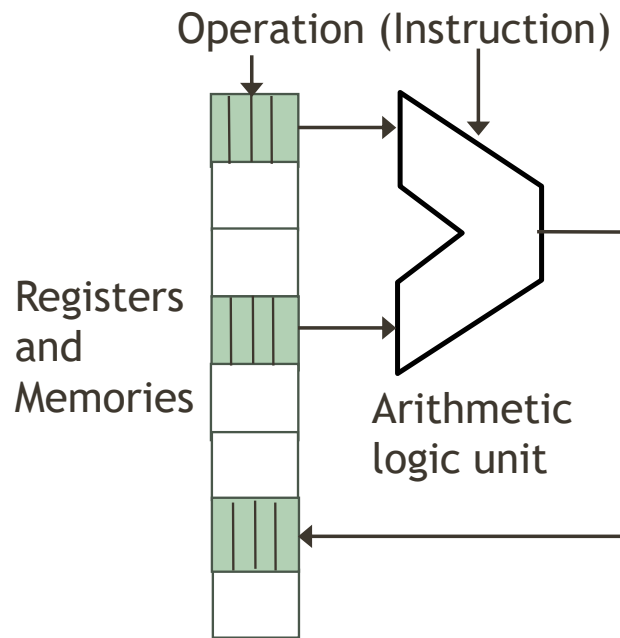


第6回 ニューロモルフィックシステムと量子コンピュータ

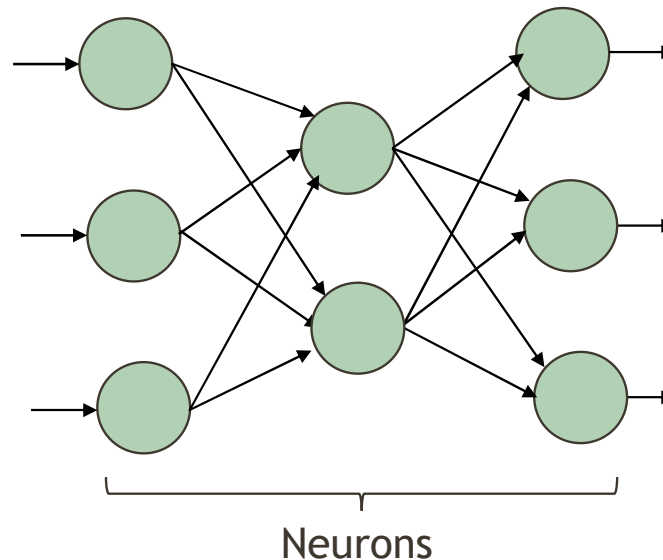
情報通信コース 北川章夫, Microelectronics Research Lab. (MeRL)

各種計算方式の比較



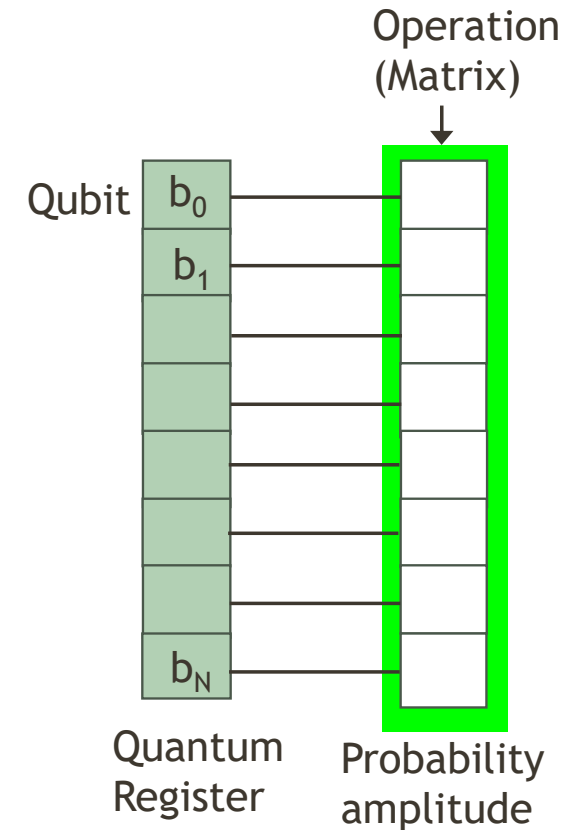
ノイマン型

演算器が分離しているため命令毎にデータのR/Wが発生（フォン・ノイマン・ボトルネック）



ニューラルネットワーク

ニューロンの中で演算を行うため、ハードウェア化すれば、演算が並列化されるが、回路規模は巨大化

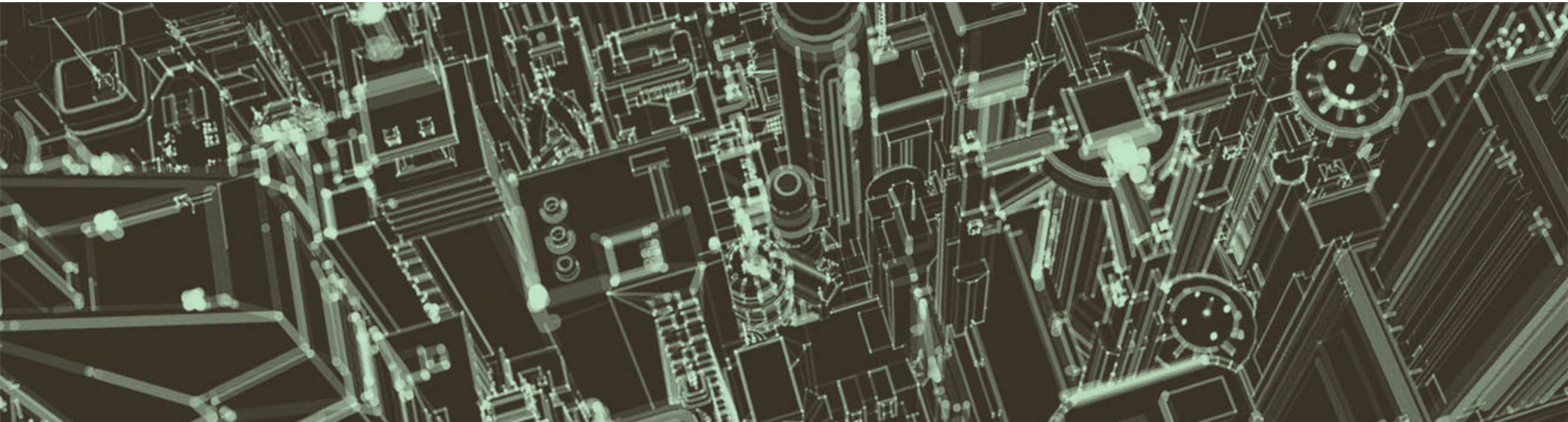


量子コンピュータ

量子レジスタ値の発生確率（確率振幅）を直接操作するため、データのR/Wが発生しない

今回の内容

1. NPU(Neural Processing Unit)とニューロモルフィックシステム (Neuromorphic system)
2. ニューラルネットワークと論理回路
3. 量子力学の基本概念 (最低限、これだけ知っていればOK)
4. 量子コンピュータの基本命令
5. 課題6



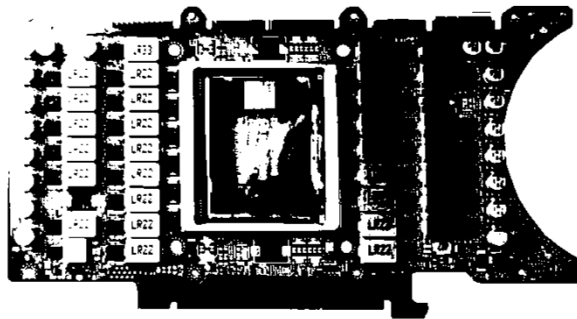
6-1 NPU(Neural Processing Unit)とニューロモルフィックシステム(Neuromorphic system)

ソフトウェアAIとハードウェアAI

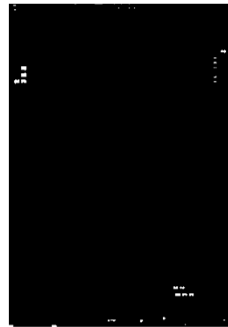


AIのハードウェア

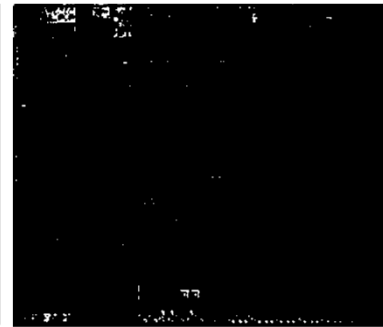
	GPU	NPU(TPU)搭載AIチップ	ニューロモルフィックチップ
実装方法	ソフトウェア (+ハードウェアアクセラレーション)	ソフトウェア (+ハードウェアアクセラレーション)	ハードウェア
並列度	行列演算単位 (NVIDIAのTensorコア等)	GPUと同等 (AIに最適化)	ニューロン単位
消費電力	高	低	極小



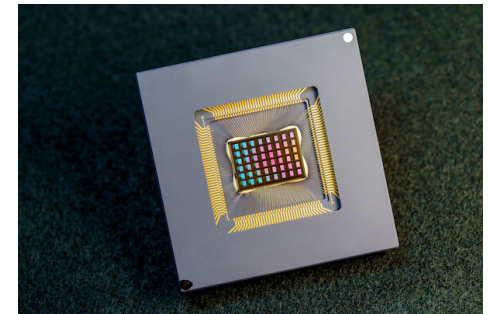
NVIDIA H100¹



Apple A17 Pro¹



Google Tensor G3¹

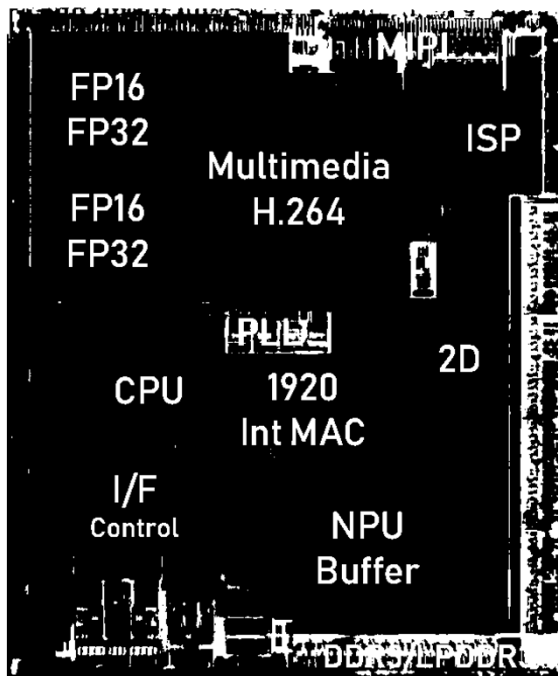


NeuRRAM chip²
カリフォルニア大学

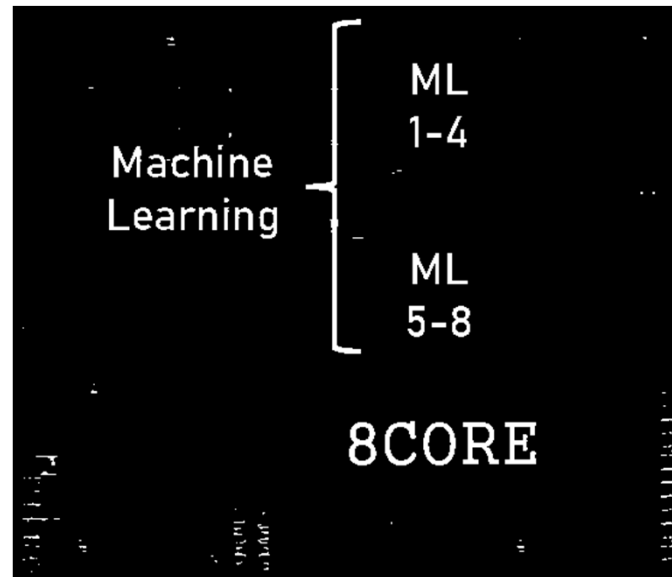
1. 出典: (株) テカナリエ

2. 出典: Nature: <https://www.nature.com/articles/s41586-022-04992-8>

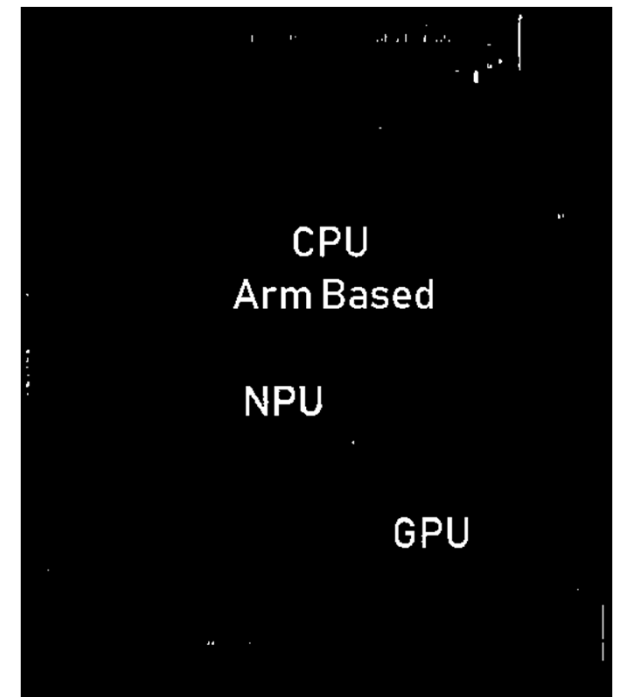
AIチップ(NPU、TPU)によるソフトウェアAI



ROCKCHIP社 (中国) RK1808
製造: FD-SOI 22nm (米国Global Foundries)
性能: 3TOPS (3兆-operations/s)

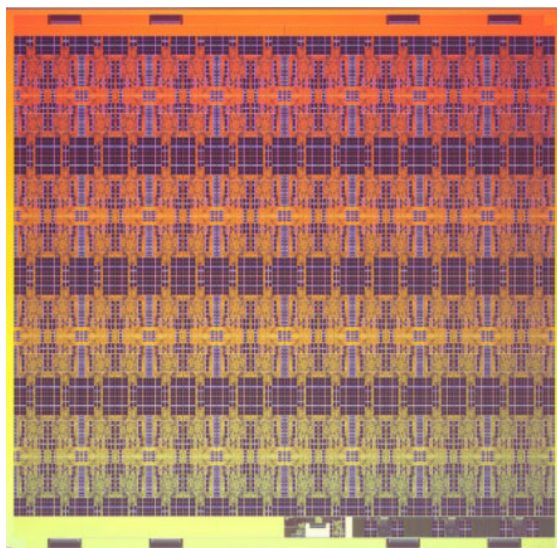


Apple社 (米国) A13 BIONIC Neural Engine
製造: CMOS 7nm+ (台湾TSMC)
性能: 6TOPS



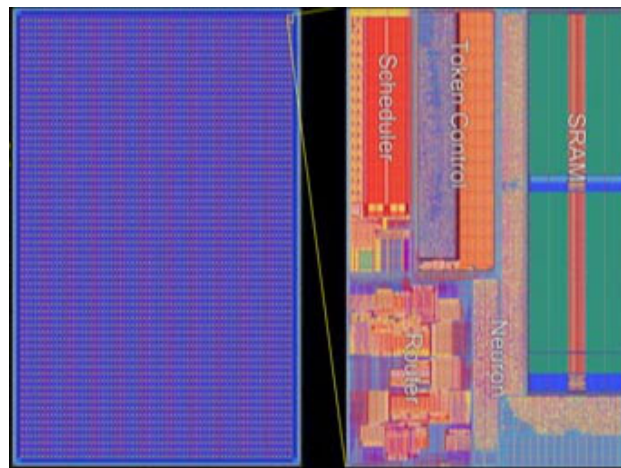
HiSilicon社 (中国) KIRIN990 5G
製造: CMOS 7nm+ (台湾TSMC)
性能: 8TOPS
出典: (株) テカナリエ

ニューロモルフィック（ニューロシナプティック）チップによるハードウェアAI



Intel社（米国）Loihi
製造：CMOS 14nm
性能：130,000 neuron,
Synaptic update 120pJ,
Neuron update 67pJ
出典：IEEE Micro, vol.38, No.1, 2018.

ニューロンのアレイ ニューロンの拡大写真

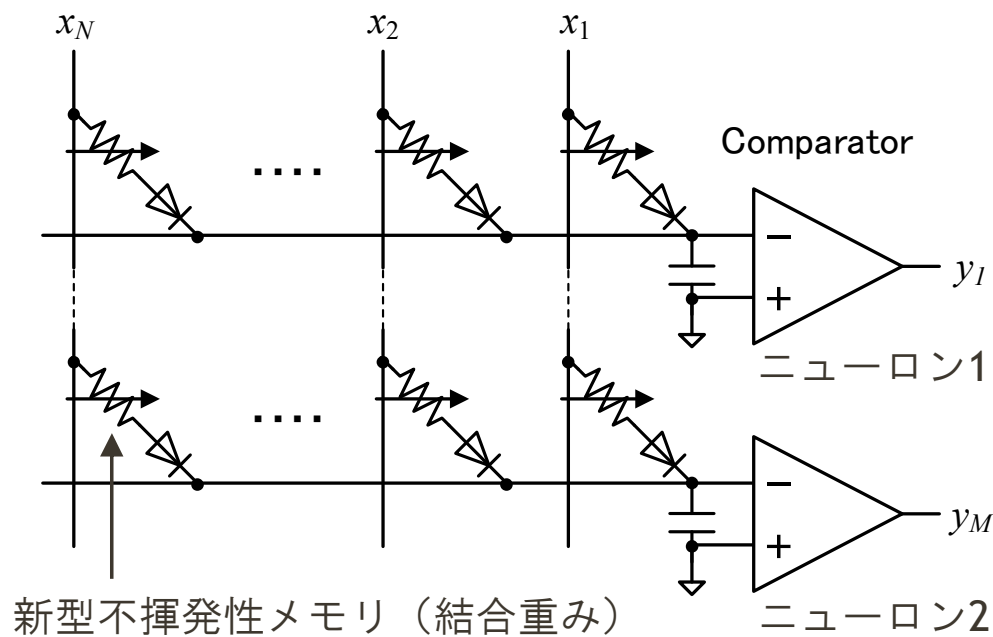


IBM社（米国）TrueNorth
製造：CMOS 14nm
性能：1,000,000 neuron,
6,000 frames per Watt
出典：PNAS, vol.113, No.41, 2016

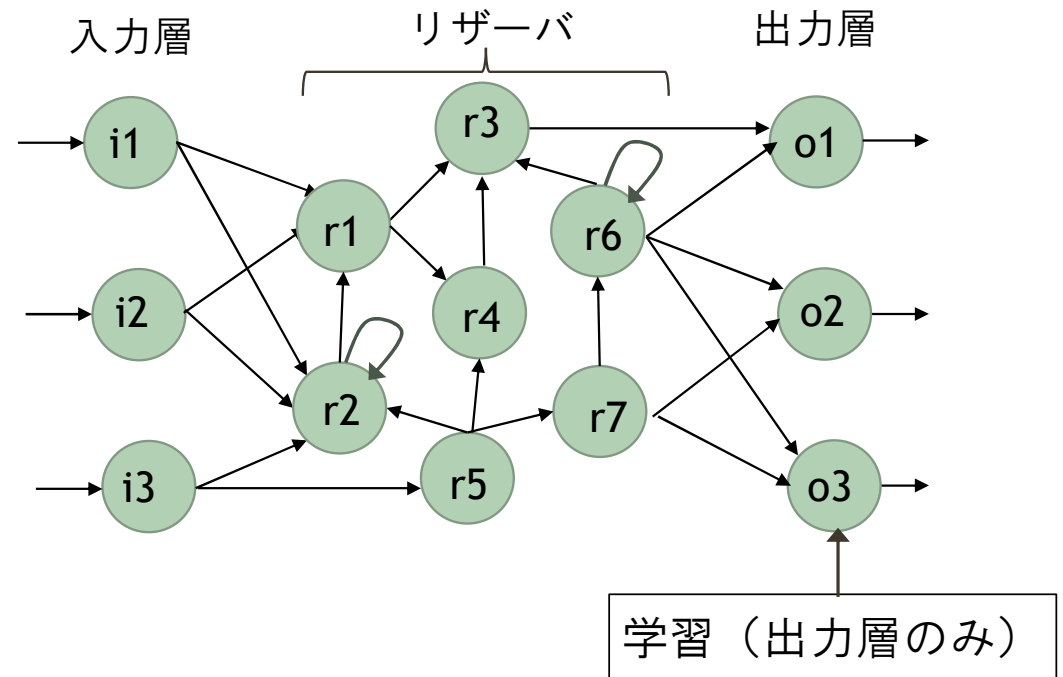
一般的なAIチップは、ディープラーニングのアルゴリズムを高速実行するためのAIアクセラレータを搭載したマイクロプロセッサであり、ニューラルネットワークの構成が可変。

一方、ニューロモルフィックチップは、DNN(Deep Neural Network)の機能と構造を不揮発性メモリを含む集積回路で模倣している。ニューロモルフィックチップは、消費エネルギーが極めて小さく、自律的に学習を行う（センサへの組み込みなどで有利）。

ニューロモルフィックチップの構造例

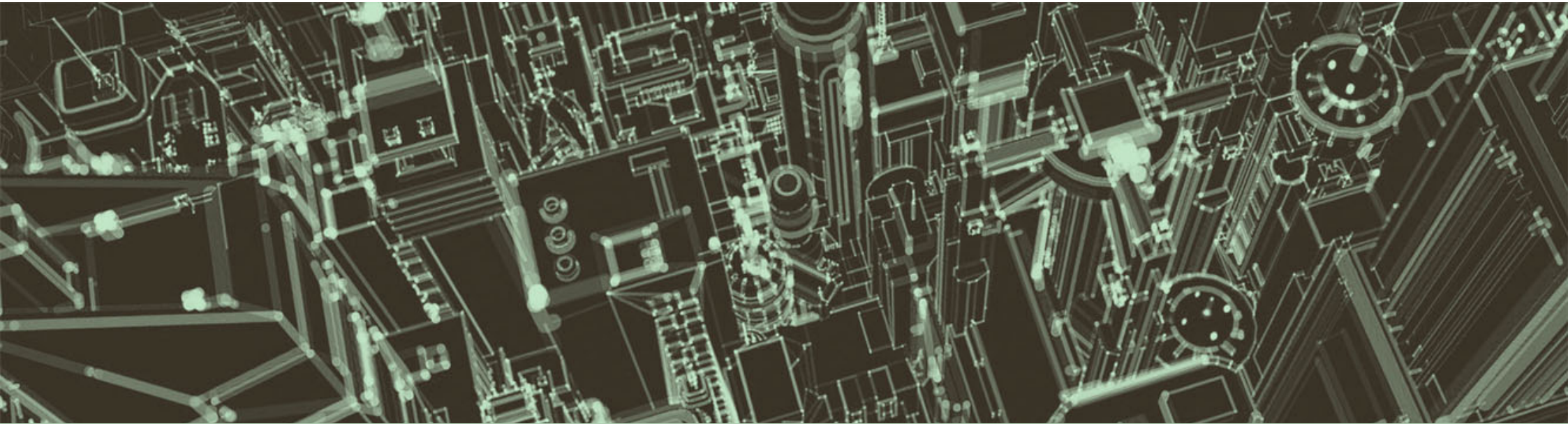


スパイク入力型積和演算回路 (シナプス数
×ニューロン数の演算を一度に実行)



リザーバ計算モデル²

2. 電子情報通信学会誌vol.102, p.108, 2019.



6-2 ニューラルネットワークと論理回路

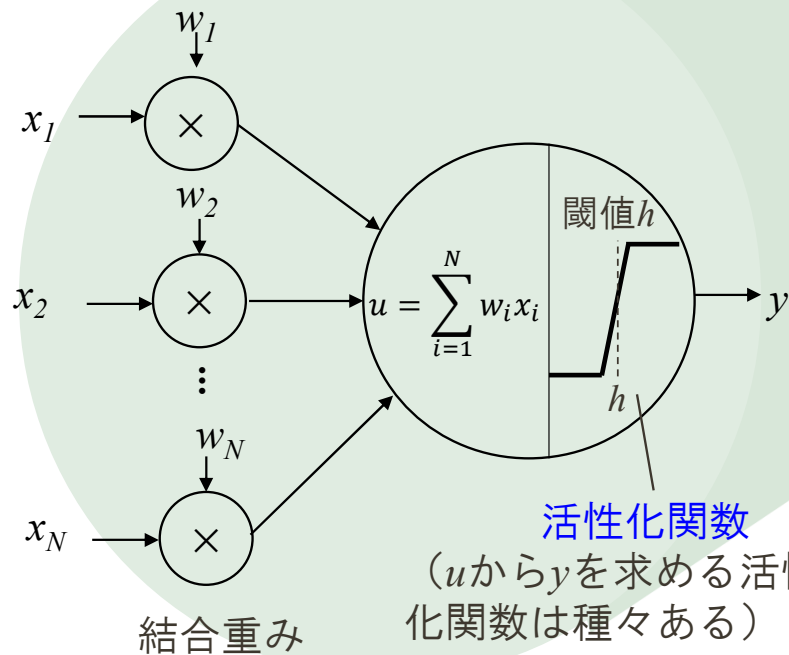
ニューロンと論理ゲートの関係



多層パーセプトロン(MLP)

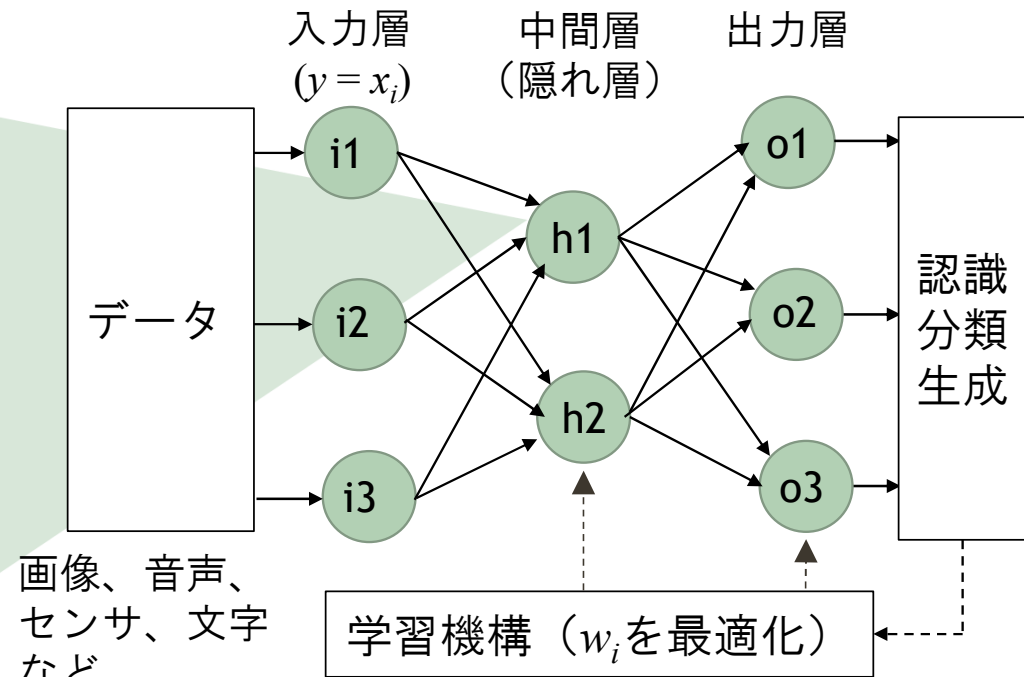
ニューロンモデル

(神経細胞のスパイク頻度のみを数値化、
タイミング情報は無視)

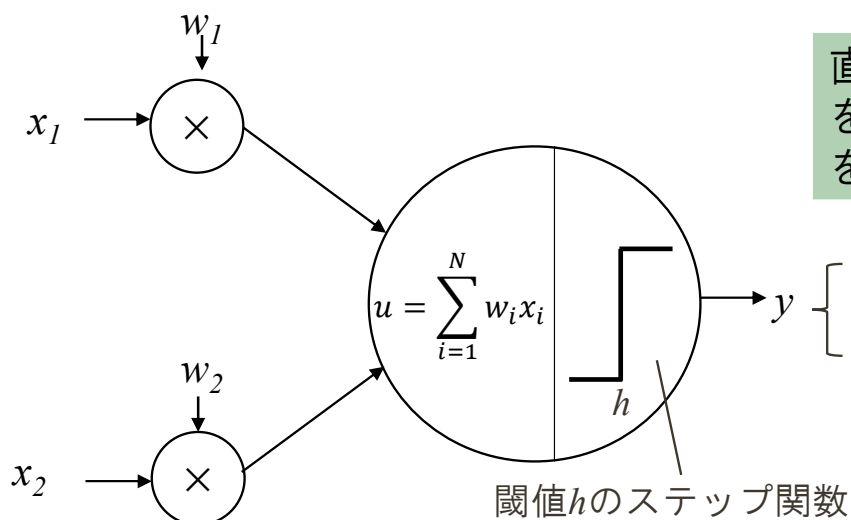


ニューラルネットワーク

(ニューロンのネットワークの総称)



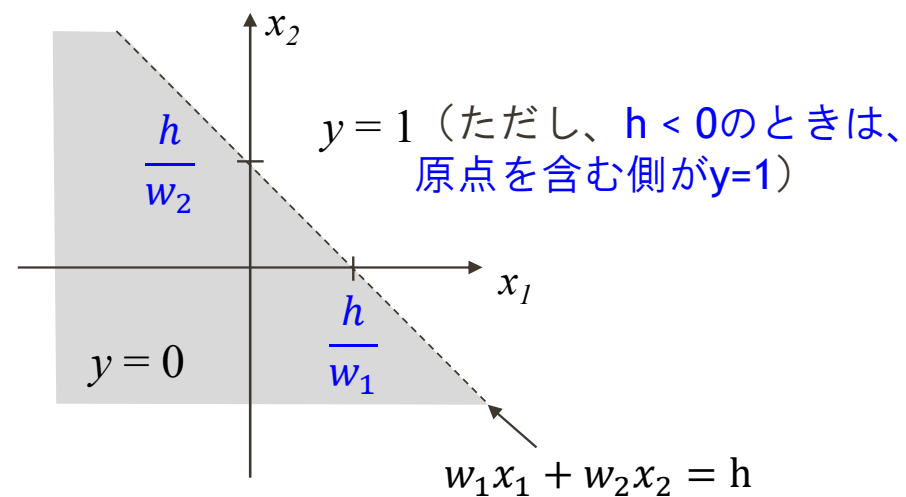
ニューロンの機能



ステップ関数を応答関数としたニューロン

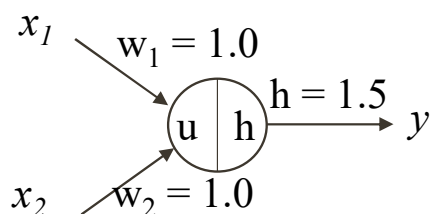
直線（3入力以上では平面）で平面（3入力以上では空間）を2つに分けて入力がどちらに属するかを判定する2値分類を行っている。

$$\begin{cases} w_1 x_1 + w_2 x_2 \geq h & \text{のとき } y = 1 \\ w_1 x_1 + w_2 x_2 < h & \text{のとき } y = 0 \end{cases}$$

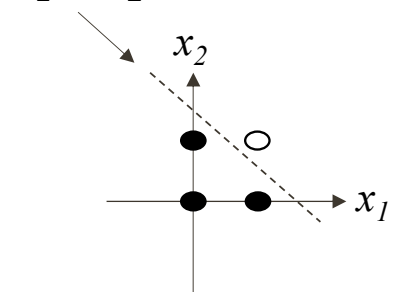


ニューロンと論理回路の関係

AND



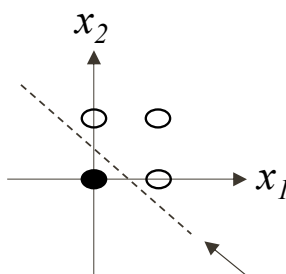
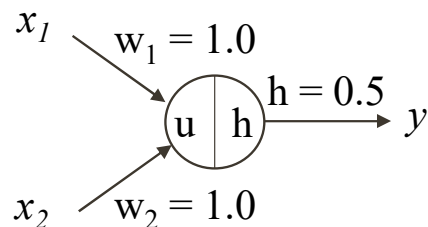
$$x_1 + x_2 = 1.5$$



白丸 $y = 1$, 黒丸 $y = 0$

x_1	x_2	u	y
0	0	0.0	0
0	1	1.0	0
1	0	1.0	0
1	1	2.0	1

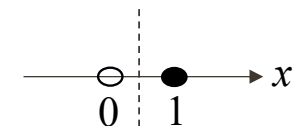
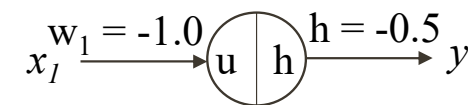
OR



$$x_1 + x_2 = 0.5$$

x_1	x_2	u	y
0	0	0.0	0
0	1	1.0	1
1	0	1.0	1
1	1	2.0	1

NOT



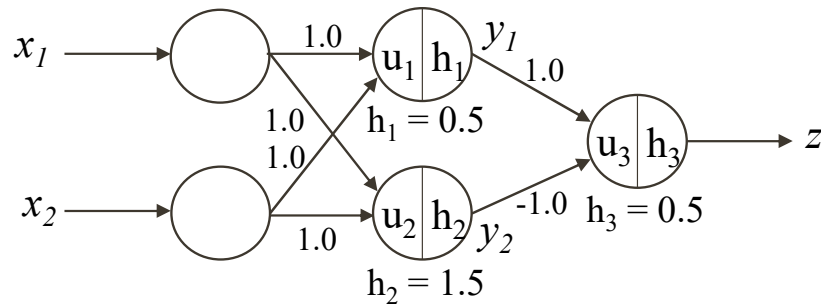
$$-x_1 = -0.5$$

x_1	u	y
0	0.0	1
1	-1.0	0

ニューロンは汎用論理ゲートの機能を持つ (ニューラルネットワークは論理回路と等価)

練習問題 1

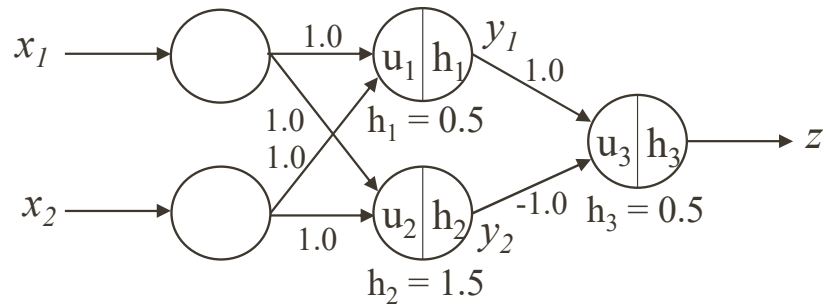
1. EXORは、1本の直線で分割することができない（下図参照）。下記左の2入力1出力の3層パーセプトロンについて、下記右の表を作成し、EXORが実行できることを示せ。また、 x_1 - x_2 平面における $y_1 = 1, y_2 = 1$ の範囲と、 y_1 - y_2 平面における $z = 1$ の範囲を図示せよ。



矢印に付された数字は結合重みを表す。

x_1	x_2	u_1	u_2	y_1	y_2	u_3	z
0	0						
0	1						
1	0						
1	1						

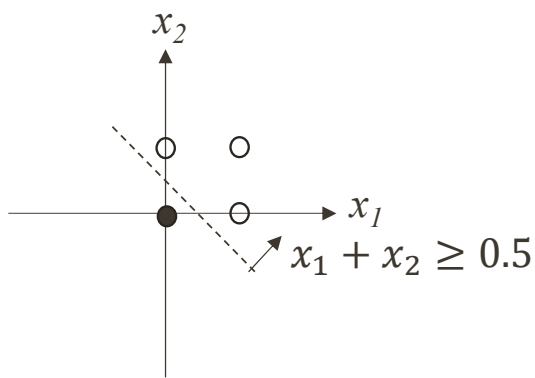
練習問題 1 の解答例



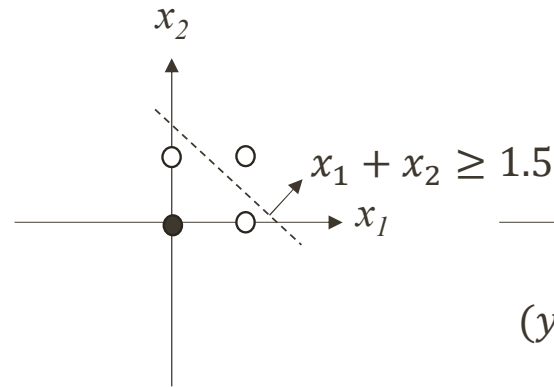
x_1	x_2	u_1	u_2	y_1	y_2	u_3	z
0	0	0.0	0.0	0	0	0.0	0
0	1	1.0	1.0	1	0	1.0	1
1	0	1.0	1.0	1	0	1.0	1
1	1	2.0	2.0	1	1	0.0	0

$x_1, x_2 \rightarrow z$ がEXORの真理値表となる。

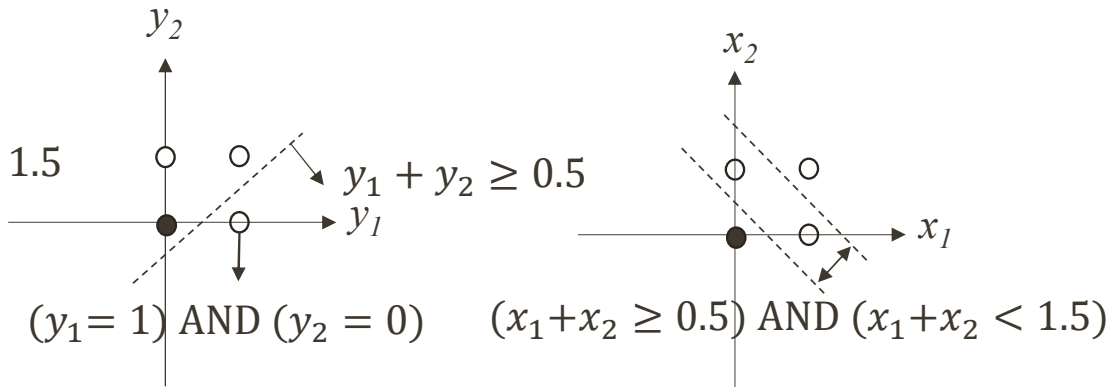
$y_1 = 1$ の範囲



$y_2 = 1$ の範囲

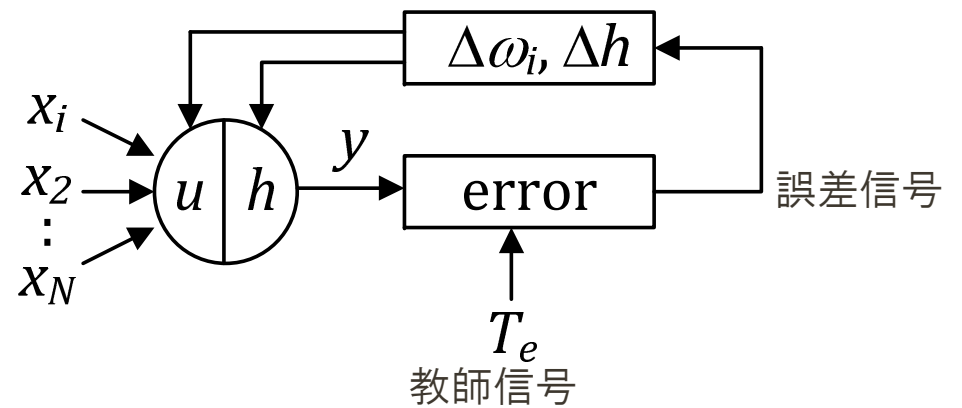


$z = 1$ の範囲



多層パーセプトロンの学習手順（誤差逆伝播法）

1. w_i をランダムに与え、データ x_i を入力
2. 入力層について $u = \sum_{i=1}^N w_i x_i$ を計算する
3. 入力層の各ニューロン i_i について、出力 y を求める
4. 中間層の各ニューロン h_i について、出力 y を求める
5. 出力層の各ニューロン o_i について、出力 y を求める
6. 出力層の出力 y と期待される結果 T_e の誤差 $error$ を求め o_i についてバックプロパゲーション（ w_i と h の修正）を行う
7. 中間層 h_i + 出力層 o_i についてもバックプロパゲーションを行う
8. 誤差が変化しなくなるまでバックプロパゲーションを繰り返して学習結果（最適な w_i の値）を得る

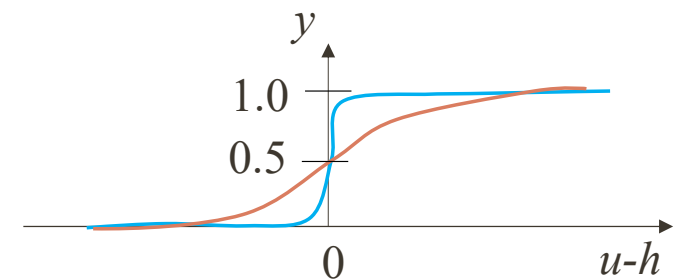


修正量の計算法

$$\left[\begin{array}{l} \Delta\omega_i = -\varepsilon \frac{d(\text{error})}{d\omega_i} = -\varepsilon \frac{d(\text{error})}{dy} \frac{dy}{du} \frac{du}{d\omega_i} \quad (\text{結合重みの修正}) \\ \Delta h = -\varepsilon \frac{d(\text{error})}{dh} = -\varepsilon \frac{d(\text{error})}{dy} \frac{dy}{dh} \quad (\text{閾値の修正}) \end{array} \right.$$

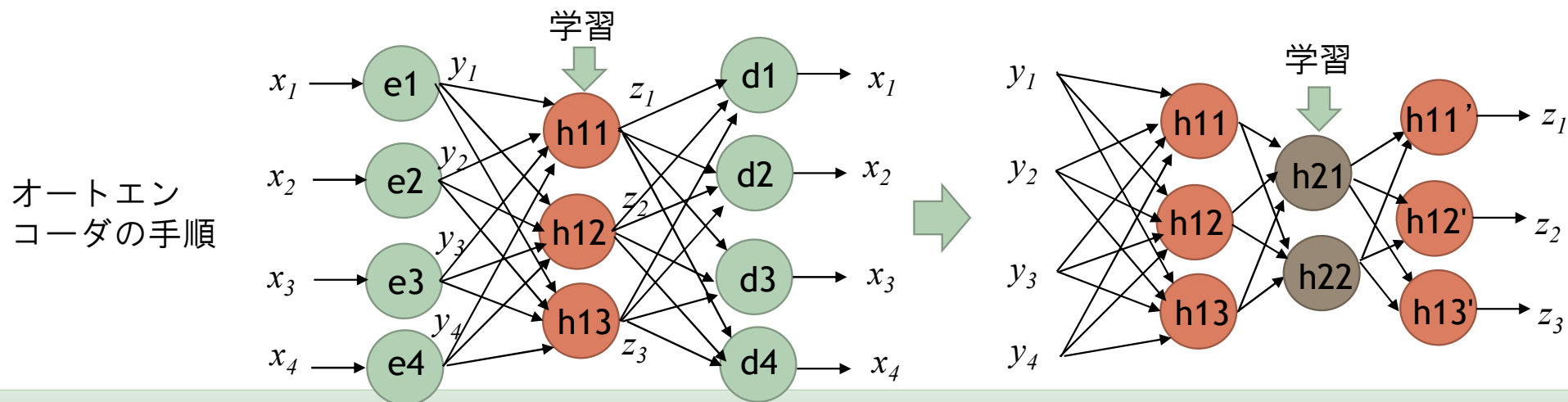
活性化関数として、微分可能なシグモイド関数 $y(u)$ を使用した場合、

$$\left[\begin{array}{l} y = \frac{1}{1 + e^{-(u-h)/u_0}} \quad h: \text{閾値}, u_0: \text{勾配の大きさ} \\ u = \sum_{i=1}^N w_i x_i \end{array} \right.$$



DNN (Deep Neural Network)

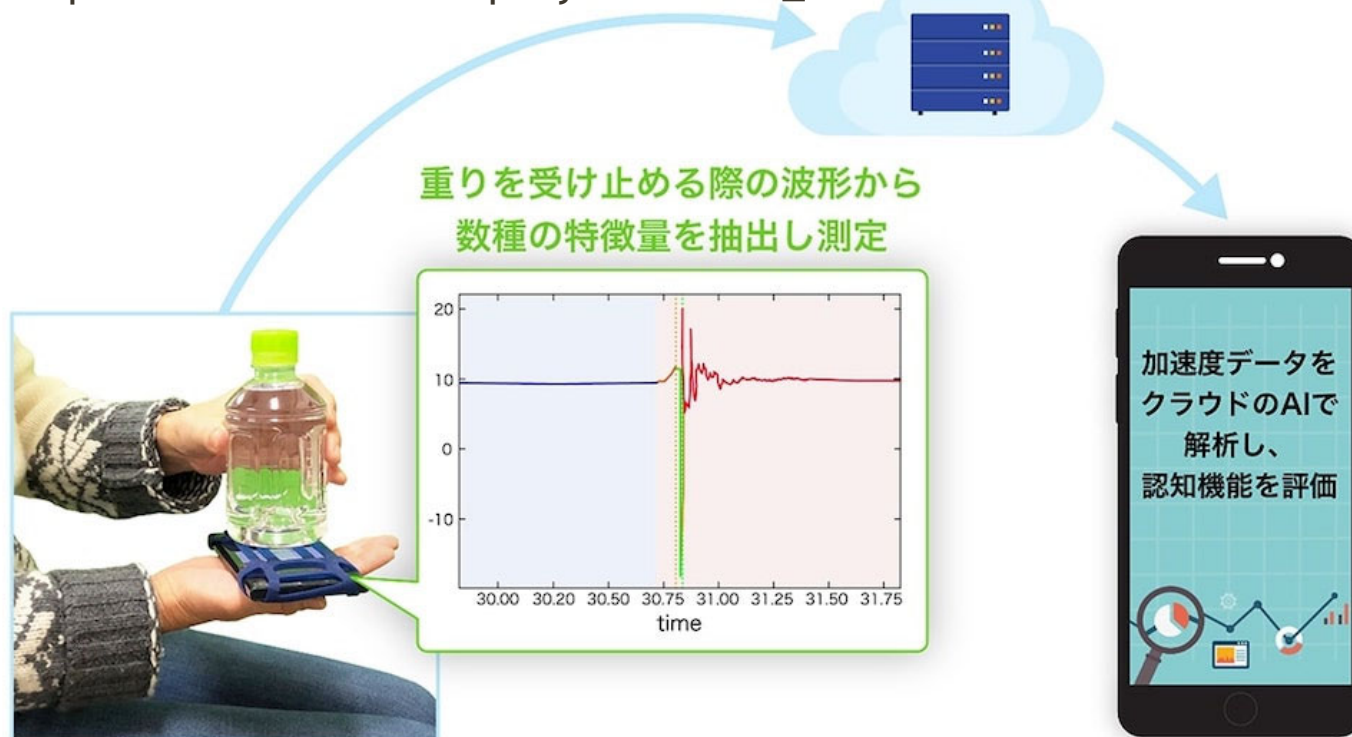
- ▶ 中間層が2層以上あるニューラルネットワーク（動作原理は多層パーセプトロンと同じ）
- ▶ 前述のバックプロパゲーションでは、2層以上の中間層をもつニューラルネットワークの学習が上手くできないことが知られている
- ▶ 2006年にオートエンコーダまたは制限ボルツマンマシンを用いた**教師なし学習**（訓練入力データは必要）により、複数の隠れ層を層毎に学習させる(Pre-training)方法が開発された（ただし、この方法は現在は使用されない）
- ▶ ネットワークの構造によって、得意分野が異なる。**CNN(Convolutional Neural Network, 畳み込みニューラルネットワーク, 画像処理でよく使われる)**, **LSTM(Long short-term memory, 音声処理でよく使われる)**などが有名
- ▶ 特徴量が自動的に求められるが、入力と出力の因果関係を説明することが困難



認知機能低下検知するIoTサービス（米田研究室）

株式会社ACCESS, 医薬保健研究域保健学系 米田研究室

https://www.access-company.com/news_event/archives/20201216/



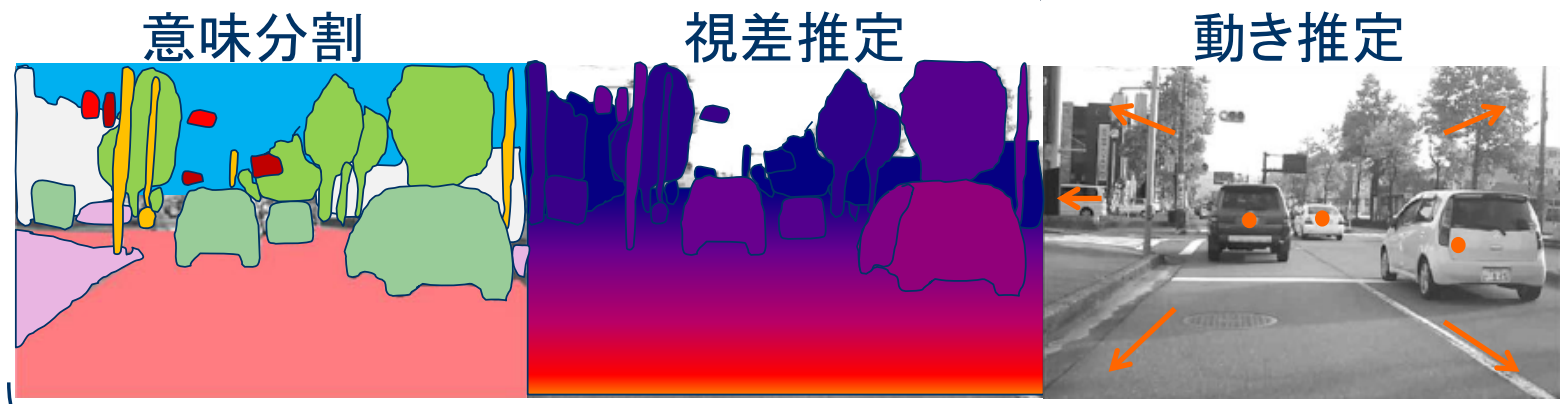
出典：株式会社ACCESS

- スマートフォンの加速度センサを利用し、小脳による身体制御状態を手の揺れにより計測
- 認知機能に関する特徴量をクラウドAIを用いて抽出
- 早期に認知機能の低下を定量的に検知することにより、認知症を予防する

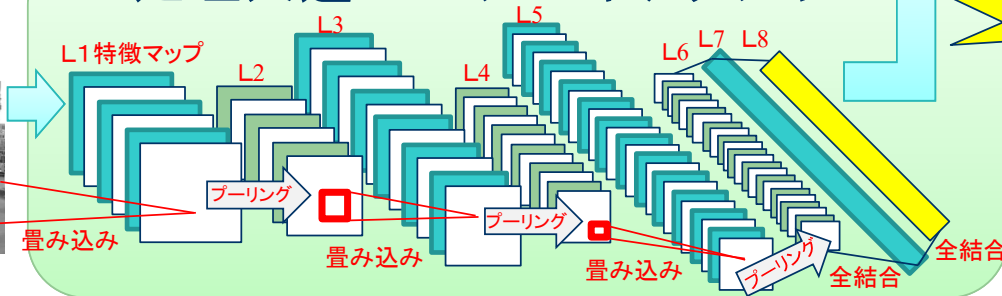
意味分割・視差推定・動き推定用CNN回路(VLSIシステム研究室)

CNN(畳み込みニューラルネット)によるカテゴリ分類は人間の識別率95%を超え、意味分割や視差/動き推定へ発展

自動運転に必須なSLAM(自己位置推定・環境地図作成)の基礎となる3タスクを同時処理するCNN回路の開発 ➡ 学習済みモデルをエッジAIに搭載



全処理共通CNNアーキテクチャ



全処理同時
実時間実行



提供: 金沢大学
深山研究室

Multimedia Integrated Circuit System Lab.
KANAZAWA University



スマホを利用したIoT環境モニタリングの例（集積回路工学研究室）

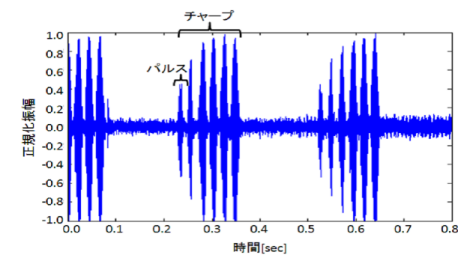
修士1年和田智晃さん：エンターテインメントコンピューティング最優秀賞

定点観測用デバイス



LTE→インターネット

線形予測符号を特徴量とした自動分類



Google マップ表示

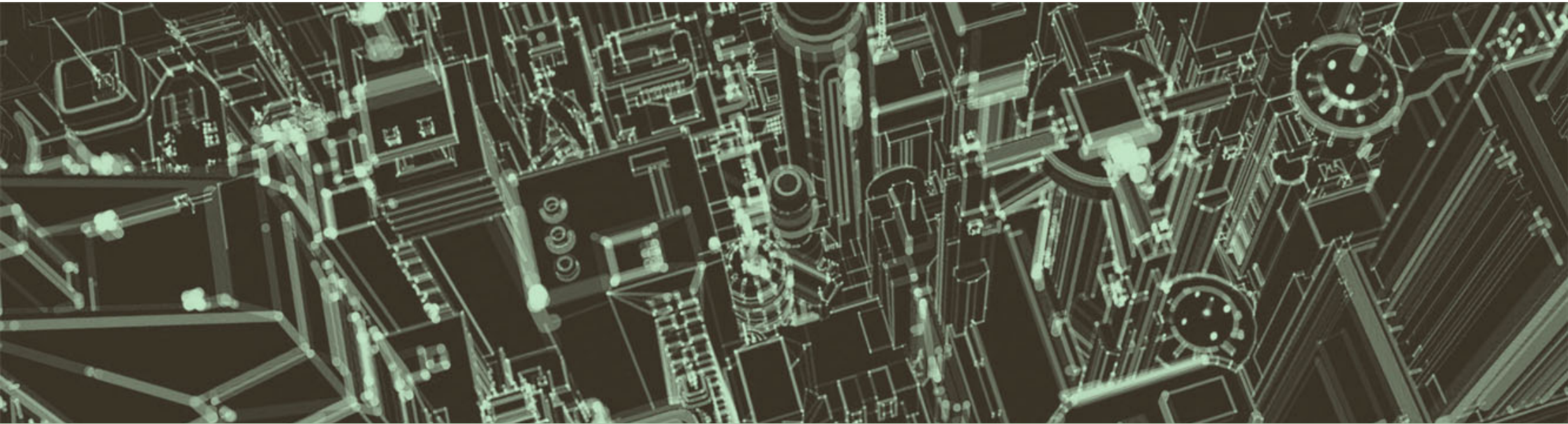
Carrier 2:21 PM
コオロギ
ハラオカメコオロギ

haraokame 66.666667 tszuresase 33.333333

なまえ：ハラオカメコオロギ
大きさ：13-18mm
せいそくち：8月から10月にかけてあきち、くさちなどでみられる
かおの下半分がふくれていて、おかめ（おたふく）のように見えることからこのなまえがついた



子供向けアプリ(録音)

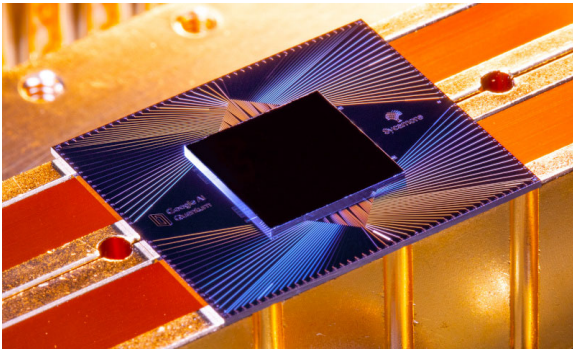


6-3 量子力学の基本概念

量子力学に出てくる概念と用語

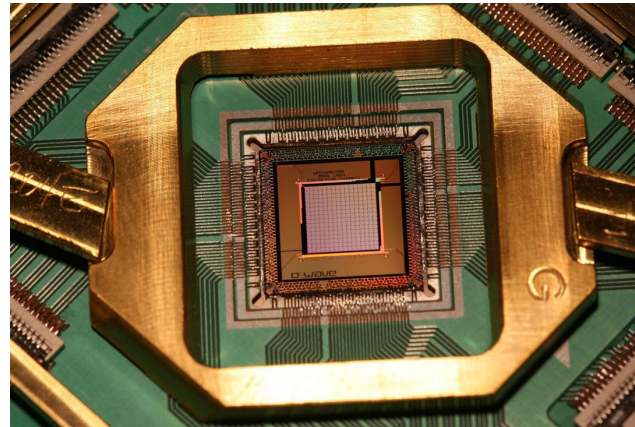


量子コンピュータの外観



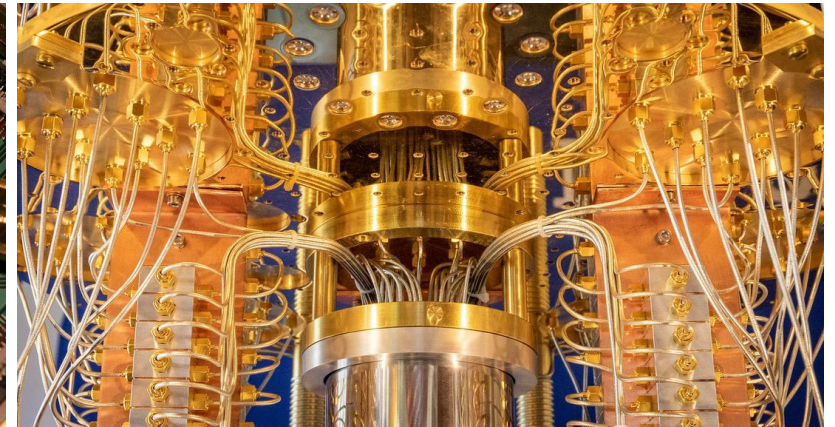
Google Sycamore (Transmon superconducting qubits)

出典: PCMag



D-Wave Advantage (量子アニーリング方式: 組み合わせ最適化、分類問題等に特化したタイプ)

出典: D-Wave

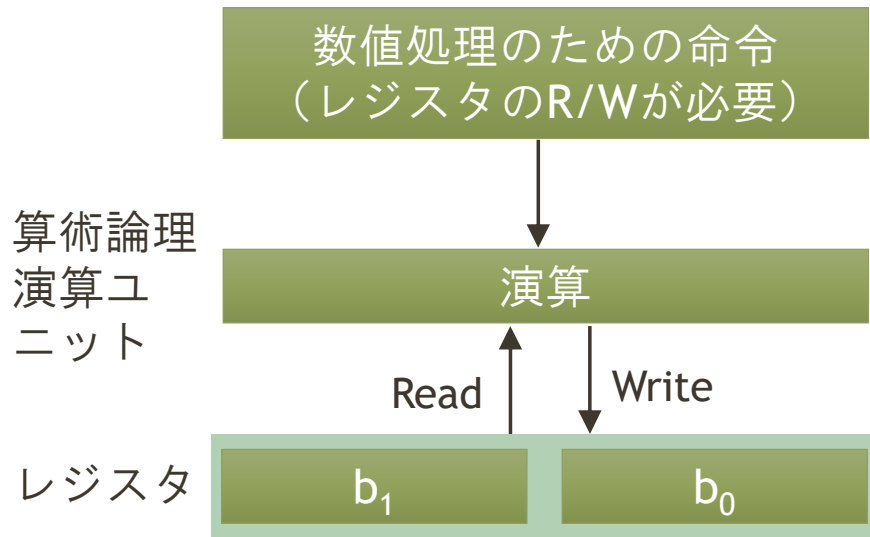


IBM Quantum System (量子ゲート方式: 汎用タイプ)、写真は冷却器を含む

出典: Stephen Shankland/CNET

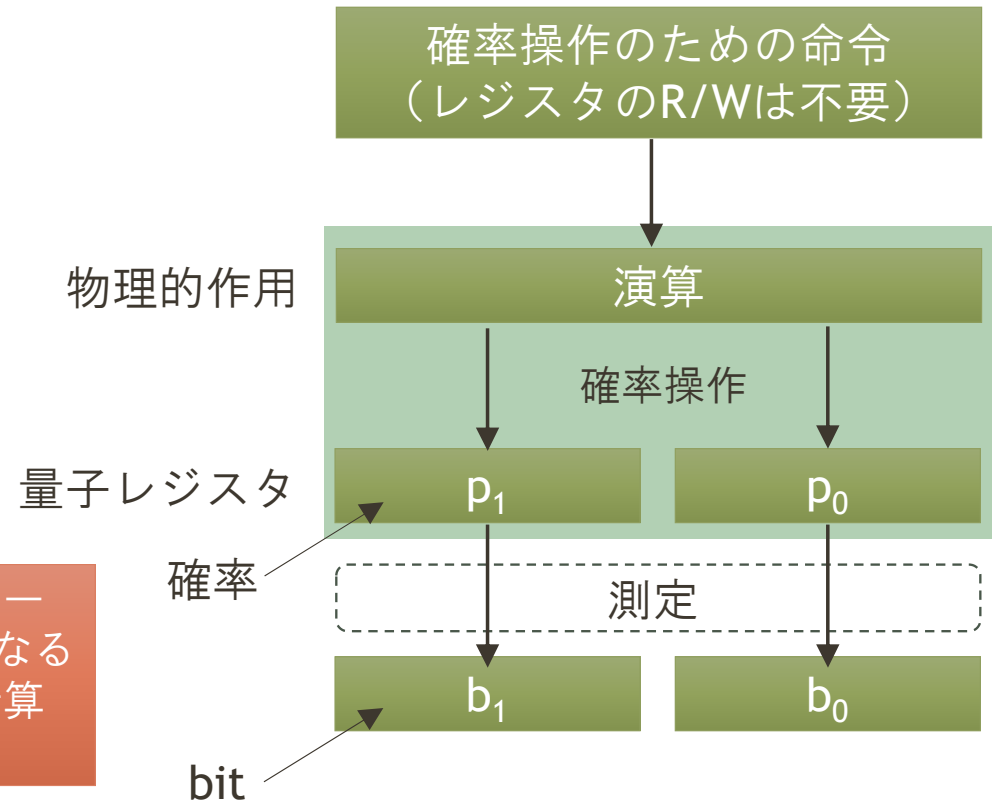
古典コンピュータと量子コンピュータの違い

古典コンピュータの動作



- 古典コンピュータはbit操作命令、量子コンピュータは確率操作命令を持つためアルゴリズムも異なる
- bitよりも確率のほうが情報量が多いため並列計算と同等の効果がある

量子コンピュータの動作

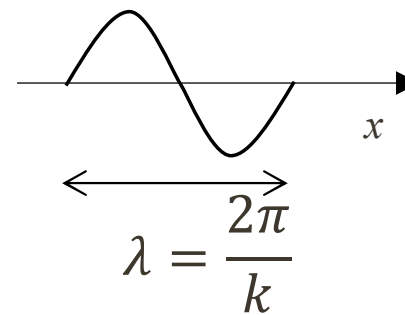
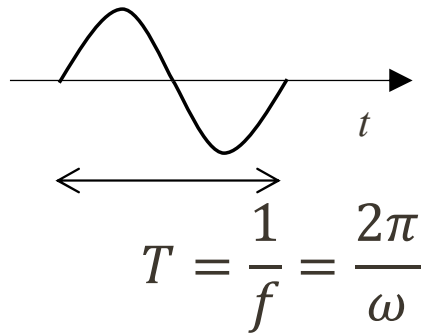


粒子と波動の関係

Einstein - de Broglie の式 (多数の実験から求められた)

$$\left\{ \begin{array}{ll} E = \hbar\omega = \hbar(2\pi f) & E: \text{エネルギー}, \omega: \text{角周波数} \\ p = \hbar k = \hbar\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) & p: \text{運動量}, k: \text{波数} \end{array} \right.$$

$$\hbar = 1.54 \cdot 10^{-34} \text{Js} \quad (\text{Dirac's constant})$$



エネルギーと運動量 (粒子の性質) が角周波数と波数 (波動の性質) に関係づけられた。

波動関数と角周波数、波数の関係

何の波動かはさておき、空間内で均一な定常状態の波動を複素ベクトルで表し、 ω, p と波動の関係を求めてみる（準備）。

プサイ

$$\psi(x, t) = e^{j(kx - \omega t)}$$

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = (-j\omega)\psi$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = (jk)^2\psi$$

$$\omega = j \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}$$

$$k^2 = - \frac{1}{\psi} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2}$$

波動方程式

古典力学におけるエネルギー E と運動量 p の関係（エネルギー保存則）

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{1}{2m}p^2 + V(x) \quad \leftarrow V(x) \text{ はポテンシャルエネルギー}$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 + V(x)$$

$$\hbar \left(j \frac{1}{\psi} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(- \frac{1}{\psi} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \right) + V(x)$$

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t)$$

古典力学が成り立つためには、この式を満足する必要がある。

量子力学の基礎方程式と波動関数

$$\left\{ \begin{array}{l} j\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H\psi(x, t) \quad \text{Schrödinger equation (前スライドの式)} \\ H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad \text{Hamiltonian (エネルギーに対応する演算子)} \end{array} \right.$$

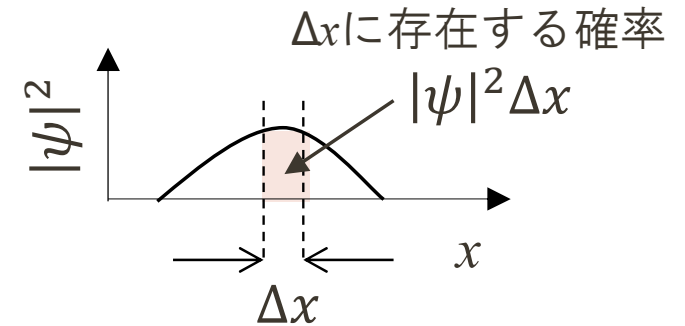
波動 $\psi(x, t)$ は、量子力学で波動関数と呼ばれる。

$\psi(x, t)$ は、何の波動か？

空間内の確率密度を $P(x)$ とするとき、

$P(x) = |\psi|^2 = \psi^* \psi$ と定義すると実験事実をよく説明できる（原子モデルなど）。

ただし、全空間の確率 $= \int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 1$ となるように振幅を規格化する。



演算子と物理量の対応関係

$$E = \hbar\omega = j\hbar \frac{1}{\psi(x,t)} \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} \longrightarrow \left(j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(x,t) = E\psi(x,t)$$

$$p = \hbar k = -j\hbar \frac{1}{\psi(x,t)} \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} \longrightarrow \left(-j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x,t) = p\psi(x,t) \quad (\ast)$$

$$\ast \quad \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} e^{j(kx-\omega t)} = (jk)\psi(x,t)$$

↑
演算子

↑
物理量

同様にして、他の物理量も演算子と対応付けができる。

物理量の期待値

$P(x)$ を確率密度と仮定すると、系全体で測定される物理量の期待値が波動関数 ψ から求められる。

$$\text{存在位置の期待値} \quad \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x P(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx \quad (e^{j\omega t} e^{-j\omega t} = 1 \text{より、時間関数部分は消える})$$

$$\text{エネルギーの期待値} \quad \langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} E P(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* E \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi dx$$

$$\text{運動量の期待値} \quad \langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p P(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* p \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(-j\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx$$

(参考) 期待値の計算から、 $\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \frac{dV(x)}{dx} = F$ が求められる (Ehrenfest's theorem)。

量子力学の期待値が古典力学の運動方程式を満たしている。

固有値方程式

ここまでは、簡単化のため空間的に均一な波動を仮定してきたが、実際には場所によって形が変わる可能性があるため、空間的な関数形を使用してシュレディンガー方程式を作成する。

$$\begin{array}{l} \text{プサイ} \quad \quad \text{ファイ} \\ \psi(x, t) = \varphi(x) e^{-j\omega t} \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{角周波数はエネルギーが保存されている限り変化しないので一定} \\ \text{(定常状態) とする} \end{array}$$

Schrödinger equation より

$$j\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \psi(x, t)$$

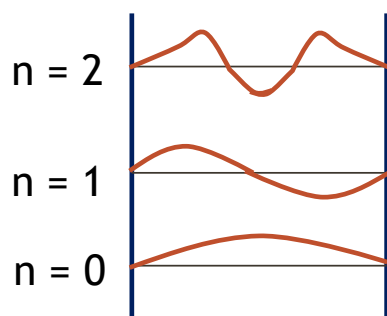
$$j\hbar \left(-j \frac{E}{\hbar} \right) \varphi(x) e^{-j\omega t} = E \varphi(x) e^{-j\omega t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + V(x) \varphi(x) \right\} e^{-j\omega t}$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \varphi(x) = E \varphi(x) \quad \longrightarrow \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{演算子} \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{固有値} \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{固有関数 (複素関数)} \end{array} \quad \text{固有値方程式}$$

固有関数

固有関数 $\varphi(x)$ は、境界条件により特定の波形とエネルギーに制限される。

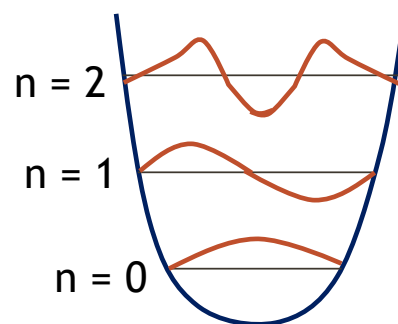
井戸型ポテンシャル



$$V(x) = \text{const.}$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n+1)^2$$

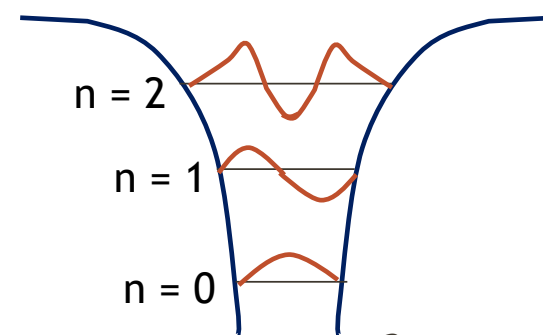
調和振動子



$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2$$

$$E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

クーロンポテンシャル



$$V(x) = -\frac{e^2}{|x|}$$

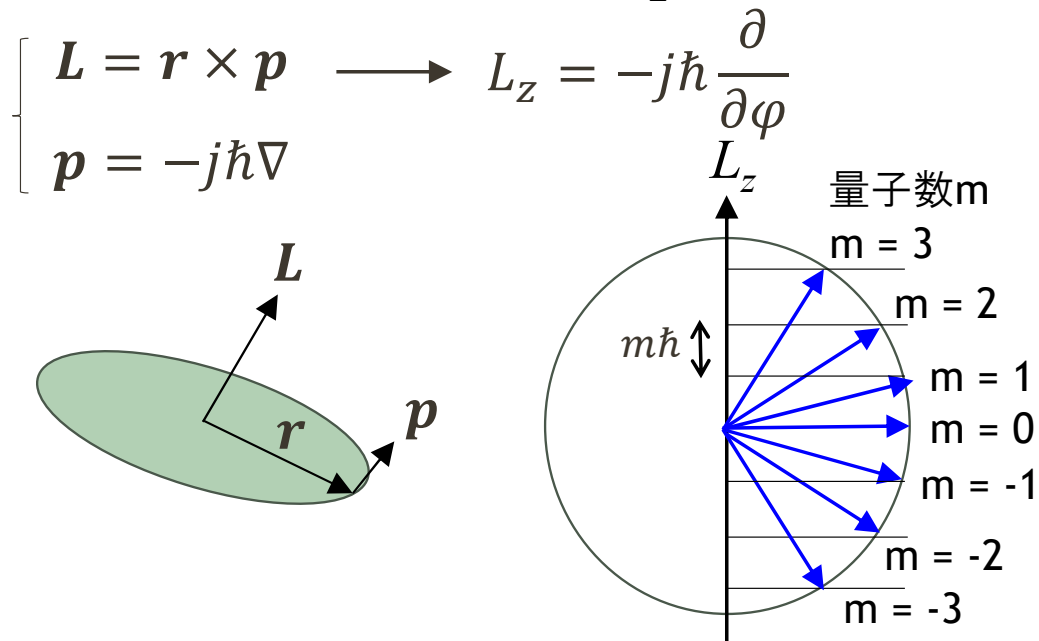
$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(n+1)^2}$$

エネルギー値が量子化される。固有関数と固有値は量子数 n で区別できる。ただし、自由粒子は境界条件がないのでエネルギー値が量子化されない。

(参考) 量子数の制限

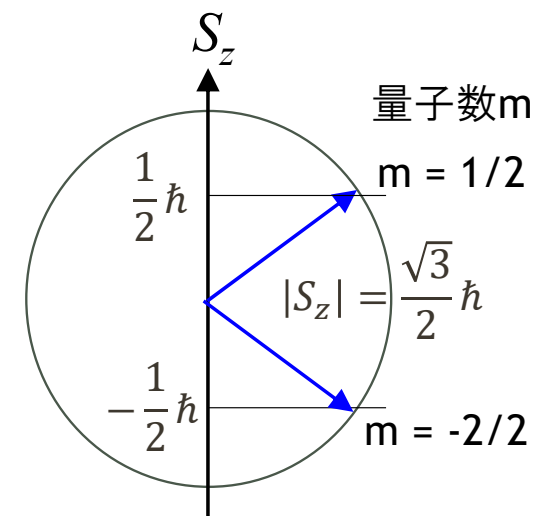
前スライドの例では、量子数 ($n \in \mathbb{Z}$) は無限個あるが、量子数に上限がある物理量もある (例) 角運動量のz成分は、角運動量の絶対値より大きくなるならない。

(例1) 角運動量のz成分 L_z

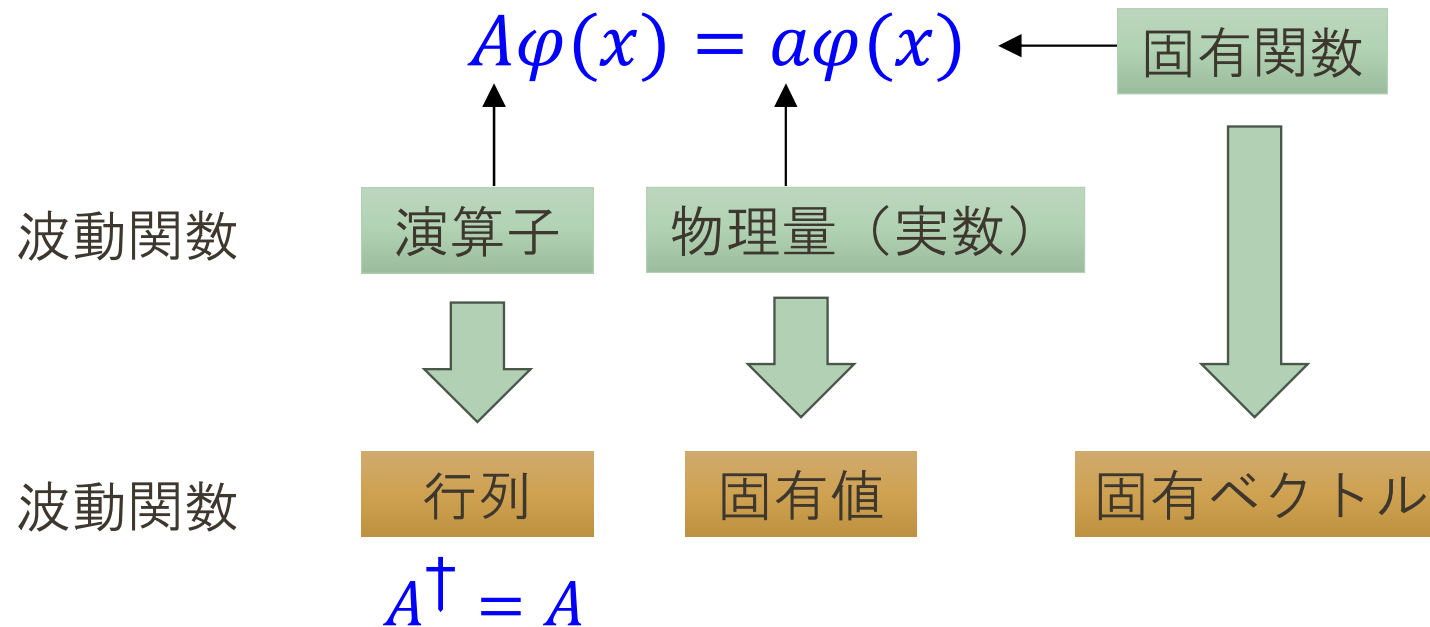


(例2) 電子スピン*のz成分 S_z

(*) 電子の磁気モーメントに対する量子数



波動関数とベクトル



(注) 固有値 a が実数なので、行列 A はエルミート行列で表すことができる。

波動関数の内積

波動関数の振幅の2乗は確率密度なので、

$$\text{全空間の確率} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t)^* \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x)^* \varphi(x) dx = 1$$

さらに、固有関数 $\varphi_n(x)$ (n は量子数) に対して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x)^* \varphi_n(x) dx = \delta_{mn} \leftarrow \text{エルミート演算子の固有ベクトルは直交する (線形代数)}$$

$\{\varphi_n\}$ は規格化完全直交系のベクトルと考えられる。

$\{\varphi_n\}$ を基底として、線形結合により任意のベクトル (または関数) を表すことができる。

固有状態の測定 (1)

$\left\{ \begin{array}{l} \text{波動関数} \quad \psi(x, t) \\ \text{固有関数} \quad \varphi_n(x) \end{array} \right. \quad \rightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{状態ベクトル} \quad |\psi\rangle \\ \text{固有ベクトル} \quad |n\rangle \\ \text{(}n\text{は量子数)} \end{array} \right. \quad \text{のように表記する。}$

↓ 固有ベクトルを使って状態ベクトルを表す。

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle \quad (c_n(t) \text{は固有値}n\text{に対する確率振幅と呼ぶ})$$

↓ Schrödinger 方程式に代入。

$$j\hbar \frac{d}{dt} \sum_n c_n(t) |n\rangle = H \sum_n c_n(t) |n\rangle$$

固有状態の測定 (2)

$$j\hbar \sum_n \frac{dc_n(t)}{dt} |n\rangle = \sum_n c_n(t) E_n |n\rangle \longleftarrow j\hbar \frac{d}{dt} \sum_n c_n(t) |n\rangle = H \sum_n c_n(t) |n\rangle$$

$|0\rangle, |1\rangle, \dots |n\rangle \dots$ は直交しているので、

$$j\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t)$$

系が定常状態のため、 $c_n(t) = c_n(0)e^{-j\omega_n t}$ のように表せるとき、

$$j\hbar(-j\omega_n)c_n(0)e^{-j\omega_n t} = E_n c_n(0)e^{-j\omega_n t} \text{より、}$$

$$\begin{cases} \omega_n = \frac{E_n}{\hbar} \\ c_n(t) = c_n(0)e^{-j\frac{E_n}{\hbar}t} \end{cases}$$

量子数 n の値が測定される確率 P_n



$$P_n = |c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2$$

(確率 P_n は時間によらない定数)

(参考) $|c_n|^2$ を測定確率と解釈する理由

$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ を関数表記に戻してみると、

$$\psi = \sum_n c_n \varphi_n, \quad \psi^* = \sum_m c_m^* \varphi_m^*$$

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* A \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_m \sum_n A_n c_m^* c_n \varphi_m^* \varphi_n \delta_{mn} dx = \sum_n A_n |c_n|^2$$

上記の式は、 A_n が測定される確率を $|c_n|^2$ として期待値 $\langle A \rangle$ を求める式と解釈することができる。

固有値の測定確率（Hが時間変化しない場合）

波動関数を固有関数 $\{|n\rangle\}$ を用いて表すとき、

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle + \dots$$

(重要)

固有値 n のエネルギー E_n が、 $|c_n|^2$ の確率で測定される。しかし、1回の測定では、期待値ではなく、 E_n のどれかの値しか測定されない（同時に2つの値や中間の値が測定されることはない）。

測定前 $(c_0, c_1, c_2, \dots) = \sum_n c_n |n\rangle$ $\xrightarrow{\text{測定結果が}n=1}$ 測定後 $(0, 1, 0, \dots) = |1\rangle$

各 n に対する確率は時間変化しないため、測定を行うと、 $|\psi\rangle$ は固有状態のどれかになり、測定前の状態には戻れない（測定は1回しかできない）。

固有値の測定確率（Hが時間変化する場合）

初期状態（固有状態だったとする）

$$H = H_0$$



$$\psi = \varphi_i e^{-j\frac{E_i}{\hbar}t}$$

（注） H を変更するということは、エネルギーを外部から与えて、エネルギー保存を破ることに相当。

H の変更により c_n を操作することができる。

$t = 0$

最終状態（ハミルトニアンを変更した結果）

$$H = H_0 + \lambda H_p$$



とりあえず、固有関数で表す

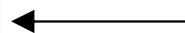
$$\psi = \sum_n c_n(t) \varphi_n$$



Schrödinger equation に代入
（計算はやや面倒）

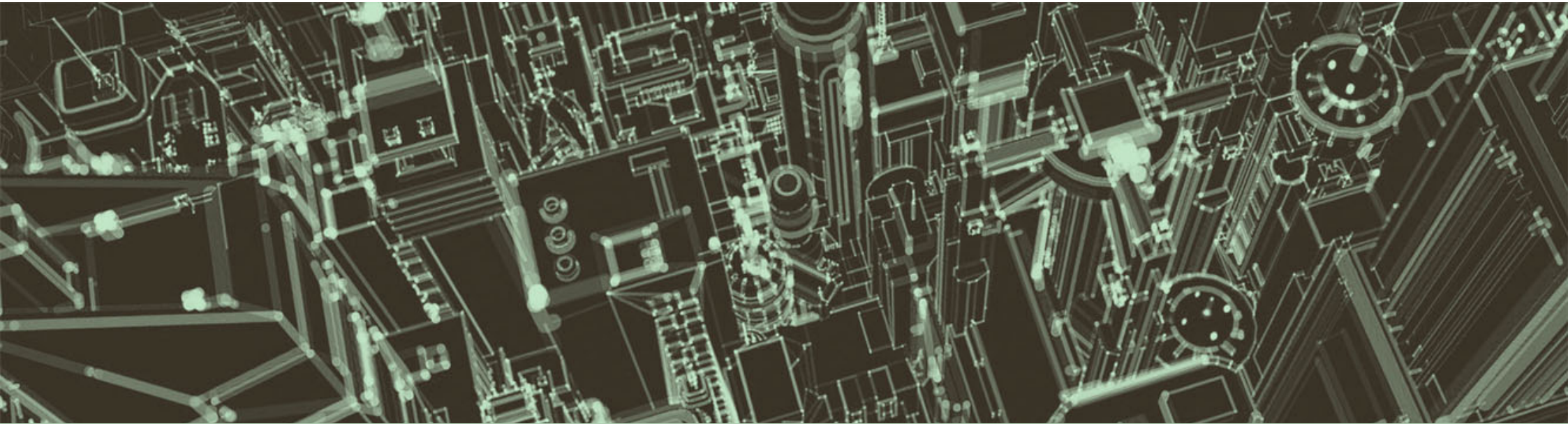
$$c_{n \neq i}(t \geq 0) \approx c_{n \neq i}(t < 0) + \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n H_p \varphi_i dx \frac{e^{-j\frac{E_i - E_n}{\hbar}t}}{E_i - E_n}$$

$t < 0$ のとき $c_n = 0$ だったとしても、 H を変更すると $c_n \neq 0$ となる。



この節のまとめ

- ❧ 系の物理的状態は、波動関数で表すことができる。
 - ❧ 波動関数は、空間的な確率密度を表し、空間積分すると1になる。
- ❧ 定常状態では、波動関数が固有値方程式を満足し、これを解くと固有関数が得られる。
 - ❧ ポテンシャルの形に応じて、物理量の量子化が起こり、物理量の値の違いは、量子数で見分けることができる。
 - ❧ 量子数の個数は、物理量によって無限個の場合と有限個の場合がある。
 - ❧ 固有関数は、規格化直交完全系であり、基底として使用することができる。
- ❧ 固有関数を基底ベクトルとして、波動関数を固有関数空間のベクトル、演算子を行列で表すことができる。
 - ❧ 波動関数は、固有関数の線形結合で表され、各固有関数の係数（確率振幅）の2乗が、対応する量子数の測定確率になる。
 - ❧ 物理量に対応する演算子は、行列で表すことができる。
- ❧ 測定により、固有関数に対応する物理量の値（または量子数）が得られる。
 - ❧ 量子数 n の測定確率は、固有ベクトル $|n\rangle$ の係数の2乗 $|c_n|^2$ となる。
 - ❧ ハミルトニアンを変化させることにより、測定確率を操作することができる。



6-4 量子コンピュータの基本命令

量子ビットと量子演算の考え方



ブラケット記法

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} c_i |i\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix} \quad \text{ブラベクトル}$$

$$\langle\phi| = \sum_{j=0}^{N-1} b_j^* \langle j| = (b_0^* \quad b_j^* \quad \cdots \quad b_{N-1}^*) \quad \text{ケットベクトル}$$

ブラケット記法による内積の計算

$$\langle\phi|\psi\rangle = (b_0^* \quad b_j^* \quad \cdots \quad b_{N-1}^*) \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix} = \sum_{i=0}^{N-1} b_i^* c_i$$

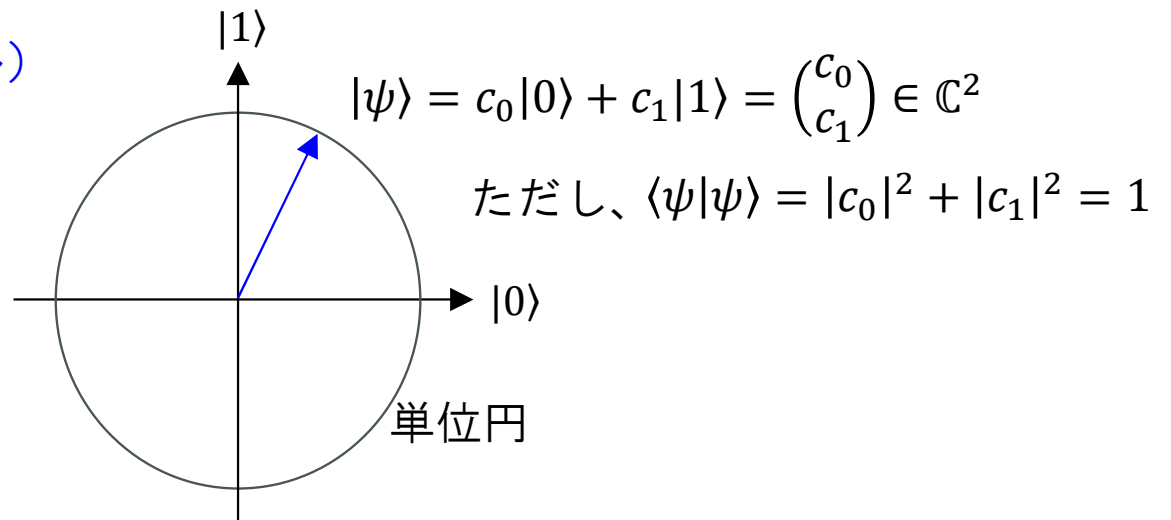
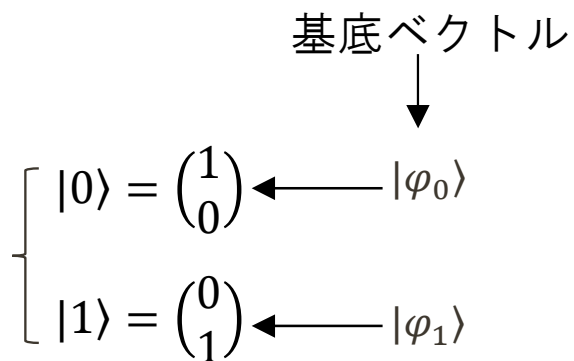
ブラケット記法によるノルム $\|\psi\rangle\|$ の計算

$$\|\psi\rangle\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = (c_0^* \quad c_j^* \quad \cdots \quad c_{N-1}^*) \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix} = \sum_{i=0}^{N-1} c_i^* c_i = \sum_{i=0}^{N-1} |c_i|^2$$

量子ビット(qubit)

便宜的に、2つの固有ベクトル（固有関数） $|0\rangle, |1\rangle$ を基底として考える（電子スピン、光子の偏光など）。

計算基底（量子ビットの基底ベクトル）



量子ビットのイメージ

1回の測定により、量子数0, 1のどちらかの固有値が得られる。同じ状態の別の量子ビットを、多数測定することにより、確率 $|c_0|^2$, $|c_1|^2$ が得られる（測定した量子ビットを再測定してはダメ）。

ブロッホ球(Bloch sphere)

c_0, c_1 が実数であれば、 $|\psi\rangle$ は単位円上のベクトルで表されるが（前スライド参照）、実際には、複素ベクトルなので、4変数で表す必要がある。ただし、全確率 $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$ の制約があるため、3次元空間の球面上に向かうベクトルとして表すことができる。

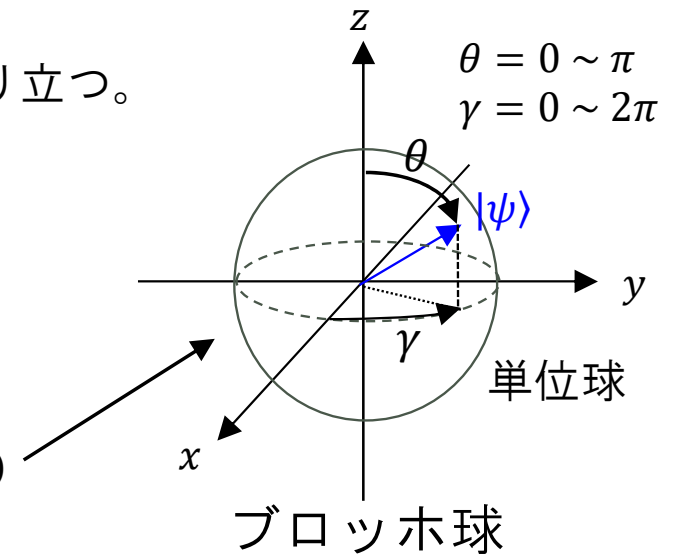
$$c_0 = \cos \frac{\theta}{2}, \quad c_1 = e^{j\gamma} \sin \frac{\theta}{2} \quad \text{のような変数変換を行い、} (\theta, \gamma) \text{ を変数とする。}$$

このとき、どのような (θ, γ) に対しても $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$ が成り立つ。

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle = \cos \frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{j\gamma} \sin \frac{\theta}{2}|1\rangle$$

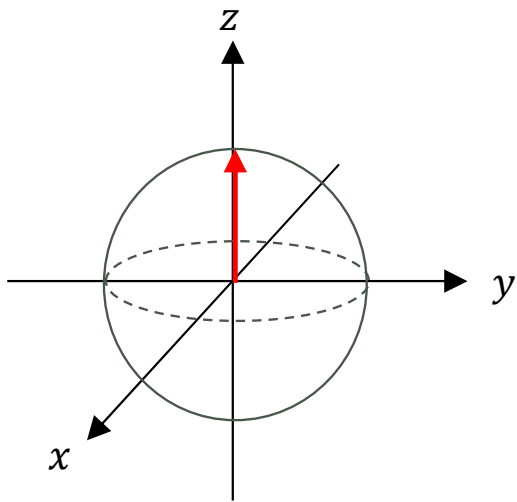
(γ, θ) を3次元空間の角度と考えると、単位球面上のベクトルを表すことができる。

$$(x, y, z) = (\cos \gamma \sin \theta, \sin \gamma \sin \theta, \cos \theta)$$

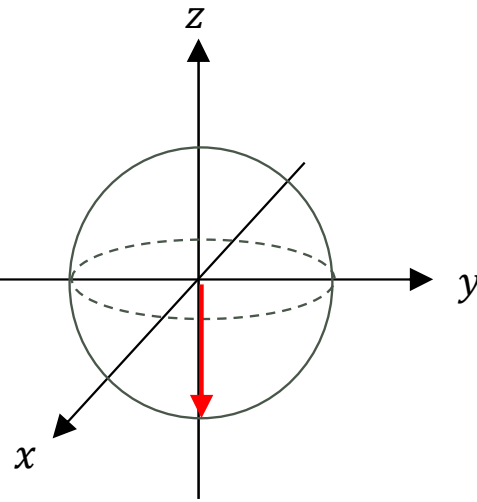


練習問題 2

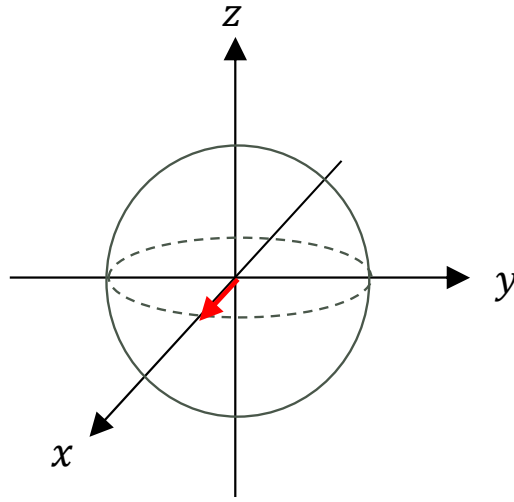
1. 下記のブロッホ球のベクトルを基底 $|0\rangle, |1\rangle$ で表わせ。



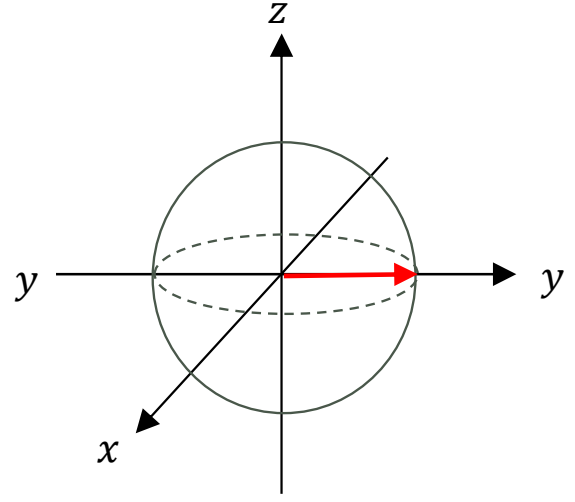
$$(\theta, \gamma) = (0, \text{任意})$$



$$(\theta, \gamma) = (\pi, 0)$$

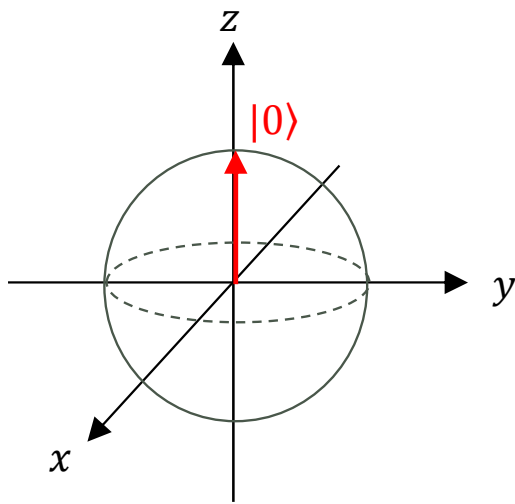


$$(\theta, \gamma) = \left(\frac{\pi}{2}, 0\right)$$



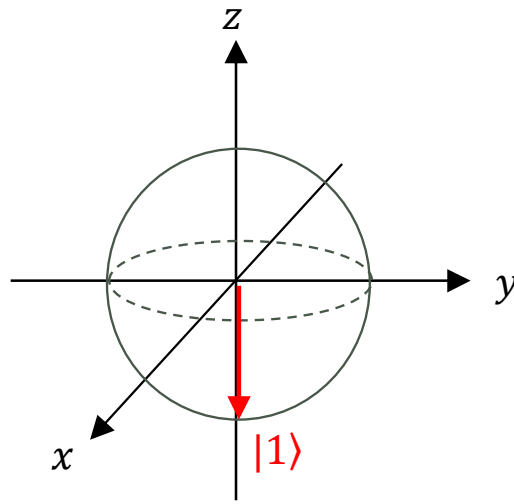
$$(\theta, \gamma) = \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$$

練習問題 2 の解答例



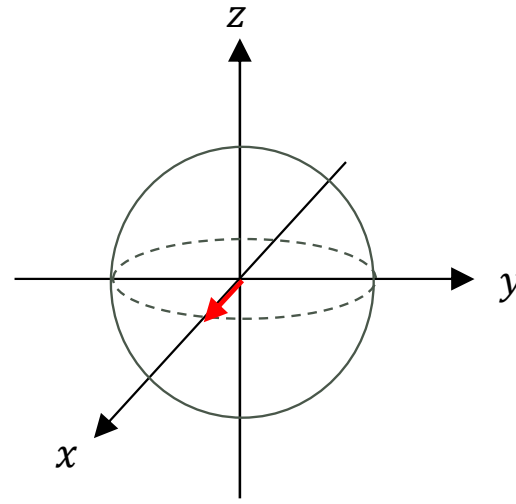
$$(\theta, \gamma) = (0, \text{任意})$$

$$|\psi\rangle = \cos 0 |0\rangle + e^{j\gamma} \sin 0 |1\rangle = |0\rangle$$



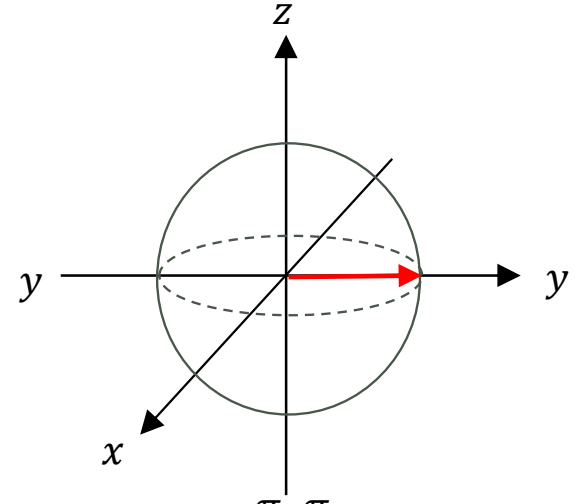
$$(\theta, \gamma) = (\pi, 0)$$

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\pi}{2} |0\rangle + e^{j\gamma} \sin 0 |1\rangle = |1\rangle$$



$$(\theta, \gamma) = \left(\frac{\pi}{2}, 0\right)$$

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \cos \frac{\pi}{4} |0\rangle + e^{j0} \sin \frac{\pi}{4} |1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \end{aligned}$$



$$(\theta, \gamma) = \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$$

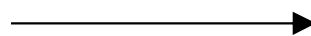
$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \cos \frac{\pi}{4} |0\rangle + e^{j\frac{\pi}{2}} \sin \frac{\pi}{4} |1\rangle \\ &= \cos \frac{\pi}{4} |0\rangle + j \sin \frac{\pi}{4} |1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + j|1\rangle) \end{aligned}$$

計算基底による量子ビットの測定

$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}$ の状態にある量子ビットを測定すると、量子数 n の固有値 E_n が $|c_n|^2$ の確率で得られる。

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle$$

測定



測定値（量子数）	確率
$n = 0$	$\frac{1}{4}$
$n = 1$	$\frac{3}{4}$

（参考）通常は、量子数が異なると物理量の測定値が異なるため、測定値と量子数は等価と考えられる。ただし、系によっては、量子数が異なっても測定値が同じ（縮退）の場合がある。ここでは、縮退のある系を使用しないことを前提とする。

量子コンピュータの演算命令

量子コンピュータの計算は、量子レジスタの $|\psi\rangle$ ベクトルの時間変化によって行われる。→ 状態 $|\psi\rangle$ の時間発展と呼ばれる。

状態ベクトル $|\psi\rangle$ の時間応答は、初期状態に時間発展演算子を作用させて得られる。

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-j\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle = \sum_n c_n e^{-j\frac{H t}{\hbar}} |n\rangle = e^{-j\frac{H t}{\hbar}} \sum_n c_n |n\rangle = e^{-j\frac{H t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle$$

時間発展
演算子

初期状態

時間発展演算子の求めかた

$$U(t) = e^{-j\frac{H t}{\hbar}} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \left(-j\frac{H}{\hbar} t\right)^i = I + \frac{1}{1!} \left(-j\frac{H}{\hbar} t\right)^1 + \dots + \frac{1}{n!} \left(-j\frac{H}{\hbar} t\right)^n + \dots$$

(参考) ハミルトニアンが、エルミート行列なら、これをn乗した時間発展行列はユニタリ行列。

(注) Hを時間変化させる場合

前節で見たように、量子コンピュータの計算は、ハミルトニアンを変化させることによって行われる。前ページのスライドでは、Hが変化しないとして、固有値方程式を使用して時間発展演算を求めたので、厳密には量子コンピュータの計算を前ページのスライドで求めた $U(t)$ で表せない。しかし、Hの変化に対して時間が十分短く、 $t = \Delta t$ とすると近似的に次式が成り立つ。

$$|\psi(\Delta t)\rangle \approx e^{-j\frac{H}{\hbar}\Delta t} |\psi(0)\rangle = U(\Delta t)|\psi(0)\rangle$$

(厳密な時間発展演算子は、 $H = H(t)$ としたシュレディンガー方程式から得られるが、計算はやや面倒。)

ユニタリ行列

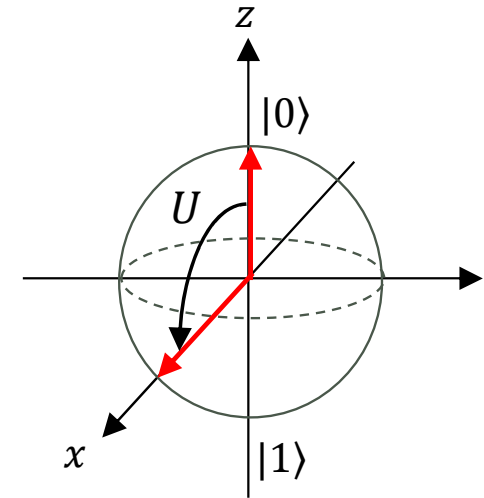
量子コンピュータの演算命令は、量子レジスタのベクトルをブロッホ球面上で移動させる。

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$$

演算を行ってもノルムが1（確率の合計が1）となるので、ノルムを保存するユニタリ行列(Unitary matrix)で量子コンピュータの演算を表すことができる（必要十分条件）。

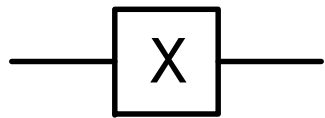
$$UU^\dagger = U^\dagger U = I$$



量子ゲート 1

量子ビットの状態ベクトルにユニタリ行列を作用させる命令は量子ゲート(Quantum gate)と呼ばれる。

NOTゲート (Xゲート)



シンボル

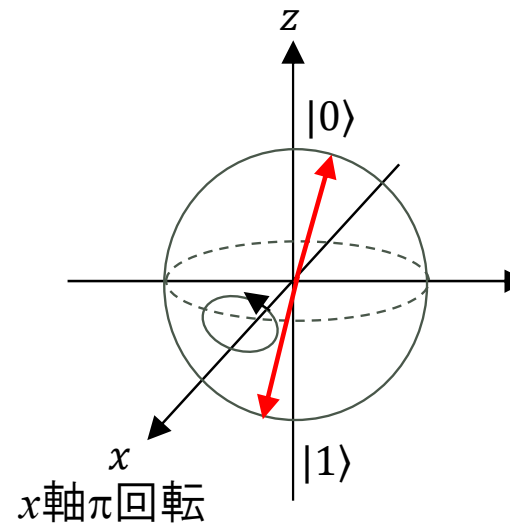
$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

対応する行列

計算例

$$X|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1\rangle$$

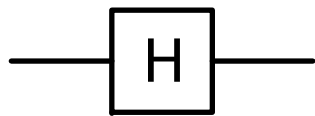
$$X|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle$$



状態ベクトルの操作

量子ゲート2

アダマール(Hadamard)ゲート



シンボル

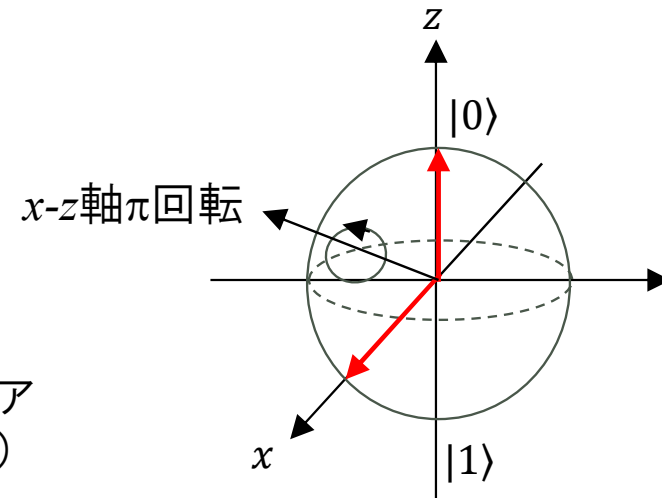
$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

対応する行列 (ハミルトニアンと間違えないように注意)

計算例

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

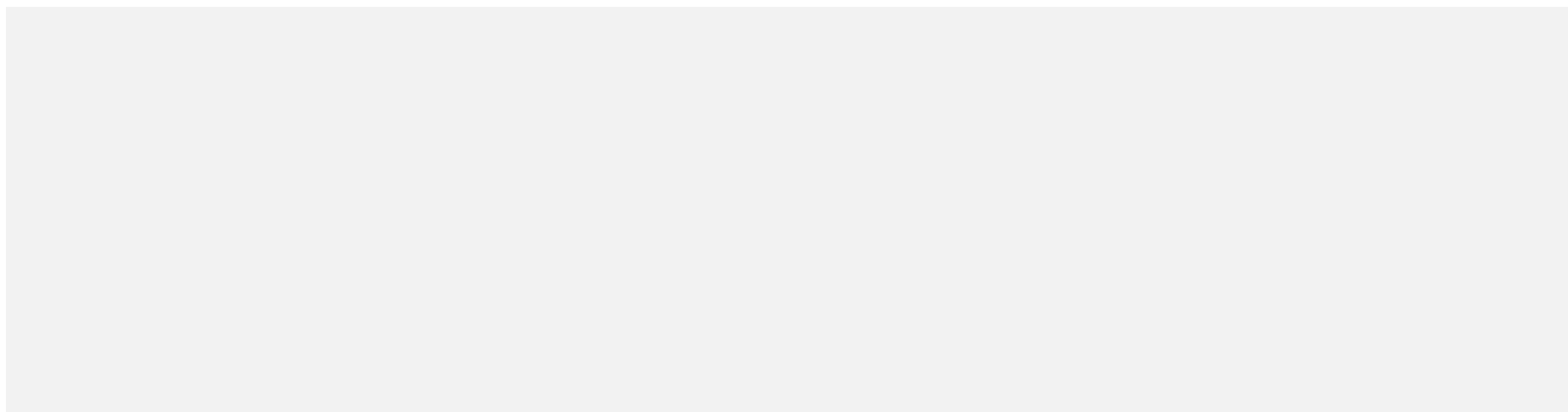
$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$$



状態ベクトルの操作

クイズ

1. アダマルゲートを2回実行すると状態ベクトルはどのように移動するか。



量子ゲート3

位相ゲート



シンボル

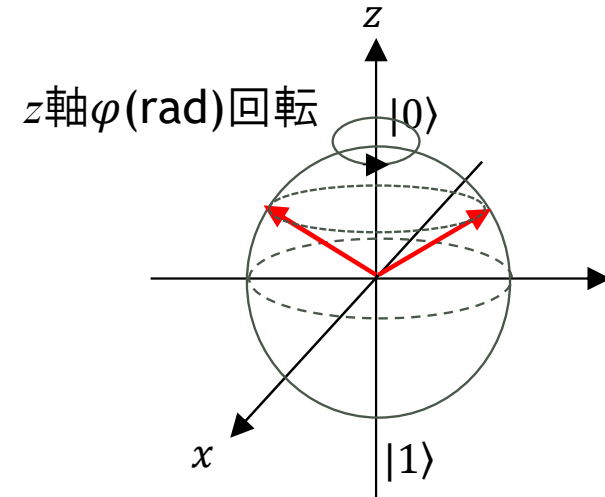
$$P_\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{j\varphi} \end{pmatrix}$$

対応する行列

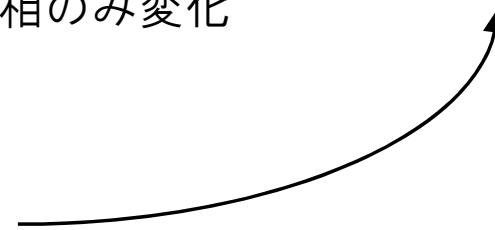
$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$$

$$P_\varphi|\psi\rangle = c_0|0\rangle + e^{j\varphi}c_1|1\rangle \leftarrow |1\rangle\text{成分の位相のみ変化}$$

$$\begin{cases} c'_0 \leftarrow c_0 = \cos \frac{\theta}{2} \\ c'_1 \leftarrow e^{j\varphi}c_1 = e^{j(\gamma+\varphi)} \sin \frac{\theta}{2} \end{cases}$$



状態ベクトルの操作



汎用ゲート

$$HP_\varphi H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{j\varphi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + e^{j\varphi} & 1 - e^{j\varphi} \\ 1 - e^{j\varphi} & 1 + e^{j\varphi} \end{pmatrix} = e^{j\frac{\varphi}{2}} \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & -j \sin \frac{\varphi}{2} \\ -j \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}$$

全体の位相変化 $e^{j\frac{\varphi}{2}}$ を無視すると

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{HP_\varphi H} \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} \\ -\sin \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \longrightarrow$$

φ を変更することにより、どのような $\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$ でも作ることができる。

Note: 位相 $e^{j\frac{\varphi}{2}}$ を全体にかける操作を行っても、 c_0, c_1 の位相差は変わらないため、行列から括りだされた位相操作を無視してよい。しかし、 c_0, c_1 の片方だけ位相の位相変化は無視できない。

(準備) 計算基底以外での測定

量子ビットの固有関数の基底（計算基底）で表された状態ベクトル $|\psi\rangle$ を、別の基底（別の物理量）で測定することもできる。

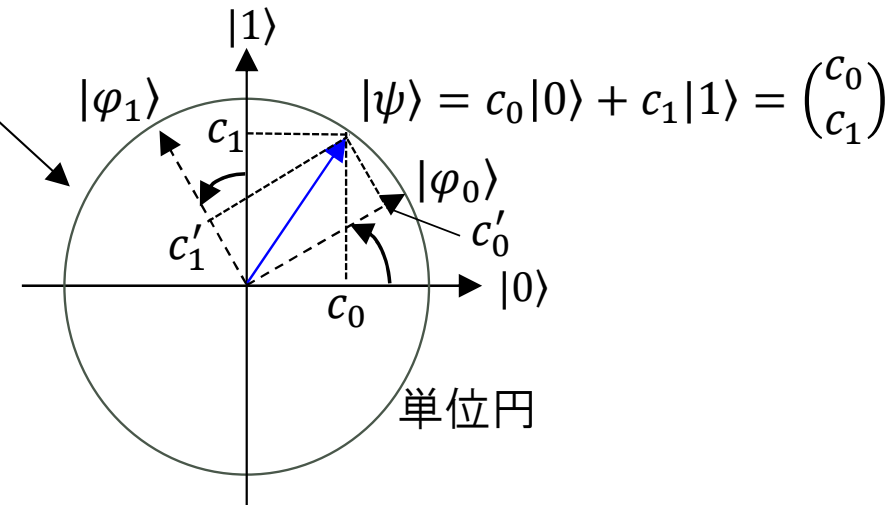
$$\langle n|\psi\rangle = (0\ 0 \cdots n, 0, \cdots) \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} = c_n \quad \text{内積は基底ベクトルへの投影を表している。}$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{計算基底 } |\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \\ \text{測定基底 } |\psi\rangle = c'_0|\varphi_0\rangle + c'_1|\varphi_1\rangle \end{array} \right.$$

測定した結果 $|\varphi_0\rangle$ だったとき、

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\| |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|\psi\rangle \|} |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|\psi\rangle = \frac{1}{|c'_0|} \begin{pmatrix} c'_0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

測定基底の基底ベクトルが測定された。
(計算基底では基底と一致しなくなる)



基底ベクトルの変更（イメージ）

(参考) 前ページスライドの計算

内積は基底ベクトルへの投影を表しているので、測定基底を用いて状態ベクトル $|\psi\rangle$ を表すと、
 $|\psi\rangle = c'_0|\varphi_0\rangle + c'_1|\varphi_1\rangle = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|\psi\rangle + |\varphi_1\rangle\langle\varphi_1|\psi\rangle$



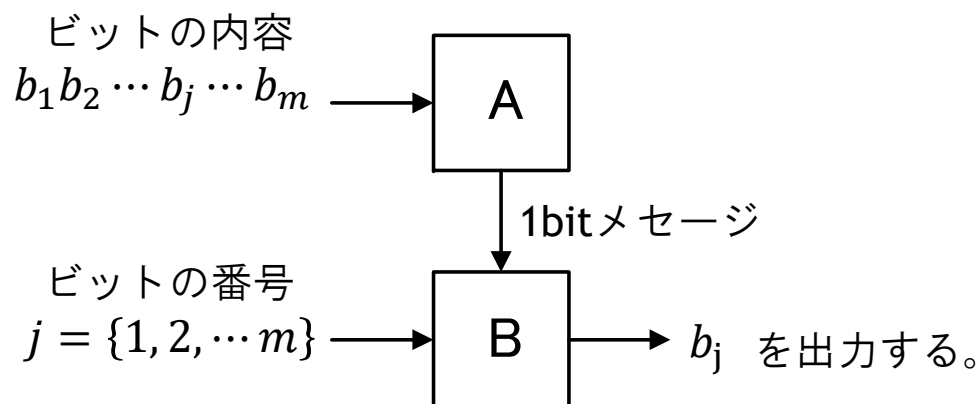
$$\left. \begin{aligned} |\varphi_0\rangle \text{ を測定すると、} & |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c'_0 \\ c'_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c'_0 \\ c'_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c'_0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |\varphi_1\rangle \text{ を測定すると、} & |\varphi_1\rangle\langle\varphi_1|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c'_0 \\ c'_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c'_0 \\ c'_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ c'_1 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\} \text{測定基底の状態となる。}$$

このままでは、規格化されていないので測定確率が1にならない。

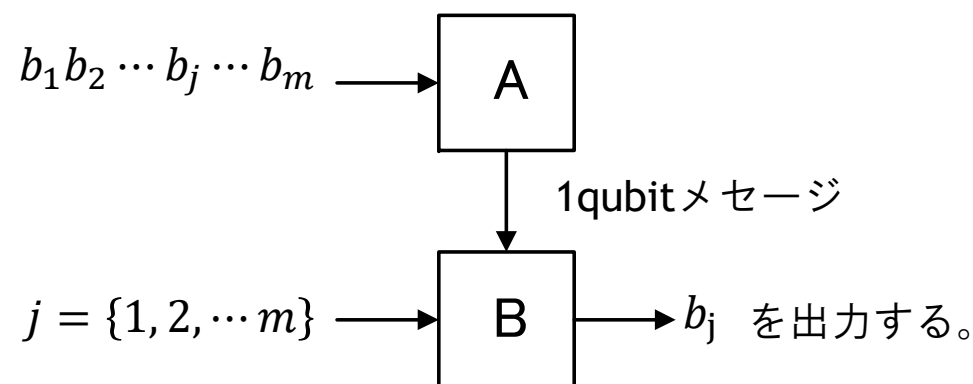
$$\frac{1}{\| |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|\psi\rangle \|} |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|\psi\rangle = \frac{1}{|c'_0|} \begin{pmatrix} c'_0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{\| |\varphi_1\rangle\langle\varphi_1|\psi\rangle \|} |\varphi_1\rangle\langle\varphi_1|\psi\rangle = \frac{1}{|c'_1|} \begin{pmatrix} 0 \\ c'_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

量子ランダムアクセス符号



古典ランダムアクセス符号



量子ランダムアクセス符号

1bitの情報をBに与え、Aが持っている情報をBに予想させる問題。しかし、古典ランダムアクセス符号では、ランダムに1/0を出力するしかできない。このとき、正解率は50%となる。

一方、量子ランダムアクセス符号では、1 qubitの情報をBに与え85%の正解率となる。

量子ランダムアクセス符号の動作

Aの動作： $b_1 b_2$ 入力 $\rightarrow |\psi(b_1 b_2)\rangle$ をメッセージとしてBに送信。

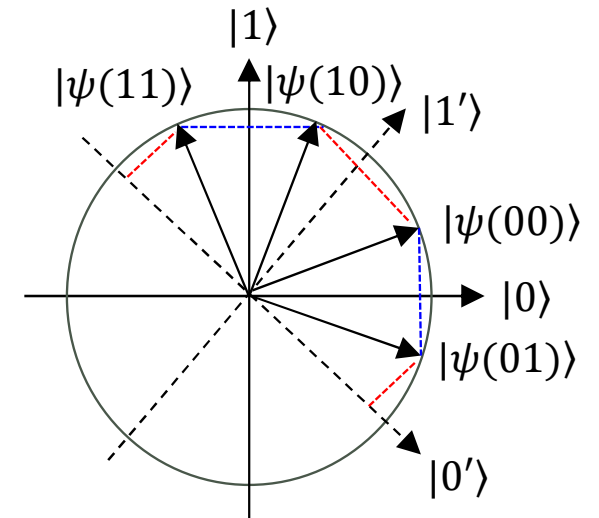
$$|\psi(00)\rangle = \cos \frac{\pi}{8} |0\rangle + \sin \frac{\pi}{8} |1\rangle$$

$$|\psi(10)\rangle = \cos \frac{3\pi}{8} |0\rangle + \sin \frac{3\pi}{8} |1\rangle$$

$$|\psi(01)\rangle = \cos \frac{-\pi}{8} |0\rangle + \sin \frac{-\pi}{8} |1\rangle$$

$$|\psi(11)\rangle = \cos \frac{5\pi}{8} |0\rangle + \sin \frac{5\pi}{8} |1\rangle$$

メッセージの配置



Bの動作： $j = 1$ 入力 $\rightarrow |\psi(b_1, b_2)\rangle$ を $|0\rangle, |1\rangle$ の基底で測定。

測定結果が $|0\rangle \rightarrow 0$ を出力。

測定結果が $|1\rangle \rightarrow 1$ を出力。

$j = 2$ 入力 $\rightarrow |\psi(b_1, b_2)\rangle$ を $|0'\rangle, |1'\rangle$ の基底で測定。

測定結果が $|0'\rangle \rightarrow 0$ を出力。

測定結果が $|1'\rangle \rightarrow 1$ を出力。

量子ランダムアクセス符号の動作確認

1. 入力 $b_1b_2 = 01$ の場合について動作確認してみよう。

Aの動作：

$$|\psi(01)\rangle = \cos\frac{-\pi}{8}|0\rangle + \sin\frac{-\pi}{8}|1\rangle \text{ のメッセージを送信}$$

Bの動作：

$j = 1 \rightarrow |0\rangle, |1\rangle$ を測定

$$|\langle 0|\psi(01)\rangle|^2 = \cos^2\left(-\frac{\pi}{8}\right)\langle 0|0\rangle = \cos^2\left(-\frac{\pi}{8}\right) \approx 0.9999$$

$$|\langle 1|\psi(01)\rangle|^2 = \sin^2\left(-\frac{\pi}{8}\right)\langle 1|1\rangle = \sin^2\left(-\frac{\pi}{8}\right) \approx 4.698 \cdot 10^{-5}$$

$j = 2 \rightarrow |0'\rangle, |1'\rangle$ を測定

$$|\langle 0'|\psi(01)\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\pi}{8}\right)\langle 0|0\rangle = \cos^2\left(\frac{\pi}{8}\right) \approx 0.9999$$

$$|\langle 1'|\psi(01)\rangle|^2 = \sin^2\left(\frac{3\pi}{8}\right)\langle 1|1\rangle = \sin^2\left(\frac{3\pi}{8}\right) \approx 4.227 \cdot 10^{-4}$$

(参考) 類似の手法を使って、盗聴されないで秘密鍵を共有することが可能。

複数量子ビットの表し方

2qubitの状態は、 \mathbb{C}^4 空間のベクトルで表されるが、量子ビット単位の操作を想定し、 $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ のテンソル積によって表す（他の表し方も考えられるが）。

$$\text{テンソル積} \quad \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \\ a_1 \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 b_0 \\ a_0 b_1 \\ a_1 b_0 \\ a_1 b_1 \end{pmatrix}$$

2qubit基底ベクトルの各種表記

$$\begin{aligned} |00\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & |01\rangle &= |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |10\rangle &= |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} & |11\rangle &= |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

2 qubit 量子レジスタの状態ベクトル

$$\text{第1量子ビット } |\psi_1\rangle = c_{1,0}|0\rangle + c_{1,1}|1\rangle = \begin{pmatrix} c_{1,0} \\ c_{1,1} \end{pmatrix}$$

$$\text{第2量子ビット } |\psi_2\rangle = c_{2,0}|0\rangle + c_{2,1}|1\rangle = \begin{pmatrix} c_{2,0} \\ c_{2,1} \end{pmatrix}$$



$\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ テンソルで表現

$$\text{量子レジスタ全体 } |\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} c_{1,0} \\ c_{1,1} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} c_{2,0} \\ c_{2,1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{1,0}c_{2,0} \\ c_{1,0}c_{2,1} \\ c_{1,1}c_{2,0} \\ c_{1,1}c_{2,1} \end{pmatrix} \begin{array}{l} \leftarrow |00\rangle \\ \leftarrow |01\rangle \\ \leftarrow |10\rangle \\ \leftarrow |11\rangle \end{array}$$

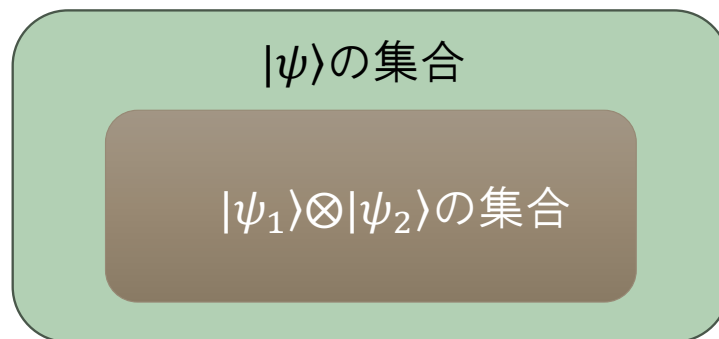
エンタングルメント(Entanglement)

$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ ですべての $|\psi\rangle$ が表せるわけではない。

$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$ Einstein-Podolsky-Eosen (EPR) Pair に対して、

$|\psi\rangle = (c_{1,0}|0\rangle + c_{1,1}|1\rangle) \otimes (c_{2,0}|0\rangle + c_{2,1}|1\rangle)$ となる $c_{1,0}, c_{1,1}, c_{2,0}, c_{2,1}$ の組は無い。

テンソルで表せない $|\psi\rangle$ はエンタングルド(entangled)状態と呼ばれる。エンタングルド状態は、これまでに扱った1qubitを2個用意しただけでは作れない(2qubitの量子相関が必要)。



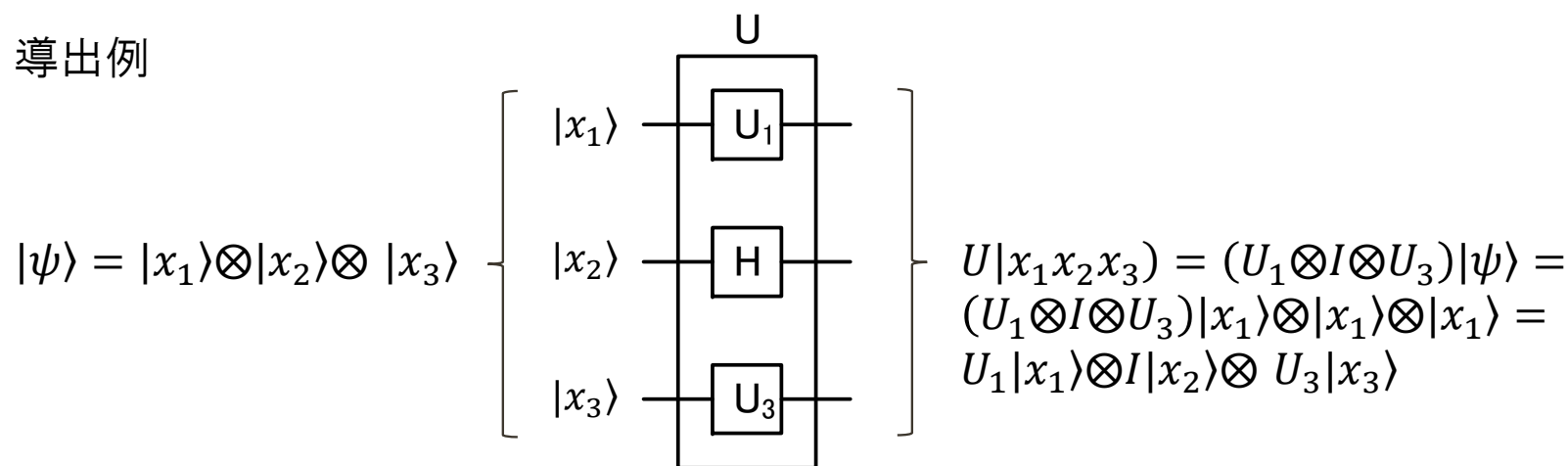
(参考) EPRパラドックス (エンタングルド状態の2光子が離れた場所で情報を共有する現象) は大変興味深いので調べてみよう。

複数量子ビットの演算

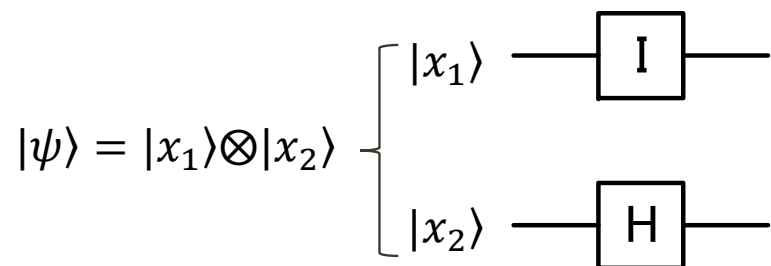
複数の量子ビットに対する演算は、1qubit演算子のテンソル積で表す。ただし、エンタングルメント状態は作れない。

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

導出例



2 量子ビットの計算例



$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|00\rangle - \frac{1}{2}|01\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$$

に対して、左の量子ゲートを作用させたときの結果を求める。

$$\begin{aligned}
 (I \otimes H)|\psi\rangle &= \frac{1}{2}I|0\rangle \otimes H|0\rangle - \frac{1}{2}I|0\rangle \otimes H|1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}I|1\rangle \otimes H|1\rangle \\
 &= \frac{1}{2}I|0\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) - \frac{1}{2}I|0\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) + \frac{1}{\sqrt{2}}I|1\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |0\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |1\rangle - \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |0\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |1\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle \otimes |0\rangle - \frac{1}{2}|1\rangle \otimes |1\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |1\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle \otimes |0\rangle - \frac{1}{2}|1\rangle \otimes |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|01\rangle + \frac{1}{2}|10\rangle - \frac{1}{2}|11\rangle
 \end{aligned}$$

練習問題 3



$|\psi\rangle = |000\rangle$ に対して、左の量子ゲートを作用させたときの結果を求めよ。

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

制御ビット（条件分岐）を含む演算の行列表現

$x_1 = 0$ のとき
A を実行

$x_1 = 1$ のとき
B を実行

$$CB = |0\rangle\langle 0| \otimes A + |1\rangle\langle 1| \otimes B$$

$$\begin{aligned}
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{11} & b_{12} \\ 0 & 0 & b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{11} & b_{12} \\ 0 & 0 & b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

x_1
↓

← |00⟩

← |01⟩

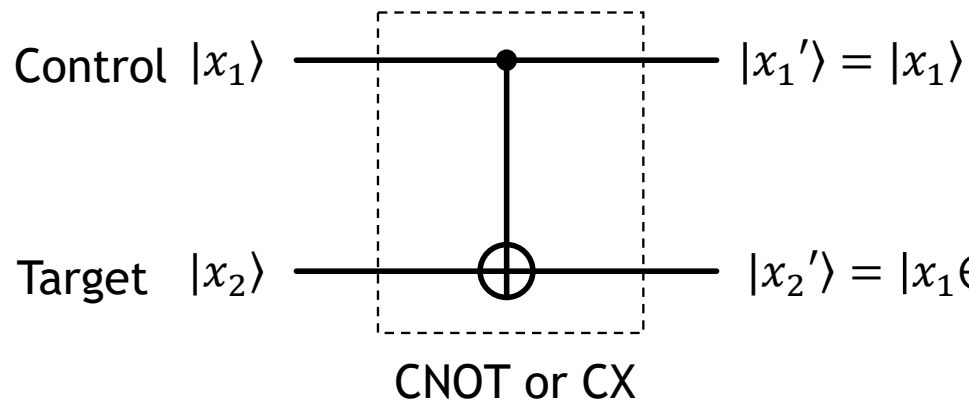
← |10⟩

← |11⟩

Aの要素
を使用

Bの要素
を使用

CNOT(Controlled NOT)ゲート



$|x_1\rangle$ が $|x_2\rangle$ に影響を与えているため、1qubit演算の組み合わせでは実現できないエンタングルメント状態を出力できる。

$$|x_2'\rangle = |x_1 \oplus x_2\rangle = \begin{cases} \text{if } x_1' = 0, x_2' = x_2 \\ \text{if } x_1' = 1, x_2' = x_2 \end{cases}$$

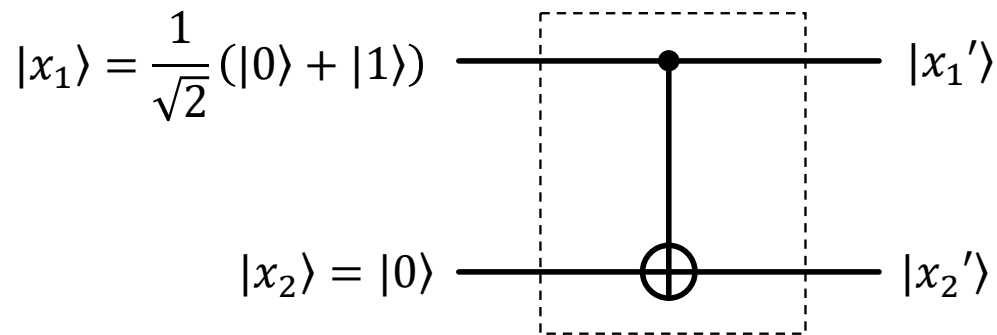
2qubitのCNOTと1qubitの汎用ゲートですべての演算を実行可能。

$$CX = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X \quad \leftarrow \begin{array}{l} |x_1\rangle = |0\rangle \text{なら } CX = I, \\ |x_1\rangle = |1\rangle \text{なら } CX = X \end{array}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes I + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

\uparrow $x_1 = 0$ のとき \uparrow $x_2 = 1$ のとき

CNOTゲートの実行例



考え方1 (誤)

$|x_1\rangle$ は $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の確率が $1/2$ なので、EXORの真理値表より、 $|x_2'\rangle$ では $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の両方が同じ確率で起こる。従って、

$$|x_2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

$$|\psi\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle)$$

$$CX|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

エンタングルド状態

考え方2 (正)

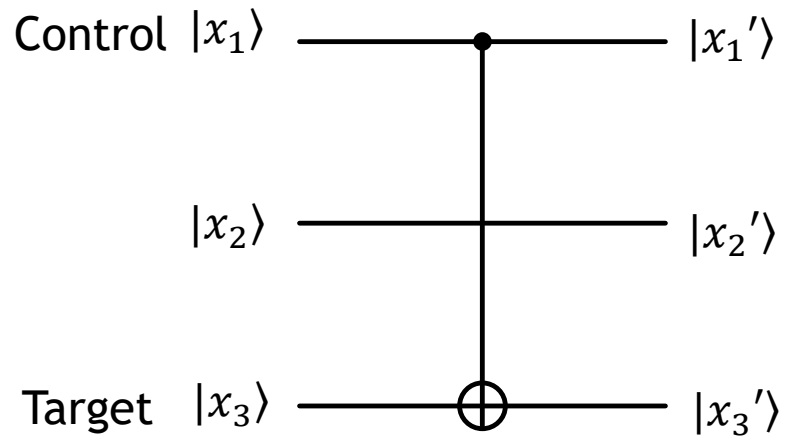
$|x_1'\rangle = |x_1\rangle$ の測定結果が0の場合、
 $|x_2'\rangle = |0\rangle$

$|x_1'\rangle = |x_1\rangle$ の測定結果が1の場合、
 $|x_2'\rangle = |1\rangle$

従って、以上の状態を重ね合わせ、

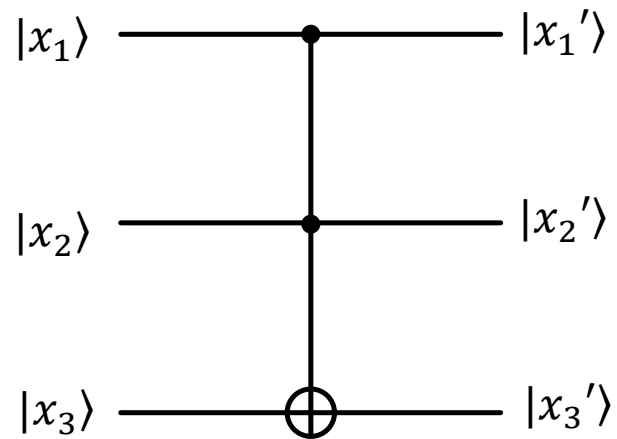
$$|x_1'\rangle \otimes |x_2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

練習問題 4



1. 入力 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|100\rangle + |010\rangle - |111\rangle)$ に対する左図の量子ゲートの出力を求めよ。
2. 左図の量子ゲートの3qubit演算を表す8x8行列を求めよ。

CCNOTゲート

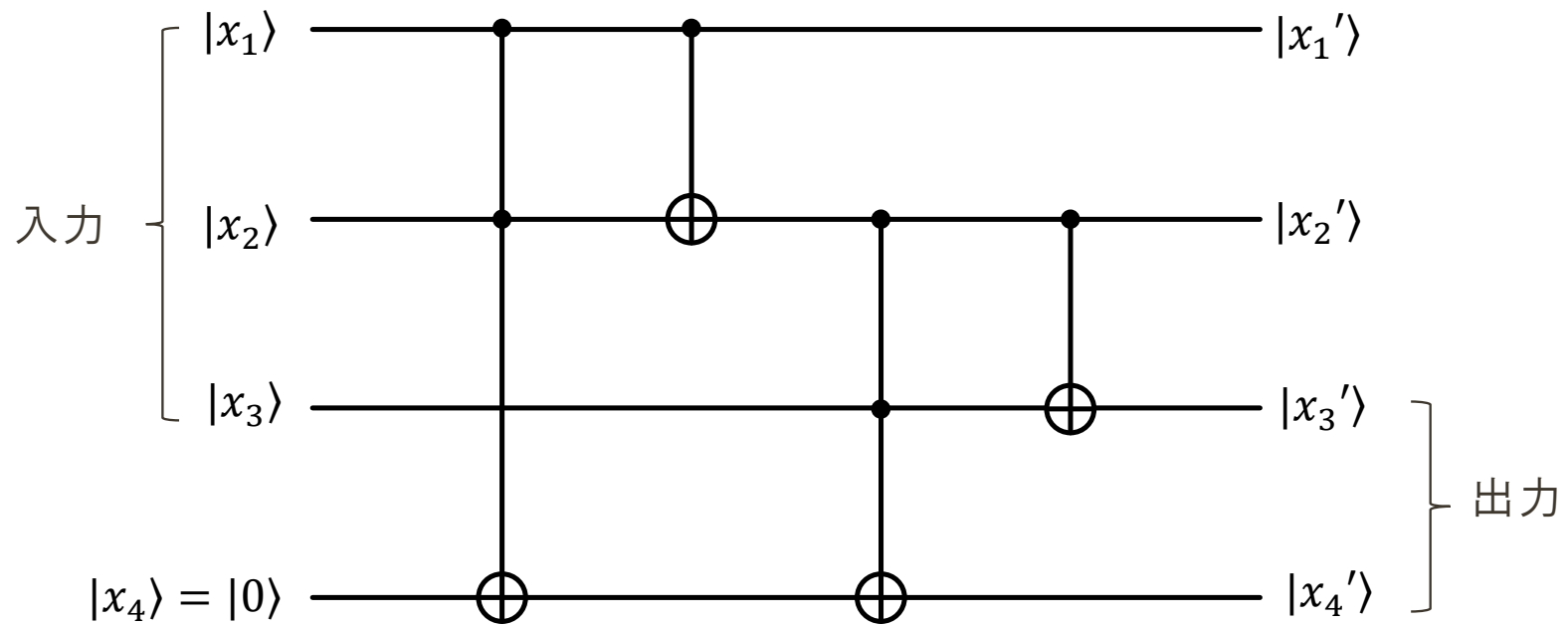


$$CCX = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 1 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 1 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & & & & \\ & & & & 0 & & & \\ & & & & & 1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & 0 & 1 & 0 & 0 \\ & & & & & 0 & 0 & 0 & 1 \\ & & & & & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

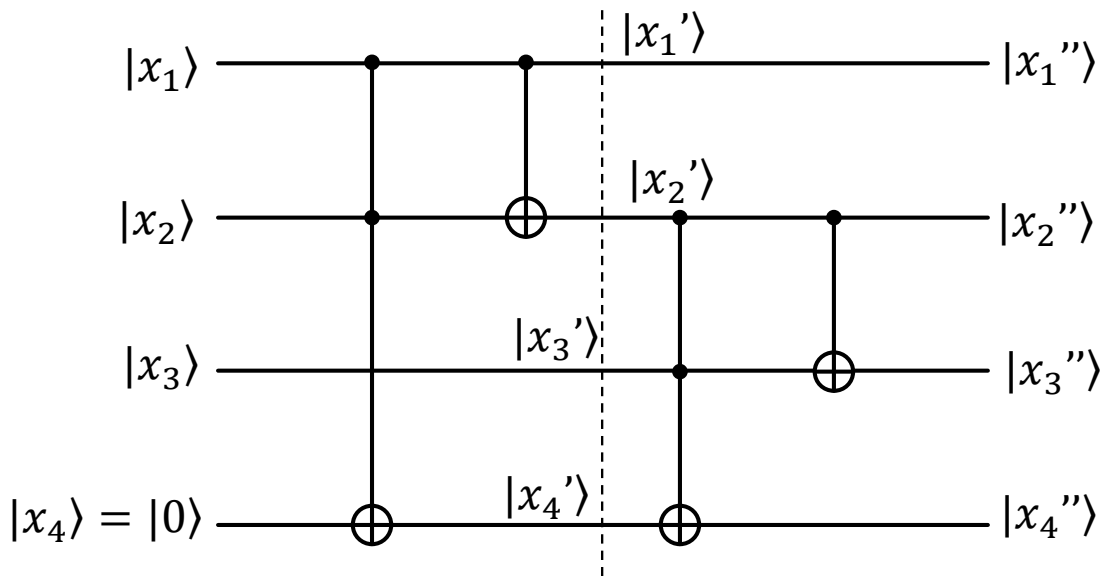
$$x_3' = (x_1 \cdot x_2) \oplus x_3$$

($x_1 = 1, x_2 = 1$ のときのみ、 $x_3' = \overline{x_3}$)

全加算器



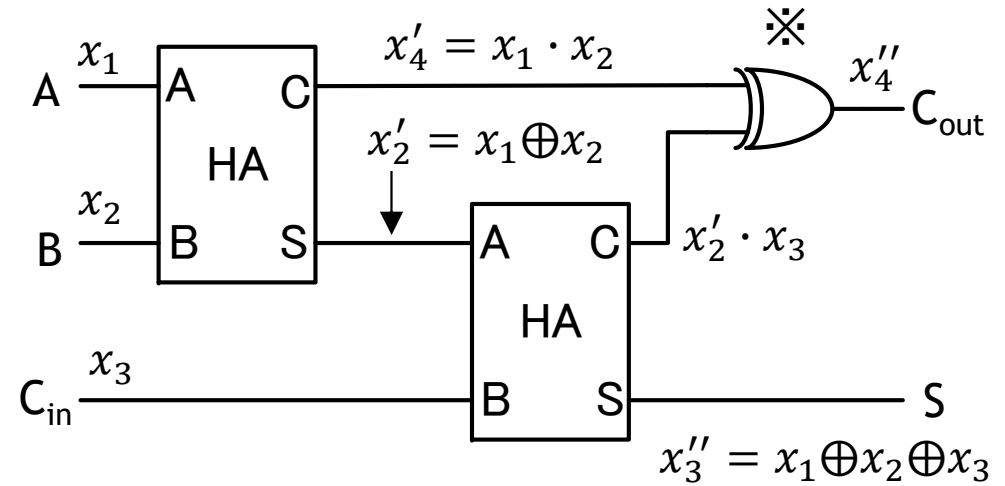
全加算器の証明



$$x'_2 = x_1 \oplus x_2$$

$$x'_4 = x_1 \cdot x_2 \oplus x_4 = x_1 \cdot x_2$$

} Half Adder と同じ



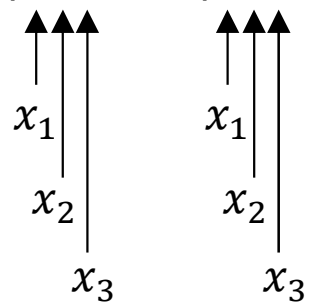
※ 通常ORで表されるが、EXORでも論理的に等価になる（下記参照）。

$$x''_4 = x'_2 \cdot x'_3 \oplus x'_4 = (x_1 \oplus x_2) \cdot x_3 \oplus x_1 \cdot x_2$$

$$x_2 = x_1 \cdot x_2 \oplus x_2 \cdot x_3 \oplus x_3 \cdot x_1 = x_1 \cdot x_2 + x_2 \cdot x_3 + x_3 \cdot x_1$$

練習問題 5

1. 前スライドの全加算器について、下記の入力を行うとき、測定後に得られる出力(x_3, x_4)の値 (x_3, x_4 は0または1) と各出力の測定確率を求めよ。

$$\text{入力 } |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0100\rangle + |1100\rangle)$$


The diagram shows two 4-bit strings, $|0100\rangle$ and $|1100\rangle$, representing the components of the input state. The bits are labeled x_1 and x_2 for the first two positions, and x_3 for the last two positions. Arrows point from the labels x_1 , x_2 , and x_3 to the corresponding bits in both strings.

$$A = x_1 = 0/1 \quad (\text{確率 } 1/2 \text{ で重ね合わせ})$$

$$B = x_2 = 1$$

$$C_{\text{in}} = x_3 = 0$$

次のステップ

- ❧ これまでに開発された量子計算アルゴリズムと量子通信プロトコルを読む
 - ❧ Shorのアルゴリズム
 - ❧ Deutsch-Jozsaのアルゴリズム
 - ❧ Groverのアルゴリズム、Simonのアルゴリズムなど
- ❧ 新しい量子アルゴリズムを考えてみる
 - ❧ いままでになかった変な？機能
 - ❧ 古典コンピュータのアルゴリズムの爆速化など
- ❧ 量子コンピュータを実際に試してみる（無料のクラウド量子コンピュータ）
 - ❧ IBM Quantum Platform <https://quantum-computing.ibm.com/>
 - ❧ Qiskit学習コース <https://qiskit.org/learn/>