使って、出力の確率を計算してみよう.

①まで

$$\left(|0\rangle\langle 0|\otimes I + |1\rangle\langle 1|\otimes U\right)\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}\otimes|\psi\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle|\psi\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle U|\psi\rangle$$

②まで

$$\frac{1}{2}(|0\rangle+|1\rangle)|\psi\rangle + \frac{1}{2}(|0\rangle-|1\rangle)U|\psi\rangle$$

$$= \frac{1}{2}|0\rangle(I+U)|\psi\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle(I-U)|\psi\rangle$$

③

$$p_0 = \Big\| \underset{\substack{\shortparallel \\ |0\rangle\langle 0|\otimes I}}{P_0}\left(\frac{1}{2}|0\rangle(I+U)|\psi\rangle + \cdots\right)\Big\|^2$$

$\| |\phi\rangle \|^2$

$= \langle\phi|\phi\rangle$

$$= \Big\| \frac{1}{2}|0\rangle(I+U)|\psi\rangle \Big\|^2$$

$$= \frac{1}{4}\langle\psi|(I+U^\dagger)(I+U)|\psi\rangle$$

$(\langle\psi|U^\dagger|\psi\rangle)^*$

$= (\langle\psi|U^\dagger|\psi\rangle)^\dagger$

$= \langle\psi|U|\psi\rangle$

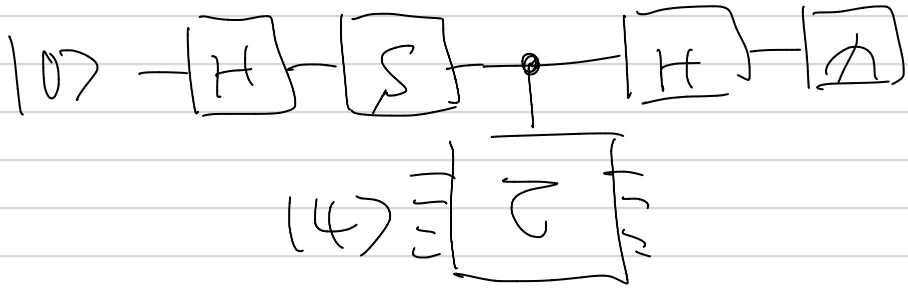
$$= \frac{1}{4}\Big(\langle\psi|\psi\rangle + \langle\psi|U^\dagger|\psi\rangle + \langle\psi|U|\psi\rangle + \langle\psi|\psi\rangle\Big)$$

$$= \frac{1 + \mathrm{Re}\left[\langle\psi|U|\psi\rangle\right]}{2}$$

同様に $p_1 = \dfrac{1 - \mathrm{Re}[\langle\psi|U|\psi\rangle]}{2}$

→ 何回もくり返すことで、$\mathrm{Re}\langle\psi|U|\psi\rangle$ を計算できる。

$\mathrm{Im}\langle\psi|U|\psi\rangle$ は、

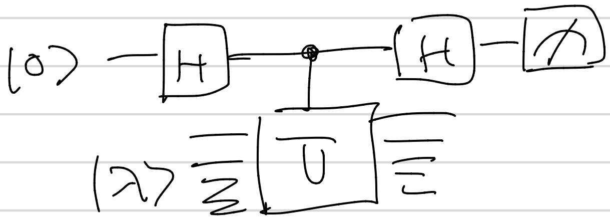


→ 行列要素 $\langle\psi|U|\psi\rangle$ が得られる。

一般に古典では指数時間かかる。

○ 固有値の計算、

$U|\lambda\rangle = e^{i2\pi\lambda}|\lambda\rangle$ とする。



$\langle \lambda|U|\lambda\rangle = e^{i2\pi\lambda}$

Hadamard test で固有値 $e^{i2\pi\lambda}$ がわかる。

($e^{-iHt}|E\rangle = e^{-iEt}|E\rangle$

で エネルギー固有状態。

エネルギーがわかる。)

$e^{i2\pi\lambda}$ の推定だと λ を高い精度(低い桁まで)で求められない ⟶ もっと賢いアルゴリズムが必要。

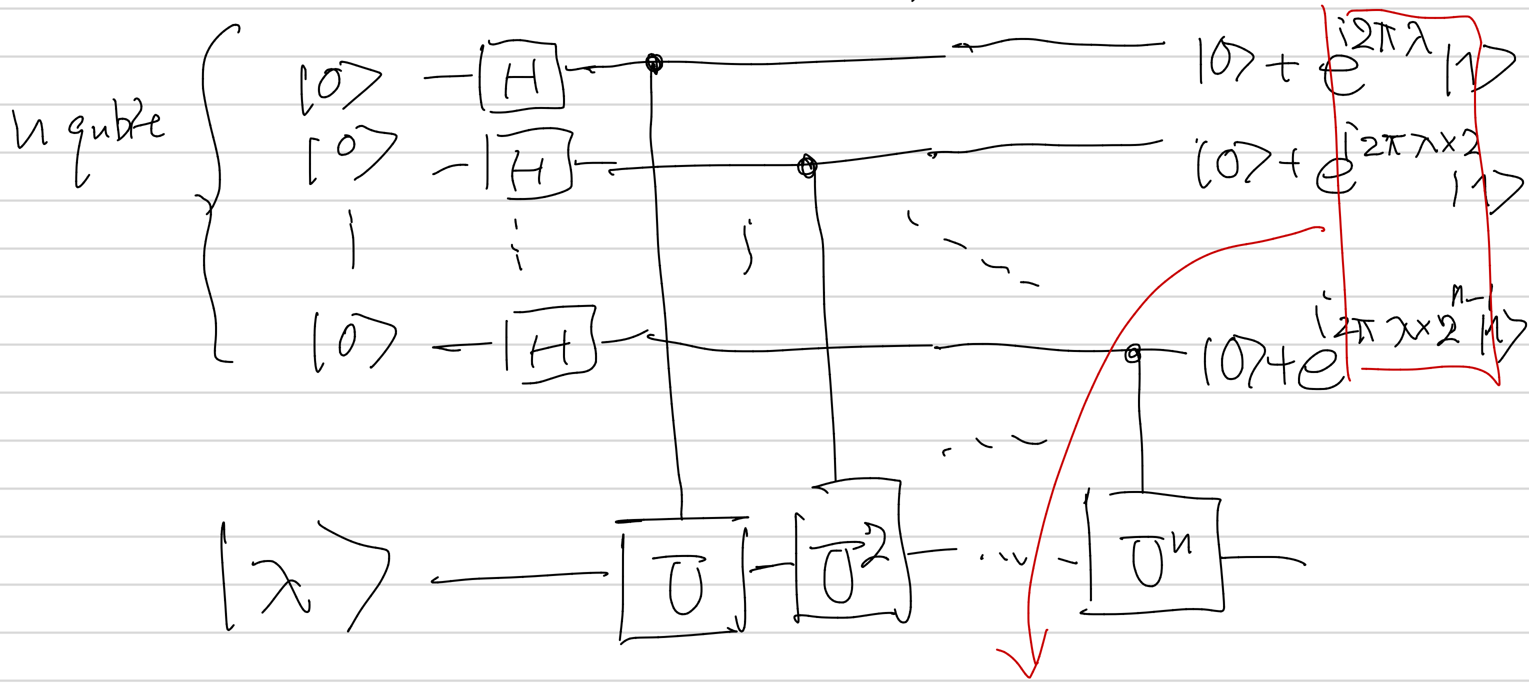
・Kitaev の位相推定。

→ λを n桁まで求める。

$$\lambda = 0.j_1 j_2 \cdots j_n \qquad \left(\lambda = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{1}{2}\right)^k j_k\right) \quad j_k \in \{0,1\}$$

2進数の少数。

(例 $0.1 = \frac{1}{2}$, $0.01 = \frac{1}{4}$, $0.101 = \frac{1}{2} + \frac{1}{8}$)



$$\lambda \times 2^k = \underbrace{j_1 j_2 \cdots j_k}_{2\pi\text{の整数倍}} . j_{k+1} \cdots j_n$$

○ 量子フーリエ変換

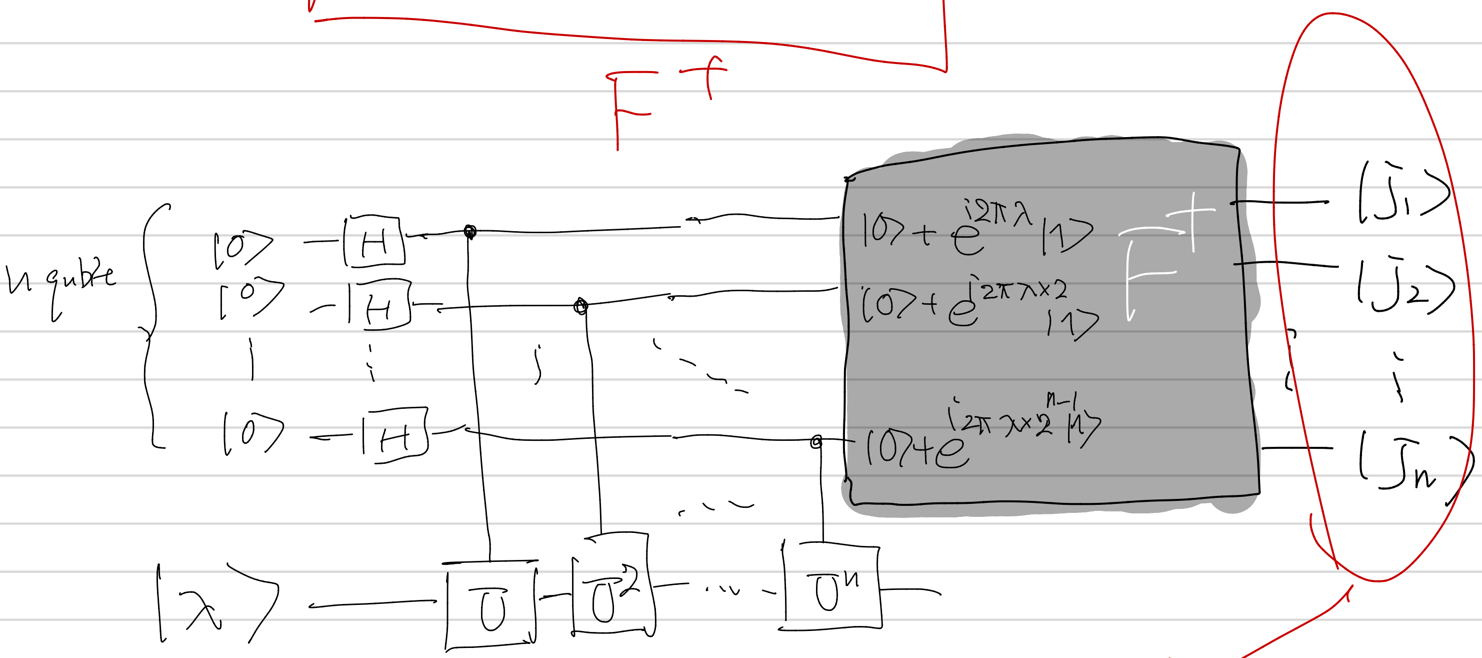
$x, y = 0, 1, \cdots, N-1$ とする.

$$F|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} e^{2\pi i \frac{xy}{N}} |x\rangle$$

↓ 2進数で書き直すと.

$$F|y_1 \cdots y_n\rangle = \bigotimes_{k=1}^{n} \left(\frac{|0\rangle + e^{2\pi i \times 0.y_k y_{k+1} \cdots y_n} |1\rangle}{\sqrt{2}} \right)$$

$F^\dagger$



n桁まで位相が求まった.

○素因数分解、(Shor)

→ ある特殊な U の固有値を求める

N を素因数分解したいとする。

互いに素な x を選ぶ

$$U_x : |y\rangle \longrightarrow |x \cdot y \bmod N\rangle$$

$y \in \{0, \cdots, N-1\}$

実は、

$$U_x |u_s\rangle = \exp\left[\frac{2\pi i s}{r}\right] |u_s\rangle$$

s：固有値のラベル。

$\exp\left[\frac{2\pi i s}{r}\right]$：固有値。

$$|u_s\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{k=0}^{r-1} \exp\left[\frac{-2\pi i s k}{r}\right] |x^k \bmod N\rangle$$

r：位数 $x^r \equiv 1 \pmod N$

Kitaev の位相推定より $\frac{s}{r}$ が求まる。

$$x^r \equiv 1 \pmod N$$

$$(x^{\frac{r}{2}} - 1)(x^{\frac{r}{2}} + 1) \equiv 0 \pmod N$$

これらとNの最大公約数が因数

(例) $N = 143$, $x = 7$

$7^1 \equiv 7$
$7^2 \equiv 49$
$7^3 \equiv 57$
$7^4 \equiv 113$
$7^5 \equiv 76$
$7^6 \equiv 103$

$7^7 \equiv 6$
$7^8 \equiv 42$
$7^9 \equiv 8$
$7^{10} \equiv 56$
$7^{11} \equiv 106$
$7^{12} \equiv 27$
$7^{13} \equiv 46$

$7^{14} \equiv 36$
$7^{15} \equiv 109$
$7^{16} \equiv 48$
$7^{17} \equiv 50$
$7^{18} \equiv 64$
$7^{19} \equiv 19$
$7^{20} \equiv 133$

$7^{21} \equiv 73$
$7^{22} \equiv 82$
$7^{23} \equiv 2$
$7^{24} \equiv 14$
$7^{25} \equiv 98$
$7^{26} \equiv 114$
$7^{27} \equiv 83$
$7^{28} \equiv 9$

$7^{29} \equiv 63$
$7^{30} \equiv 12$
$7^{31} \equiv 84$
$7^{32} \equiv 16$
$7^{33} \equiv 112$
$7^{34} \equiv 69$
$7^{35} \equiv 54$

$7^{36} \equiv 92$
$7^{37} \equiv 72$
$7^{38} \equiv 75$
$7^{39} \equiv 96$
$7^{40} \equiv 100$
$7^{41} \equiv 128$
$7^{42} \equiv 38$

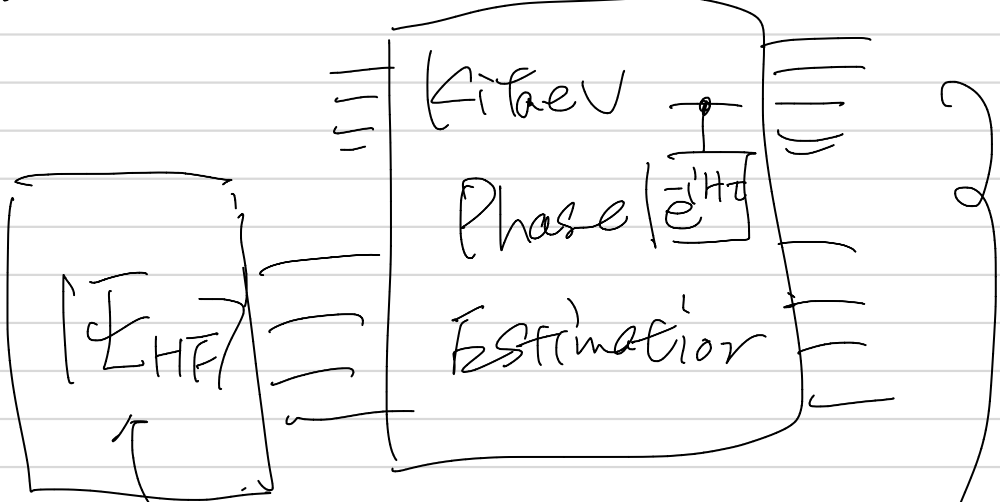
$7^{43} \equiv 123$
$7^{44} \equiv 3$
$7^{45} \equiv 21$
$7^{46} \equiv 4$
$7^{47} \equiv 28$
$7^{48} \equiv 53$
$7^{49} \equiv 85$
$7^{50} \equiv 23$

$7^{51} \equiv 18$
$7^{52} \equiv 126$
$7^{53} \equiv 24$
$7^{54} \equiv 25$
$7^{55} \equiv 32$
$7^{56} \equiv 81$
$7^{57} \equiv 138$
$7^{58} \equiv 108$

$7^{59} \equiv 41$
$7^{60} \equiv 1$

$7^{30} - 1 = 11$
$7^{30} + 1 = 13$
$11 \times 13 = 143$

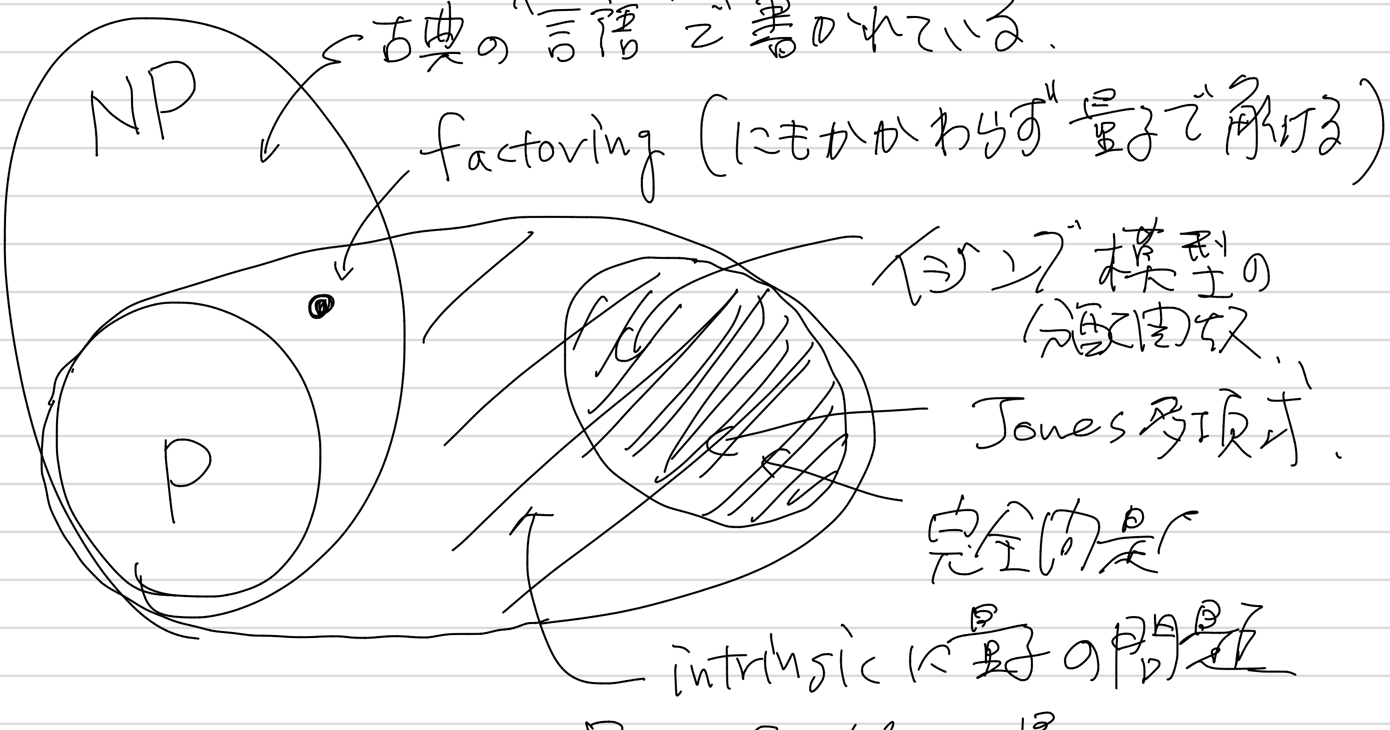
○量子化学計算



分子の基底状態(近似)　　エネルギー

Aspuru-Guzik Science 2005

問題が、intrinsicに量子で記述



量子化学計算, 量子シミュレーション.