ゲート型量子コンピュータの概念と応用

東京大学大学院理学系研究科　量子ソフトウェア寄付講座　大久保毅

コンテンツ

- 量子コンピュータの基礎
    - 量子回路
    - 基本的なゲート操作
- ゲート型量子コンピュータでのアルゴリズム例
    - 量子位相推定
    - NISQでの変分量子アルゴリズム
- ゲート型量子コンピュータとテンソルネットワーク
- まとめ

量子コンピュータの基礎

古典コンピュータと量子コンピュータの情報単位

古典コンピュータ

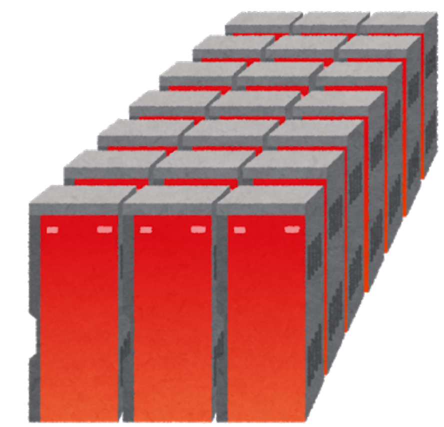
（例えば）0と1の２状態（bit）で情報（状態）を表す

1 bit: 状態は"0" or "1"

2 bits: 状態は"00", "01", "10", "11"

⋮

N bits: 状態は全部で2^N個



量子コンピュータ

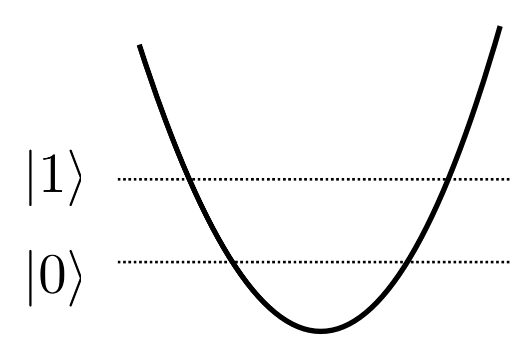
（例えば）2"準位"を持つ量子系（qubit）で情報を表す

1 qubit: 状態は"基底" $|0\rangle, |1\rangle$ の任意の重ね合わせ（線形結合）

重ね合わせの例

$$|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \longrightarrow |\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$$

＊ α, β は一般に複素数



量子ビットの多体系

1 qubit　●　１つの量子ビットの状態は２つの基底ベクトルで表現

$|0\rangle, |1\rangle$　　$\boxed{\text{2次元ベクトル}}$

$$\Rightarrow \quad |\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

重ね合わせ？　$* \ |\alpha^2| + |\beta|^2 = 1$

確率 $P(|0\rangle) = |\alpha|^2$　で状態 $|0\rangle$

確率 $P(|1\rangle) = |\beta|^2$　で状態 $|1\rangle$

$= 1 - P(|0\rangle)$

を観測

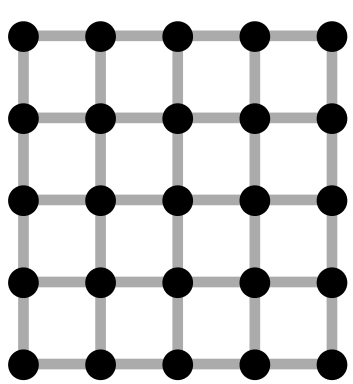
2 qubits  ２つの量子ビット系の状態は４つの基底ベクトルで表現

$|0\rangle \otimes |0\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle, |1\rangle \otimes |1\rangle$　$\boxed{\text{4次元ベクトル}}$

（簡略化した表現：$|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$

$$\Rightarrow \quad |\Psi\rangle = C_{00}|00\rangle + C_{01}|01\rangle + C_{10}|10\rangle + C_{11}|11\rangle = \begin{pmatrix} C_{00} \\ C_{01} \\ C_{10} \\ C_{11} \end{pmatrix}$$

N qubits



状態を表すベクトルの次元 $\underline{2^N}$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \ldots i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \ldots i_N} |i_1 i_2 \ldots i_N\rangle$$

指数関数的に大きい！

$2^{10} = 1024 \sim 10^3$

$2^{20} \sim 10^6, 2^{100} \sim 10^{30}$

量子状態の古典計算困難性

量子状態の従う運動方程式＝**シュレディンガー方程式**

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = \mathcal{H}|\Psi\rangle$$

$|\Psi\rangle$ ：量子状態（2^N次元のベクトル）

$\mathcal{H}$ ：**ハミルトニアン**（$2^N \times 2^N$の行列）

（時間に依存しない場合）

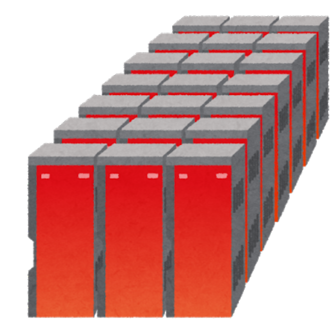
$$\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

E ：エネルギー（数字）

指数関数的に大きな次元を持つベクトルの運動方程式

古典コンピュータでこの運動方程式を厳密に解くには、

膨大なメモリと膨大な計算時間が必要



スパコン富岳を用いても、 50 qubits程度しか計算できない

量子コンピュータ＝高度に制御された量子系

古典計算機では計算できないことを

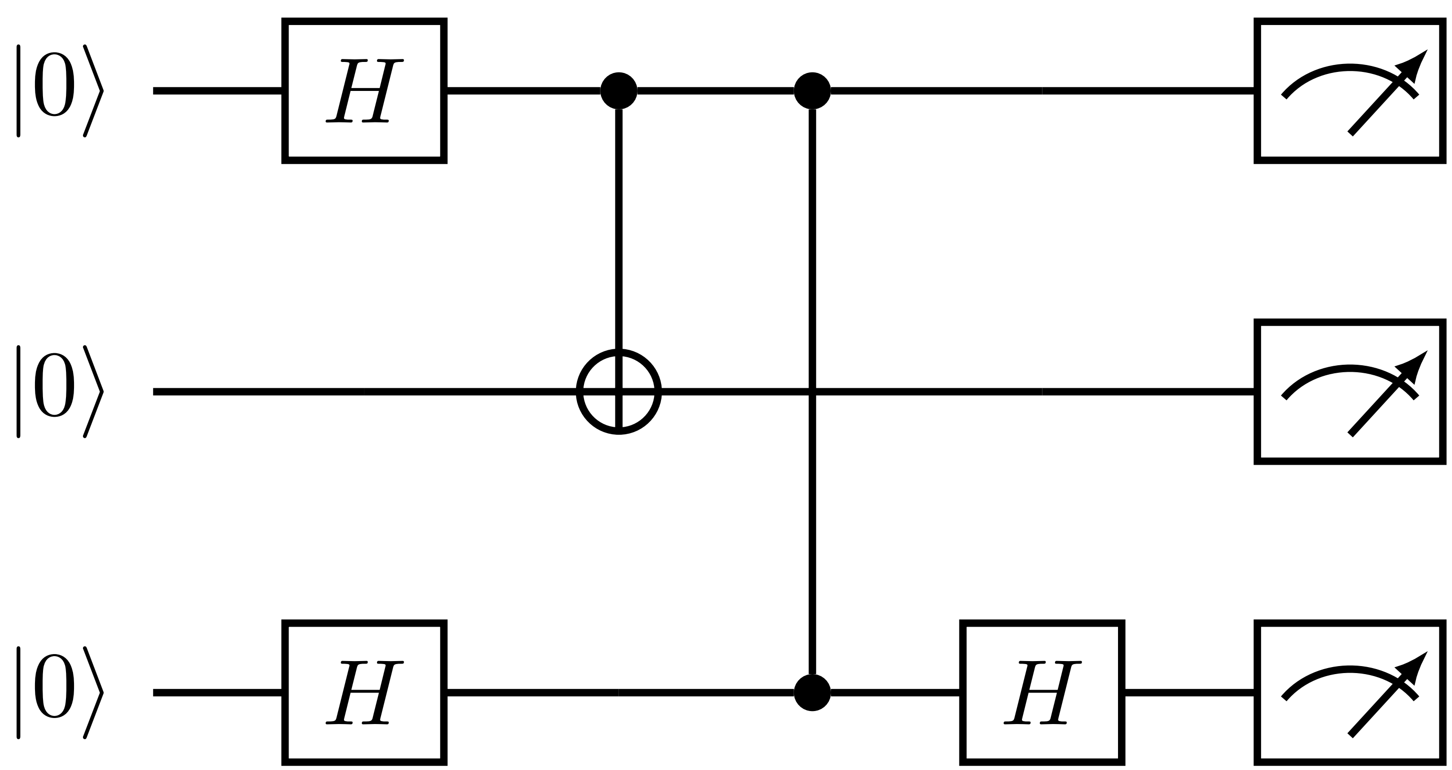
”計算”できる可能性！

量子回路

量子回路

量子回路：**量子ビット**に演算する**ゲート操作**の設計図

- 量子ビットの初期状態を準備
- 左から順番に「量子ゲート」を演算する
  - 量子ゲートはユニタリ行列 $UU^\dagger = U^\dagger U = I$
  - 1qubit、または2qubitに作用するものが基本
- 最後に「測定」して情報（計算結果）を得る



典型的な量子ゲート

$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ の二つのベクトルで状態を表す

1 qubit ゲート

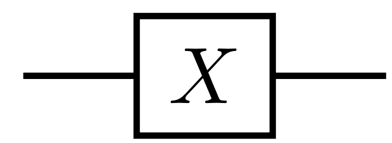
量子回路での記号

- *X* ゲート (NOT ゲート）

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

ビットを反転

$$X|0\rangle = |1\rangle$$
$$X|1\rangle = |0\rangle$$



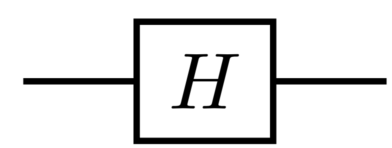
- *H*（Hadamard）ゲート

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

重ね合わせ状態を生成

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

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



典型的な量子ゲート

$$|\Psi\rangle = C_{00}|00\rangle + C_{01}|01\rangle + C_{10}|10\rangle + C_{11}|11\rangle = \begin{pmatrix} C_{00} \\ C_{01} \\ C_{10} \\ C_{11} \end{pmatrix}$$

2-qubit ゲート

量子回路での記号

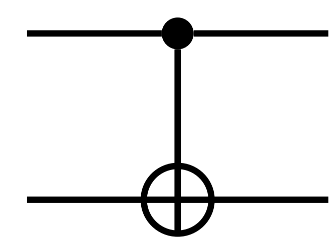
- *CX* (Controlled-NOT) ゲート

1番目のビットに依存して

2番目のビットを反転

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

$$CX|00\rangle = |00\rangle$$
$$CX|01\rangle = |01\rangle$$
$$CX|10\rangle = |11\rangle$$
$$CX|11\rangle = |10\rangle$$

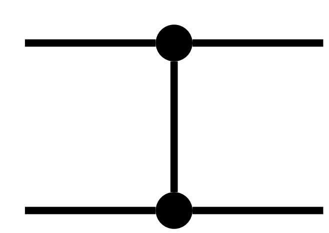


- *CZ*（Controlled-*Z*）ゲート

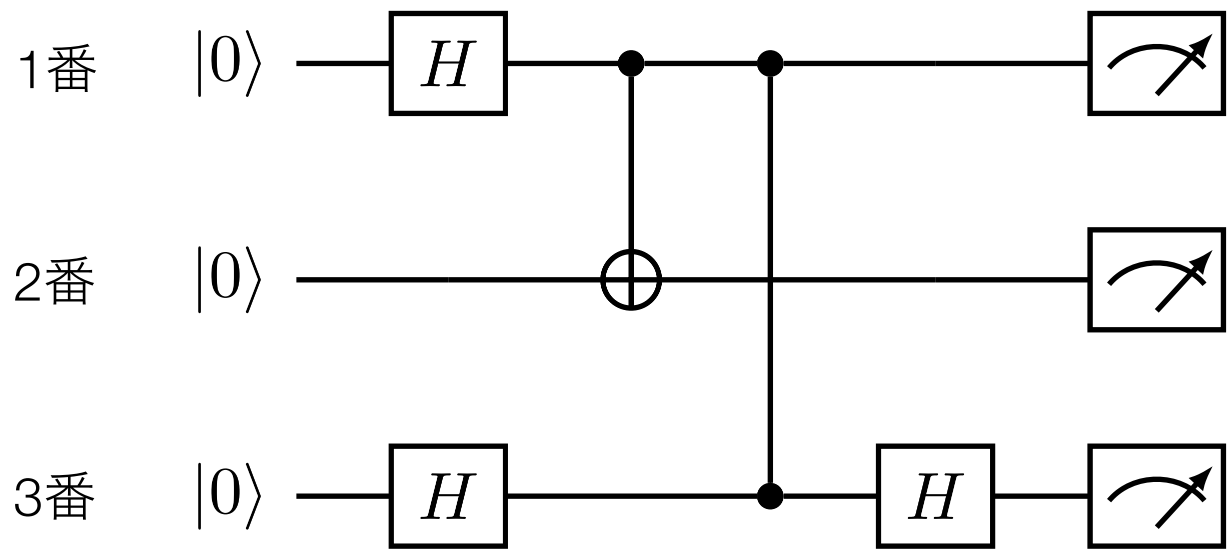
|11>にマイナス符号がつく

$$CZ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$CZ|00\rangle = |00\rangle$$
$$CZ|01\rangle = |01\rangle$$
$$CZ|10\rangle = |10\rangle$$
$$CZ|11\rangle = -|11\rangle$$



量子回路の例



動作確認

$$H_1, H_3 \quad |000\rangle \to \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

状態の分岐

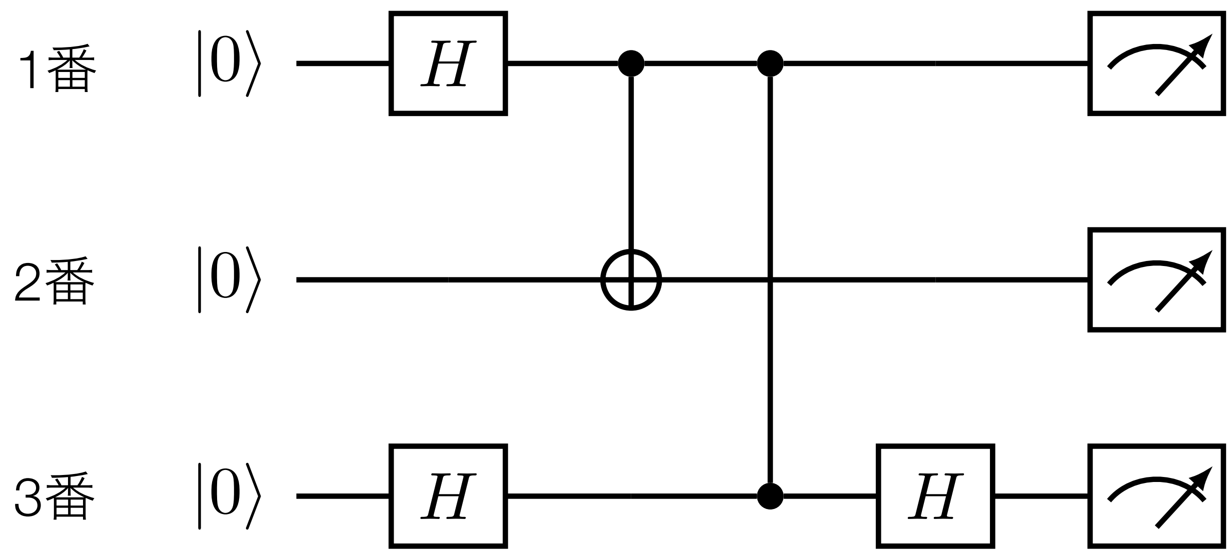
$$= \frac{1}{2}(|000\rangle + |001\rangle + |100\rangle + |101\rangle)$$

$$CX_{12} \quad \to \frac{1}{2}(|000\rangle + |001\rangle + |110\rangle + |111\rangle)$$

$$CZ_{13} \quad \to \frac{1}{2}(|000\rangle + |001\rangle + |110\rangle - |111\rangle)$$

$$= \frac{1}{2}((|00\rangle + |11\rangle) \otimes |0\rangle + (|00\rangle - |11\rangle) \otimes |1\rangle)$$

量子回路の例



動作確認

$$\frac{1}{2}((|00\rangle + |11\rangle) \otimes |0\rangle + (|00\rangle - |11\rangle) \otimes |1\rangle)$$

H_3

$$\begin{aligned}\rightarrow \frac{1}{2}((|00\rangle + |11\rangle) &\otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \\ +(|00\rangle - |11\rangle) &\otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle))\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |111\rangle)$$

状態の干渉

量子回路における量子的な演算

- **並列性**
  - 量子的な重ね合わせ状態を入力すれば、最終状態は対応する出力の重ね合わせになる
- **分岐**
  - *H*ゲートなどにより、状態が"分岐"（|0>, |1>で見た場合）
- **干渉**
  - 重ね合わせの係数は、場合によってはキャンセルし、消える
- **測定による収縮**
  - 測定した基底のいずれか一つの状態になる

ゲート型量子コンピュータでのアルゴリズム

量子位相推定

固有値問題：

$$M\vec{v} = \lambda\vec{v}$$

行列Mが大きい場合、
古典コンピュータでは計算困難

Mがユニタリ行列Uの場合：

$$U\vec{v} = \lambda\vec{v} = e^{i\theta}\vec{v}$$

$\lambda = e^{i\theta}$　　θ：位相

量子位相推定：

前提

- 固有ベクトル $\vec{v}$ が量子状態 $|\psi\rangle$ として準備できる
- ユニタリ行列 U が量子回路で準備できる

固有値に相当する位相 θ を量子コンピュータで計算できる

（注）n-qubitで、$2^n \times 2^n$の行列が取り扱える
ハミルトニアンH は、e^{iH}とするとユニタリ行列

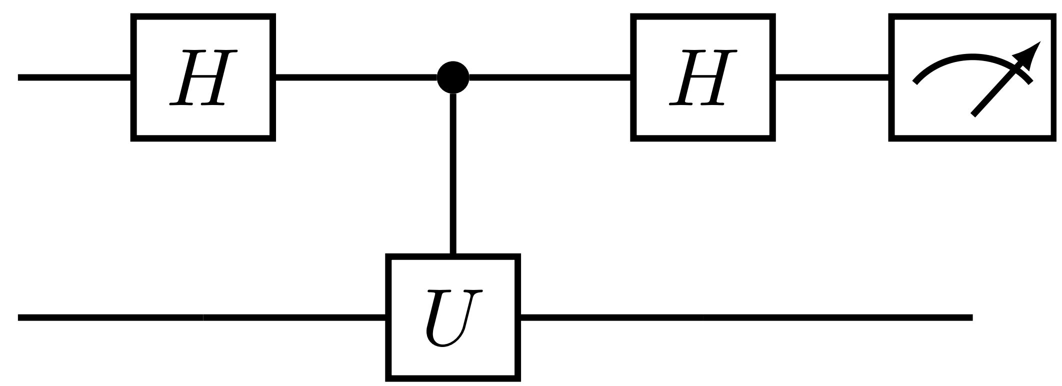
量子位相推定のしくみ

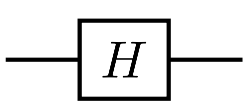
固有値問題： $U|\psi\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$

アダマールテスト

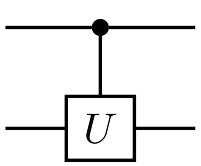
（補助量子ビット） $|0\rangle$

（n-qubitの入力） $|\psi\rangle$

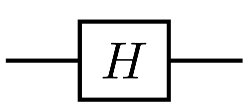




$$|0\rangle \otimes |\psi\rangle \to \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |\psi\rangle$$



$$\to \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + U|1\rangle) \otimes |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\theta}|1\rangle) \otimes |\psi\rangle$$



$$\to \frac{1}{2}\left[\underline{(1 + e^{i\theta})|0\rangle + (1 - e^{i\theta})|1\rangle}\right] \otimes |\psi\rangle$$

確率 $\frac{1}{2} + \cos\theta$ で状態 $|0\rangle$

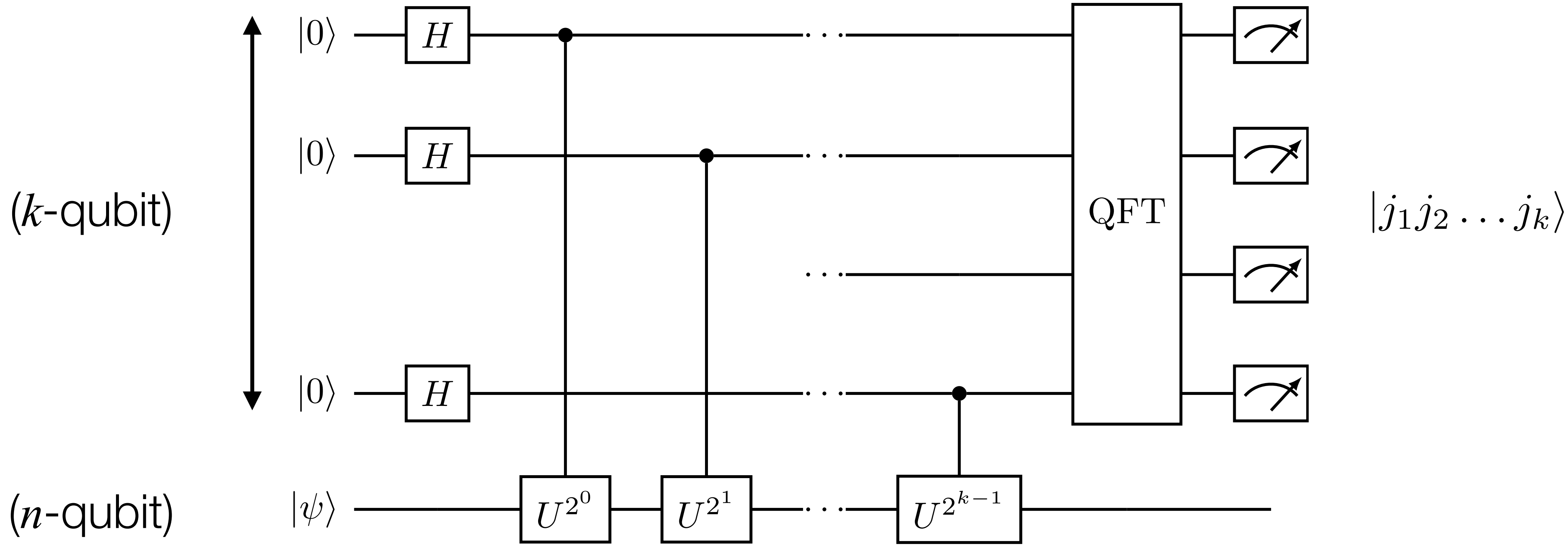
確率 $\frac{1}{2} - \cos\theta$ で状態 $|1\rangle$

を観測

補助ビットの量子状態に
位相情報が埋め込まれた！

量子位相推定

アダマールテストと（量子）フーリエ変換の組み合わせ



$$\frac{\theta}{2\pi} = \frac{j_1}{2} + \frac{j_2}{2^2} + \cdots + \frac{j_k}{2^k} + \ldots$$ として、$|j_1 j_2 \ldots j_k\rangle$ が（高確率で）得られる

量子位相推定の応用： 素因数分解、量子化学でのエネルギー計算、…

古典コンピュータよりも高速な計算が可能に！

しかし、これをちゃんと実行するには、上記の（深い）量子回路を間違いなく実行できる量子コンピュータが必要

近未来の量子コンピュータ

数百ビットの量子コンピュータ

→ 古典計算機では達成できない精度で、量子多体問題が解ける可能性

近い将来に実現： 誤り訂正のない（ゲート型）量子コンピュータ

NISQ: Noisy Intermediate-Scale Quantum computer

Google, IBM, Honeywell, IonQ, ...

超伝導　　イオントラップ

- 計算結果に（様々な）ノイズが含まれる
- 演算回数（量子ゲートの適用回数）に制限

→ 量子位相推定は、まだまだ難しい。
なんでも万能に計算できる訳ではない….

どのような応用が可能だろうか？

変分量子アルゴリズム

変分量子アルゴリズム (Review: M. Cerezo *et al.*, Nature Reviews Physics, 3, 525 (2021))

種々の最適化問題を

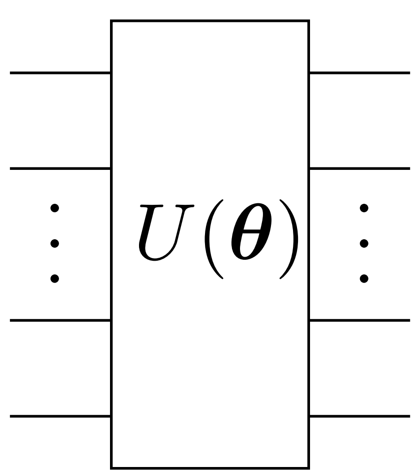
- 量子コンピュータ上で量子状態として表現した「試行関数」
- 古典コンピュータによる試行関数パラメタの最適化

により、近似的に解く

- 分子系の量子化学計算、物性物理の基底状態計算、ダイナミクス計算、量子機械学習...
- 一般に、古典コンピュータに勝るという証明はない

量子コンピュータ

$|\tilde{\Psi}\rangle = \quad |\Psi_{\mathrm{in}}\rangle$



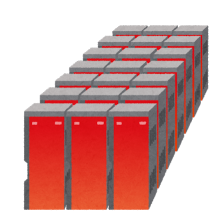
測定結果

$\boldsymbol{\theta}$の情報

古典コンピュータ

期待値を統合してコスト関数Fを計算

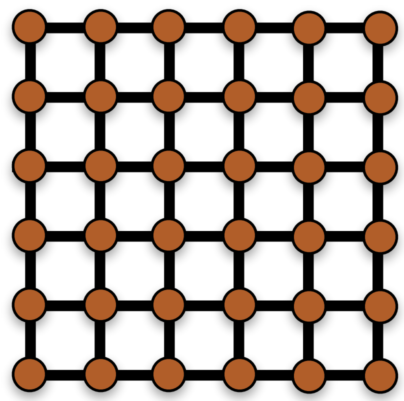
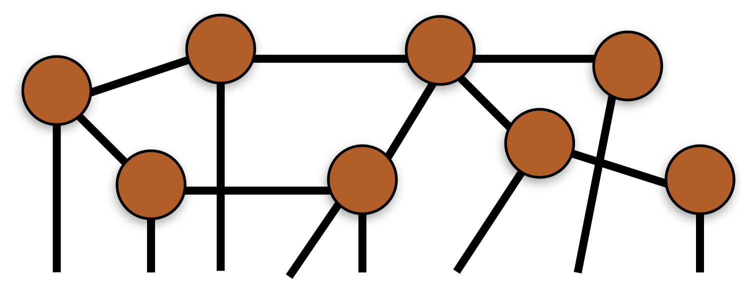
Fを下げるように（次の）$\boldsymbol{\theta}$を決定



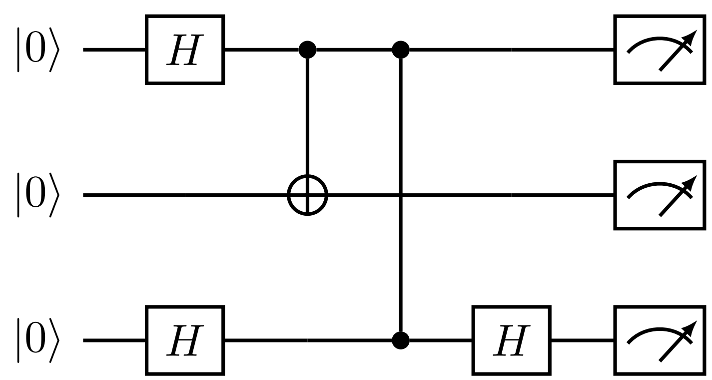
ゲート型量子コンピュータとテンソルネットワーク

テンソルネットワーク

テンソルネットワーク ：テンソルの縮約で構成されたネットワーク

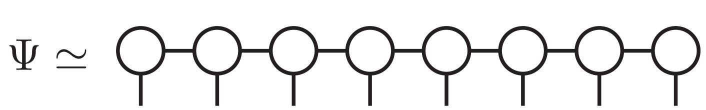
量子回路： ユニタリ行列（テンソル）で構成されたテンソルネットワーク



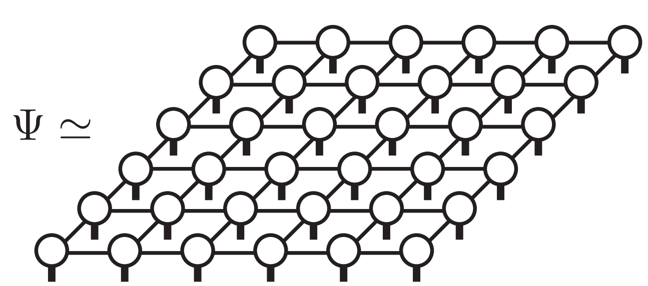
量子回路の古典シミュレーション
= テンソルネットワークの縮約

量子状態： ある種の状態はテンソルネットワークで高精度に近似できる

MPS (Matrix product state)



TPS (Tensor product state)



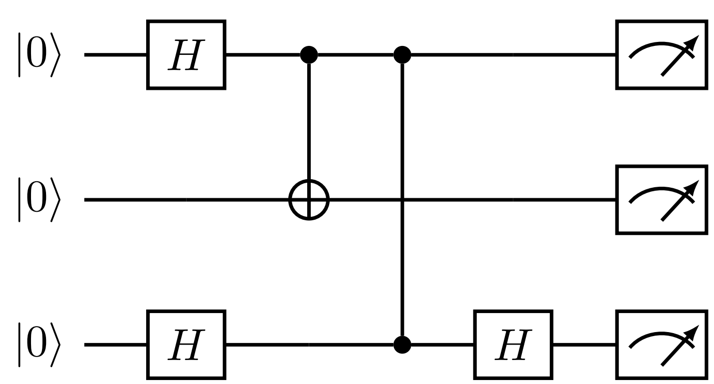
たくさんのqubitからなる状態を
古典コンピュータで扱える

$$O(2^N) \to O(N)$$

テンソルネットワークによる量子回路シミュレーション

量子回路のシミュレーション=テンソルネットワークの**縮約**

古典コンピュータでの計算：
実際の回路の実行順序によらず、最適な順番でテンソルの縮約計算を行うことで、計算コスト、メモリコストが低下



最先端の計算： Y. A. Liu, *et al*., Gordon bell Prize in SC21 (2021),

Googleが量子超越を主張したランダム量子回路の古典サンプリング

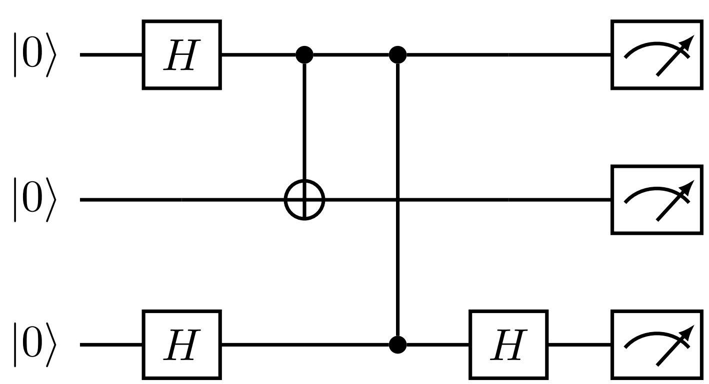
10,000年
（最初の見積もり）

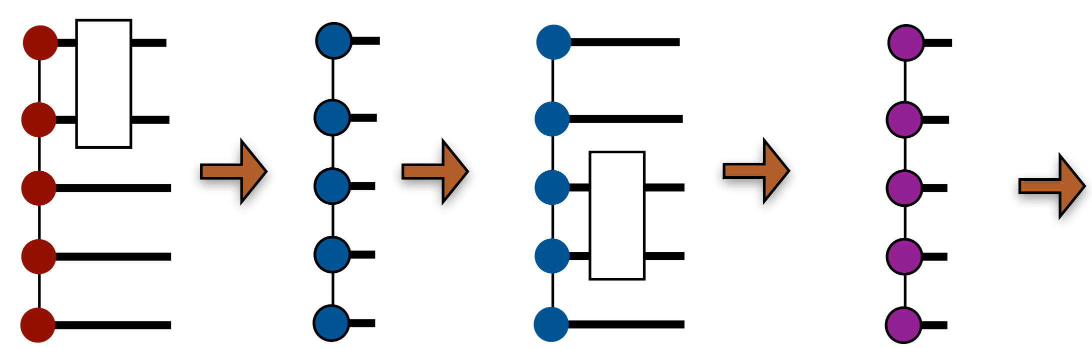
304秒！ （cf. 量子コンピュータ=200秒）

テンソルネットワークによる近似シミュレーション

量子回路の近似シミュレーション

古典コンピュータでの計算：
量子回路に従って移り変わる量子状態をテンソルネットワークで近似的に表現する





- 初期は小さいテンソルで表現可能
  - 非常に多くのqubitを古典コンピュータで取り扱える
- 回路が深くなると、一般にテンソルが大きくなる
  - 計算を進めるには（テンソルを小さく保つ）近似が必要
  - 深くなればなるほど、近似精度が低下

まとめ

- ゲート型量子コンピュータでは、古典コンピュータよりも高速な計算が可能なアルゴリズムが存在
  - そのようなアルゴリズムの実行には、エラーのない、誤り訂正機能を持った量子コンピュータが必要
- 近未来のゲート型量子コンピュータは、ノイズ・エラーが多い状況で使われる
  - 古典コンピュータと組み合わせた変分量子アルゴリズムの可能性
- テンソルネットワークはゲート型量子コンピュータと相性が良い
  - 量子回路の古典コンピュータシミュレーション
  - （テンソルネットワークを量子回路に変換することもできる）