

古典力学から量子力学へ そして量子計算へ

2023/08/28

測位技術振興会 (SAPT) 知能・情報・エネルギー分科会

編著 一色 浩

BROCADE CHAIN – TRUST BOOK

法律により本ファイルの
複写・コピーは
禁止されています。

BROCADE CHAIN – TRUST BOOK
発行：SAPT出版局
Mercari Code: Axion
Serial No. 24-2

本書は、教育機関である測位技術振興会の知能・情報・エネルギー分科会における教材として編纂されたものである。
研究・教育を目的とする引用については、著作権法第32条1項に基づいて実施されるものとする。

本書は、学術同人誌として当該規定に則るものとする。

第2章 量子力学とは

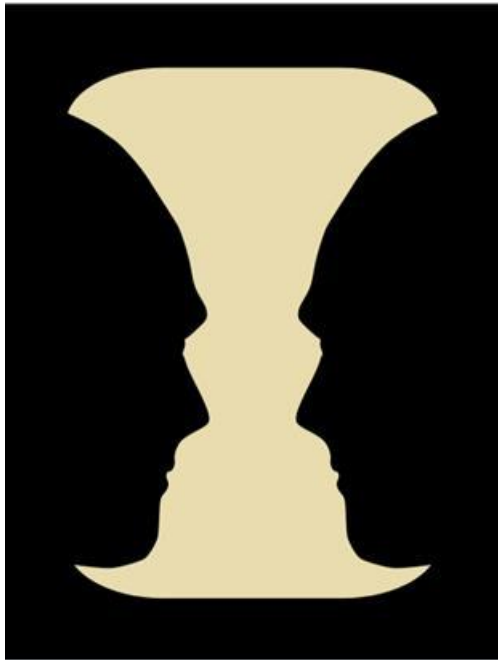
2023/08/28

測位技術振興会 (SAPT) 知能・情報・エネルギー分科会
一色 浩

量子力学は古典力学よりも難しくない，何故なら線形だから．

しかし，我々の経験に反する奇妙な理論である．

柔軟に受け入れれば，とても魅力的な理論である．



Rubinの壺の一例

量子力学の登場で古典力学は誤りであるという考えには頷けないし，不毛である．それぞれの力学はそれぞれの観測事実に整合しているので，それぞれに正しいと言えよう．それぞれの力学はそれぞれの観測に対して正しいというべきで，正しいかどうかは相対的なものと考えるべきであろう．

古典力学から量子力学へ

「量子」と「古典」の境界はどこにあるのか？

出典：https://www.jps.or.jp/books/gakkaishi/2016/10/71-10_70fushigi33.pdf

30 年ほど前の量子力学基礎論の国際会議で、以下のよ うな会話が あったそうである。「テニスボールのような巨視的な物体でヤング干渉縞のような量子干渉効果を見ることはできない」「たしかにそうだ、でもサッカーボールならできるかもしれない」。ここでサッカーボールとは、C60 フラーレン分子（原子量 720）を指す。その後、C60 分子の量子干渉効果が実際に観測され、さらにいまでは原子量が 7,000 程度もある巨大分子の量子干渉効果が観測されるようになった。このまま技術が進展すれば、いつかウィルス の量子干渉効果すら観測できるかもしれない。

このように巨大な物体でも量子力学が成り立っていることが確かめられる一方で、我々の日常の世界では、量子力学の「重ね合わせ状態」や「量子干渉効果」を体感することはない。我々の住むマクロな世界が、古典力学によって記述されているからである。では、「量子」と「古典」の境界はどこにあるのだろうか。多くの場合、考えている系とまわりの環境の相互作用が重要である。たとえばヤングの干渉縞の実験で、C60 分子が片方のスリットを通過したとき、スリット物

質との間でエネルギーのやりとりをしたとする．すると，分子がそのスリットを通過したことが，スリット物質の痕跡から（原理的に）わかってしまい，ヤングの干渉縞は消失する．つまり，大きな物体で重ね合わせ状態をつくるには，環境（例ではスリット物質）との相互作用を小さくする必要がある．このことは，多くの古典と量子の移り変わりを説明する．しかし，考える系や現象によって多様な量子と古典のクロスオーバーがありうるので，今後新しいとらえかたが出てきてもおかしくはない．

古典と量子の境界について考察することは，いまでも重要である．たとえば，現在のコンピュータ技術を支える半導体集積回路の技術がこのまま進展すると，10～20年後には回路の大きさは原子ほどになる．今後，コンピュータの能力向上に，どこまで古典的な情報制御を利用できるだろうか．それともどこかで量子力学的な情報制御（量子コンピュータ）に移行するだろうか．また，生物はタンパク質の酵素反応を利用しているが，反応を起こす小さな領域は量子力学にしたがい，タンパク質のほかの大部分は古典力学にしたがっている．生物はどのように量子力学と古典力学を使いわけているのだろうか．このように，古典と量子の境界についての問いは，今後も有益な視点を与え続けるであろう．

会誌編集委員会（日本物理学会）

量子力学と量子計算の誕生

量子の発見 ： プランク， アインシュタイン

二重性 ： アインシュタイン， ド・ブロイ

量子の挙動 ： シュレディンガー， ハイゼンベルグ

波動＝確率波 ： ボルン， ボーア

量子計算 ： ベニオフ， ファインマン， ドイチ， ショア

プランクの黒体放射

黒体（完全放射体ともいう）放射：黒体とは、全ての波長にわたって電磁波（光）を全く反射しない物体である。だから見た目は黒く見える。そのような物体は実在しない。現在、工業的に作り出された最も黒体に近い物質は、99.97 % の光（電磁波）を吸収するベンタブラックである。

物体からの放射（反射を含まない）には、物体の相（固体・液体・気体）にかかわらず温度によって色が変換ることが経験的に知られている。色は、さまざまな波長の光が混ざり合って構成されている。色の変化は、波長ごとの強度分布の変化であることがスペクトルの分析によりわかっており、またその分布は、温度によって一定であることも知られている。これを物体からの熱放射という。特に、黒体からの熱放射を黒体輻射と言う。

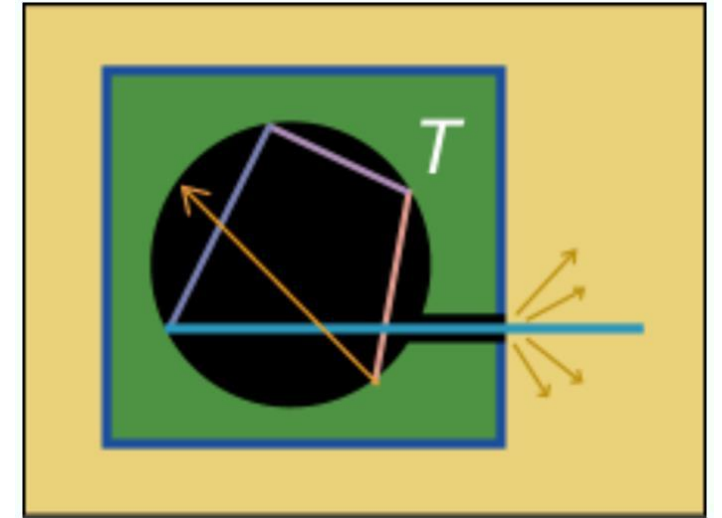
出典：<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E9%BB%92%E4%BD%93>

空洞放射：黒体放射に非常に近いものを人工的に作り出して現実に測定することは可能である。

図のように,物体の内部に空洞を作ってやり,狭い穴を作ってやる.材質は不透明でありさえすれば何でもよい.内壁にはツヤがない方がいい.

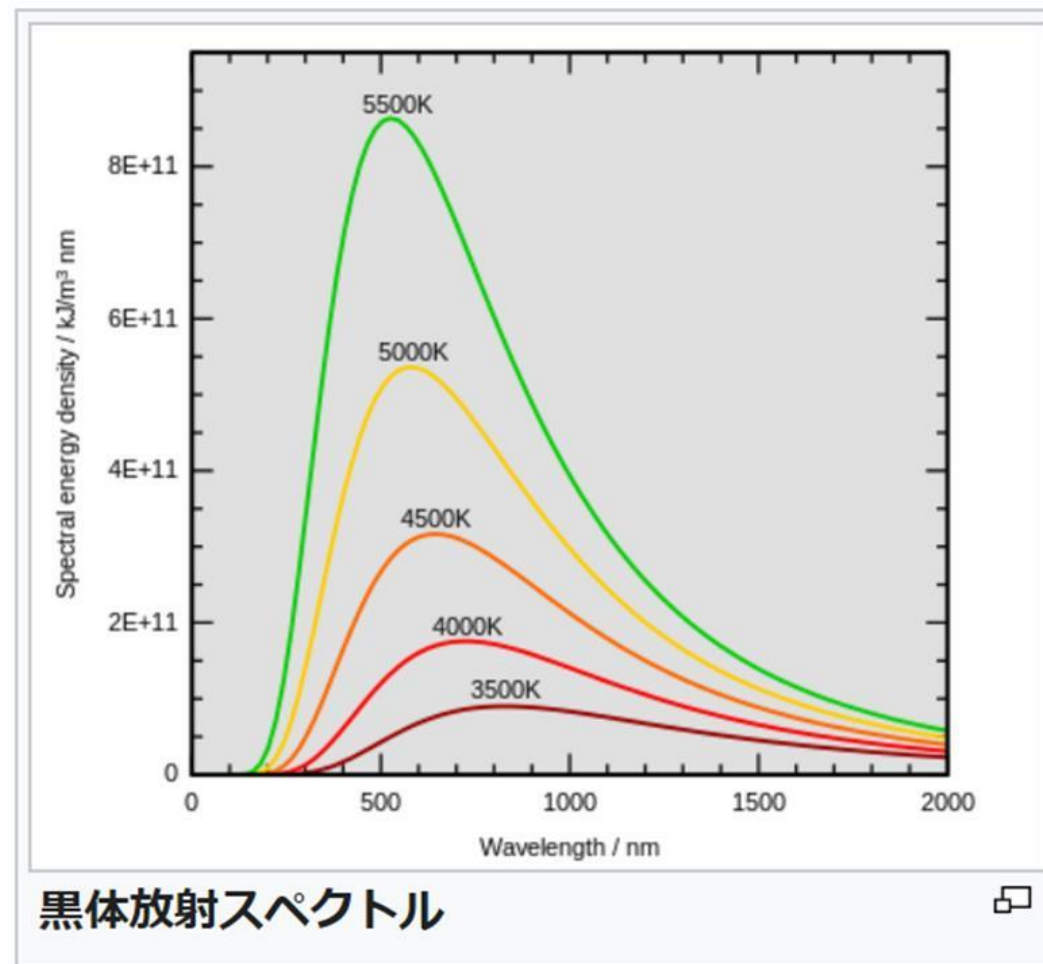
その穴から内部に飛び込んだ光は中で乱反射し,外に出る出る前に内部の壁に吸収されてしまう.これは黒体と非常に良く似た状況と言える.

この穴からは,内部の壁の温度に応じたスペクトルを持つ電磁波が出てくる.これを「**空洞放射**」と呼び,黒体放射とほぼ同じ意味の用語として使われる.



出典：<https://eman-physics.net/statistic/blackbody.html>

プランクの公式（量子仮説）：黒体放射のスペクトルに関する法則であり，量子力学の基本法則のひとつである．**プランクの公式**とも呼ばれる．この公式から導かれるスペクトルと温度特性は，全波長領域において，熱放射の実験結果から予想される黒体放射のスペクトルと一致する．1900年，ドイツの物理学者マックス・プランクによって導かれた．プランクはこの法則の導出を考える中で，物体が光を吸収または放射する時，そのエネルギーは，エネルギー素量（現在ではエネルギー量子と呼ばれている） $\varepsilon = h\nu$ の整数倍でなければならないと仮定した．この**量子仮説**（量子化）は，その後の量子力学の幕開けに大きな影響を与えた．



出典：
<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%97%E3%83%A9%E3%83%B3%E3%82%AF%E3%81%AE%E6%B3%95%E5%89%87>

1859年、キルヒホッフは黒体の放射する輻射場の熱平衡分布は温度のみに依存することを明らかにし、その翌年、空洞放射が理想的な黒体輻射を実現することを示した。プランクの公式以前、黒体輻射の分布式としては、レイリー・ジーンズの公式とヴィーンの公式が考案されていた。前者は、短波長（高周波数）領域においては実験データと一致するものの、長波長（低周波数）では一致しなかった。後者は反対に長波長（低周波数）領域で実験結果とよい一致を示すものの、短波長（高周波数）領域では合わなかった。

プランクは1900年に、ヴィーンの公式より良い公式を得ようとする過程でプランクの公式を考案した。全ての波長領域において非常によく実験データと一致した。物質中の荷電振動子の異なるモードについて、振動子のエネルギーが離散的になっていると仮定したところ、プランクの法則を導出することができた。

プランクはこの仮定にはなんら物理的重要性はなく、公式を導くための単なる数学的な道具と考えていた。**エネルギーの量子化**は物理学史上、初めて導入された量子論的概念で、量子力学の形成に大きな役割を果たした。

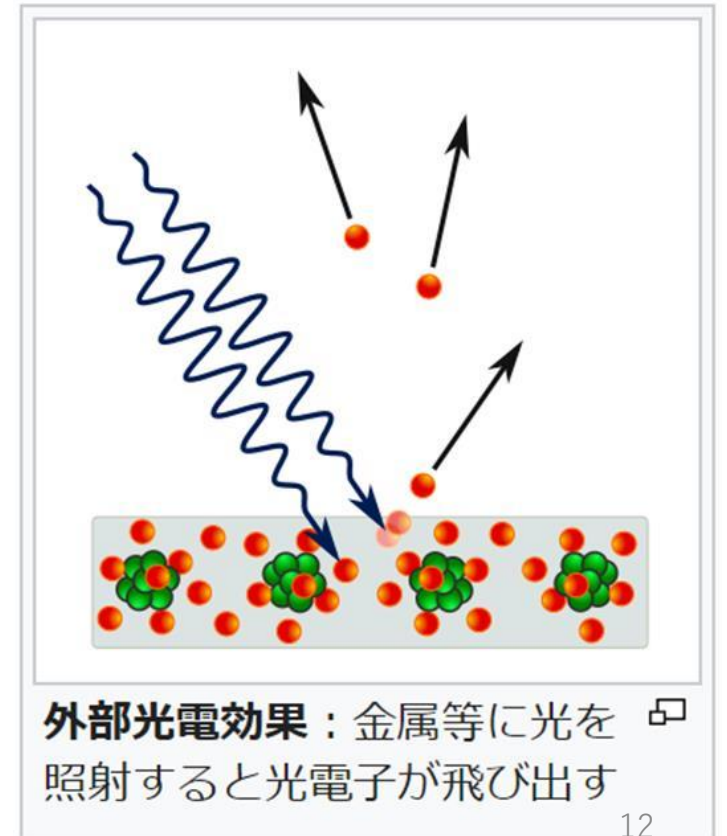
アインシュタインの光電効果

光電効果；物質に光を照射した際に，電子が放出されたり電流が流れたりする現象である．デジタルカメラや太陽光発電の動作原理として広く利用されている．外部光電効果と内部光電効果の二種類があり，単に光電効果という場合は外部光電効果を指す場合が多い．内部光電効果は，光起電力効果とも呼ばれる．

外部光電効果：光電子の放出は物質に一定の振動数以上の光を照射した時のみ発生する．このときの振動数を限界振動数 ν_0 と言う．またその時の波長を限界波長 λ_0 と言い，これらの値は物質の種類によって決まっている．入射光の強度にはよらない．

出典：

<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E5%85%89%E9%9B%BB%E5%8A%B9%E6%9E%9C>



歴史：・1839年、**ベクレル**が光起電力効果の研究において、光電効果による光と電流の関係性を見いだした。光起電力効果に関する最初の報告となった。

・1887年、**ヘルツ**は、陰極に紫外線を照射することにより、電極間の放電現象が起こって電圧が下がる現象として、光電効果を見出した。

・1887年、金属に短波長の（振動数の大きな）光を照射すると、電子が表面から飛び出す現象が**ハルヴァックス**によって発見された、

その後、ドイツの物理学者**レーナルト**の実験的研究で解明が進んだ：

- ・電子の放出は、ある一定以上大きな振動数の光でなければ起こらず、それ以下の振動数の光をいくら当てても電子は飛び出してこない。
- ・振動数の大きい光を当てると光電子の運動エネルギーは変わるが飛び出す電子の数に変化はない。
- ・強い光を当てるとたくさんの電子が飛び出すが、電子1個あたりの運動エネルギーに変化はない。

1905年、**アインシュタイン**の論文『光の発生と変換に関する1つの発見的な見地について』内で導入した**光量子仮説**によって、説明付けられた。

光子のエネルギーと運動量

光のエネルギーはアインシュタインの光量子仮説により

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad \text{or} \quad E = \hbar\omega \quad \text{ここで} \quad h = 2\pi\hbar$$

光の運動量は光の質量はゼロであるが $E = mc^2$ と考え、運動量を $P = mc = E/c$ とし、これに上の式を代入すると

$$P = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad \text{or} \quad P = \hbar k$$

ド・ブロイの物質波

物質波

出典：<https://wakariyasui.sakura.ne.jp/p/atom/ryuuha/doburoi.html>

波動であるはずの光に粒子性がある．ド・ブロイはこれとは逆に粒子に波動性があると考えた

光子の運動量は $p = h/\lambda$ であるが、あらゆる粒子においてもこの式は成り立つと考えた

上式を変形すると $\lambda = h/p$ であり、 $p = mv$ を代入すると $\lambda = h/p = h/(mv)$ であり、このときの波を**物質波**あるいは**ド・ブロイ波**という．特に電子の場合、**電子波**という．

この波は電子以外にも陽子や中性子にもみられる．理論的には運動する物体すべてにみられる．突拍子もない考えのようではあるが、この理論が量子力学へとつながっていった．

ド・ブロイ波の速度

ド・ブロイの速度は位相速度でなくて波束（粒子）の移動速度である。

粒子の運動量とエネルギー： $P = \hbar k$, $E = \hbar \omega \rightarrow k = \frac{P}{\hbar}$, $\omega = \frac{E}{\hbar}$

波の位相速度

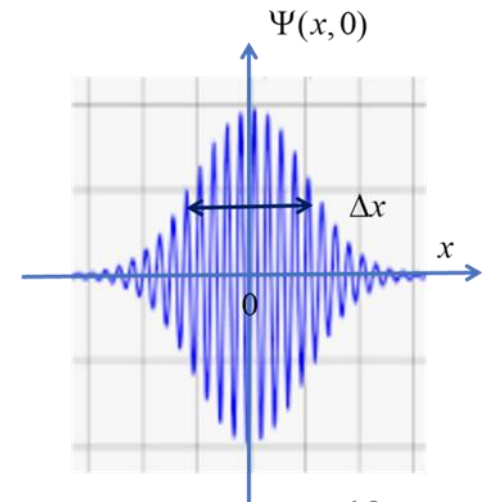
波の位相速度： mother wave = $Ae^{i(kx - \omega t)}$, $v_{phase} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{P} = \frac{\frac{1}{2}mv^2}{mv} = \frac{1}{2}v$

wave packet = $\int \Phi(k)e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$,

波の群速度：

$$v_{group} = \frac{d\omega(k)}{dk} = \frac{dE}{dP} = \frac{d}{dP} \left(\frac{P^2}{2m} \right) = \frac{P}{m} = v$$

波束は粒子速度で移動する。粒子は波束に他ならない。

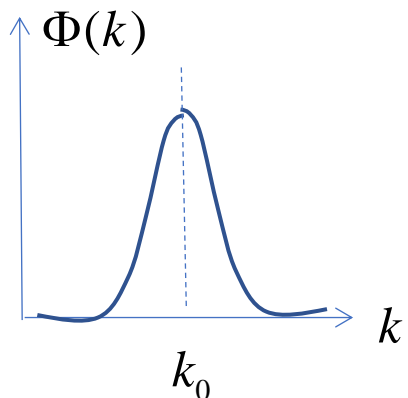


波束による自由粒子の表現

波動の一般的表現： $\Psi(x, t) = \int dk \Phi(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}$

停留位相の原理： $k = k_0$ 近辺のみ積分が0でない可能性を有す．また，位相 $\phi = kx - \omega(k)t$ が停留していないといけない．

$$\left. \frac{d\phi}{dk} \right|_{k_0} = x - \left. \frac{d\omega(k)}{dt} \right|_{k_0} t = 0, \quad \left. \frac{d\omega(k)}{dt} \right|_{k_0} : \text{群速度}$$



波束の $\Phi(k)$



位相の停留

$$\Psi(x, t) = \int dk \Phi(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} \rightarrow \Psi(x, 0) = \int dk \Phi(k) e^{ikx}$$

$$k_0 \text{ の近くで } \omega(k) = \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + O((k - k_0)^2)$$

$$\Psi(x, t) = \int dk \Phi(k) e^{i\left(kx - \omega(k_0)t - \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0)t\right)} = e^{i\omega(k_0)t} e^{i\left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k_0} k_0 t} \int dk \Phi(k) e^{ik\left(x - \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k_0} t\right)}$$

絶対値を取ると $|\Psi(x,t)| = \left| \int dk \Phi(k) e^{ik \left(x - \frac{d\omega(k)}{dt} \Big|_{k_0} t \right)} \right| = \left| \Psi \left(x - \frac{d\omega(k)}{dt} \Big|_{k_0} t, 0 \right) \right|$

従って、波束は群速度で移動することが分かる。

シュレディンガーの波動方程式

古典的な波動方程式の導出法

微分方程式 \rightarrow 分散方程式

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) p = 0 \quad p(x, t) = P e^{i(kx - \omega t)} \quad \left(\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 \right) p = 0 \quad \text{or} \quad \frac{\omega^2}{c^2} - k^2 = 0$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x} \right) \sim (-i\omega, ik) \quad \text{or} \quad (\omega, k) \sim \left(i \frac{\partial}{\partial t}, -i \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

分散方程式 \rightarrow 微分方程式

$$\left(\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 \right) p = 0 \quad \rightarrow \quad \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) p = 0$$

シュレディンガー方程式の導出法1

電子の運動量 P と波数 k の関係： $p = \frac{h}{\lambda} \rightarrow p = \frac{kh}{2\pi} \rightarrow p = k\hbar$

電子の運動エネルギー E と円周波数 ω の関係： $E = h\nu = \hbar\omega$

P と E の関係： $E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \hbar\omega = \frac{k^2\hbar^2}{2m} \rightarrow i\hbar(-i\omega) = -\frac{\hbar^2}{2m}(ik)^2 \rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$

シュレディンガーの波動方程式：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \rightarrow i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad \text{where} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

ここで、 \hat{H} はハミルトニアン演算子、 $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ は運動量演算子である。

Ψ の意味を問われた時、シュレディンガーは「知らない」と答えた。

シュレディンガー方程式の導出法2

自由粒子の波動関数: $\Psi(x,t) = e^{ikx-i\omega t}$ 運動量とエネルギー: $P = \hbar k$, $E = \hbar\omega$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) = k\hbar \Psi(x,t) = P\Psi(x,t) \quad \rightarrow \quad \text{運動量演算子: } \hat{P} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \rightarrow \quad \hat{P}\Psi = P\Psi$$

Ψ は運動量演算子の固有状態で, P は固有値である :

$$E\Psi = \frac{P^2}{2m} \Psi = \frac{P}{2m} P\Psi = \frac{P}{2m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi = \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (P\Psi) = \frac{1}{2m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi$$

書き直すと

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi = E\Psi \quad \rightarrow \quad \text{エネルギー演算子} \quad \rightarrow \quad \hat{E} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\hat{P}^2}{2m}, \quad \hat{E}\Psi = E\Psi$$

一方 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hbar\omega\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)$

上で導いた方程式： $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi = E\Psi$

と合わせて自由粒子のシュレディンガー方程式： $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi = \hat{E}\Psi$

ポテンシャル下の粒子のシュレディンガー方程式への拡張：

全エネルギー $H = \text{運動エネルギー} + \text{位置エネルギー} \quad V:$

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(x,t) \quad \rightarrow \quad \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(x,t)$$

これより $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hat{H}\Psi \quad \text{or} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right) \Psi$

ここで、 $V(x,t)$ は演算子でもある.

演算子の性質： $\hat{A}\hat{B}\phi = \hat{A}(\hat{B}\phi), \quad (\hat{A} + \hat{B})\phi = \hat{A}\phi + \hat{B}\phi$

$$\hat{x}\hat{P}\phi - \hat{P}\hat{x}\phi = \hat{x}(\hat{P}\phi) - \hat{P}(\hat{x}\phi) = \hat{x}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\phi\right) - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\phi) = -\frac{\hbar}{i}\phi = i\hbar\phi \rightarrow \hat{x}\hat{P} - \hat{P}\hat{x} = i\hbar$$

演算子は交換できない： $[\hat{x}, \hat{P}] \equiv \hat{x}\hat{P} - \hat{P}\hat{x} = i\hbar$

ボルンによる波動方程式の確率解釈

シュレディンガーは波動方程式導出時、 ψ の意味を理解していなかった。

シュレディンガーの解釈：粒子が分解してばらばらになる。

ボルンの解釈：粒子は分解しない。存在確率を表す*： $dP(\vec{x},t) = |\Psi(\vec{x},t)|^2 d^3x$

反確率解釈のアインシュタインやシュレディンガーは同意しなかった。

確率解釈が正統的な解釈とされ、現在の量子力学はこの解釈に立脚している。

*) 確率解釈は、1光子の2重スリット実験やマックスゼンダー干渉計の実験結果を見るとよく理解できる。

演算子のエルミート性

シュレディンガーの方程式： $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \Psi = \hat{H} \Psi$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x, t) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \text{ は有界}$$

もし $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t_0)|^2 dx = 1$ ならば, $t > t_0$ において1であり続ける.

確率密度関数 $= |\Psi(x, t)|^2 = \rho$, $N(t) = \int \rho dx$; If $N(t_0) = 1$, $\frac{dN}{dt} = 0$ for $t > t_0$.

$$\frac{dN}{dt} = \int dx \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) = \int dx \frac{i}{\hbar} \left((\hat{H} \Psi)^* \Psi - \Psi^* (\hat{H} \Psi) \right)$$

$dN/dt = 0$ が言えるためには $\int dx (\hat{H} \Psi)^* \Psi = \int dx \Psi^* (\hat{H} \Psi) \leftarrow \text{エルミート性}$

T が エルミート 演算子 なら $\int dx \psi_1^* T \psi_2 = \int dx (T \psi_1)^* \psi_2$

$$\frac{dN}{dt} = \int dx \frac{\partial \rho}{\partial t} = \int dx \frac{i}{\hbar} \left((\hat{H}\Psi)^* \Psi - \Psi^* (\hat{H}\Psi) \right)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi - \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \rightarrow \frac{dN}{dt} = 0$$

確率の流れ：
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \right]$$

確率の流れと確率の保存則：
$$J = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

3次元の場合：
$$\vec{J} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} (\Psi^* \nabla \Psi) \rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0$$

古典力学とのアナロジー

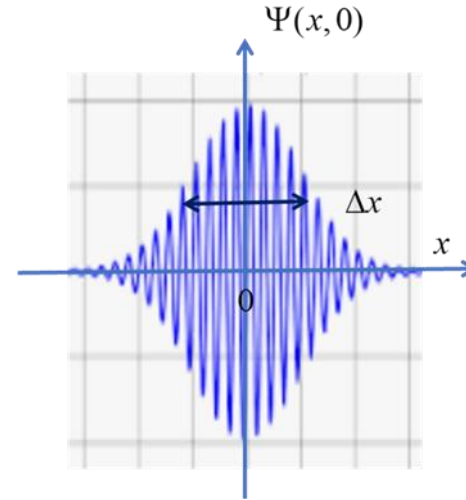
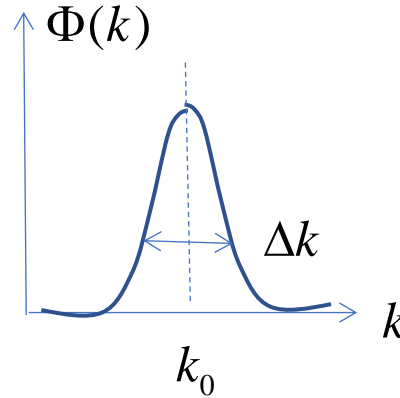
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad Q = \int_V \rho dV \quad \frac{dQ}{dt} = \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \int_V \nabla \cdot \vec{J} dV = - \int_S \vec{J} \cdot d\vec{S}$$

	流体力学	電磁気学	量子力学
ρ	質量密度	電荷密度	確率密度
\vec{J}	流量密度	電流密度	確率流密度
Q	質量	電荷	粒子の存在確率

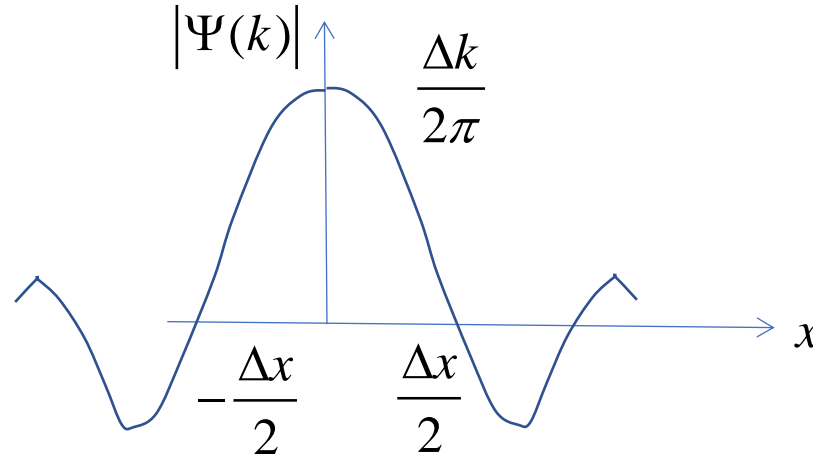
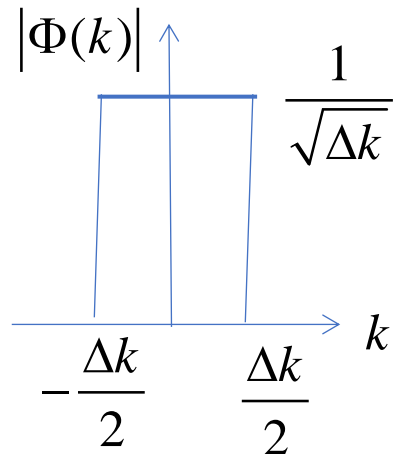
波束の不確定性

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Phi(k) e^{ikx} dk$$

$$\Phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$



例)
$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} \frac{1}{\sqrt{\Delta k}} e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta k}} \left[\frac{e^{ikx}}{ix} \right]_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} = \sqrt{\frac{\Delta k}{2\pi}} \frac{\sin\left(\frac{\Delta kx}{2}\right)}{\left(\frac{\Delta kx}{2}\right)}$$



$$\frac{\Delta x}{2} = \frac{2\pi}{\Delta k} \rightarrow \frac{\Delta x}{2} \frac{\Delta k}{2} = \pi$$

不確定性：

$$\Delta x \cdot \Delta k \sim 4\pi \rightarrow \Delta x \cdot \Delta p \sim 4\pi\hbar$$

正確には

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

正確には：

波束の変形と時間進化

- 波束の変形：

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \Phi(k) e^{ikx} e^{-i\omega(k)t}, \quad \omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k_0} + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 \left. \frac{d^2\omega(k)}{dk^2} \right|_{k_0}$$

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{d\hbar\omega}{d\hbar k} = \frac{dE}{dP} = \frac{P}{m} = \frac{\hbar k}{m}, \quad \frac{d^2\omega}{dk^2} = \frac{\hbar}{m} \quad \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m} (k - k_0)^2$$

形が変わらない時間の範囲： $\frac{1}{2} (k - k_0)^2 \frac{\hbar}{m} |t| \ll 1 \rightarrow (\Delta k)^2 \frac{\hbar}{m} |t| \ll 1 \rightarrow \boxed{\frac{(\Delta P)^2 |t|}{\hbar m} \ll 1}$

- 時間進化：

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \Phi(k) e^{ikx} \quad \text{at } t=0 \rightarrow \Phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \Psi(x,0) e^{-ikx}$$

$$\boxed{\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \Phi(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}} \rightarrow i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right) \Psi(x,t), \quad \boxed{\text{if } \hbar\omega(k) = \frac{(k\hbar)^2}{2m} + V}$$

フーリエ変換の復習と解釈

フーリエ変換： $\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \Phi(k) e^{ikx}, \quad \Phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \Psi(x) e^{-ikx}$

・デルタ関数：

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk e^{ikx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx' \Psi(x') e^{-ikx'} = \int dx' \Psi(x') \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(x-x')}$$

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(x-x')} \rightarrow \Psi(x) = \int dx' \Psi(x') \delta(x-x') \quad \delta(-x) = \delta(x), \quad \delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$$

・パーセバルの定理：

$$\begin{aligned} \int dx \Psi^*(x) \Psi(x) &= \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \Phi^*(k) e^{-ikx} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk' \Phi(k') e^{ik'x} = \int dk \Phi^*(k) \int dk' \Phi(k') \frac{1}{2\pi} \int dx e^{i(k'-k)x} \\ &= \int dk \Phi^*(k) \int dk' \Phi(k') \delta(k'-k) = \int dk \Phi^*(k) \Phi(k) \end{aligned}$$

$$\int dx |\Psi(x)|^2 = \int dk |\Phi(k)|^2$$

- ・運動量空間

波数を運動量に変換する： $P = \hbar k$, $dk = \frac{dP}{\hbar}$, $\Phi(k) = \tilde{\Phi}(P)$

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \Phi(k) e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{dP}{\hbar} \tilde{\Phi}(P) e^{iPx/\hbar}, \quad \tilde{\Phi}(P) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \Psi(x) e^{-iPx/\hbar}$$

さらに $\tilde{\Phi}(P) = \Phi_P(P) \sqrt{\hbar} \rightarrow \Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dP \Phi_P(P) e^{iPx/\hbar}, \quad \Phi_P(P) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \Psi(x) e^{-iPx/\hbar}$

パーセバルの定理： $\int dx |\Psi(x)|^2 = \int dP |\Phi_P(P)|^2$ $dP |\Phi_P(P)|^2$: $[P, P+dp]$ での粒子の存在確率を表す.

- ・3次元の場合：

$$\delta^3(\vec{x} - \vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}$$

$$\Psi(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3\vec{P} \Phi_P(\vec{P}) e^{i\vec{P} \cdot \vec{x}/\hbar}, \quad \Phi_P(\vec{P}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3\vec{x} \Psi(\vec{x}) e^{-i\vec{P} \cdot \vec{x}/\hbar}; \quad \int d^3\vec{x} |\Psi(\vec{x})|^2 = \int d^3\vec{P} |\Phi_P(\vec{P})|^2$$

演算子の期待値

粒子が $(x, x+dx)$ にある確率 $:\langle x \rangle = \int x \Psi^*(x) \Psi(x) dx$

粒子の運動量が $(P, P+dP)$ にある確率 $:\langle \hat{P} \rangle = \int P \Psi^*(P) \Psi(P) dP$

$$\begin{aligned}\langle \hat{P} \rangle &= \int P \Phi_P^*(P) \Psi_P(P) dP = \int \hbar k dP \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{iPx'}{\hbar}} \Psi^*(x') \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{iPx}{\hbar}} \Psi(x) \\&= \int dP \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{iPx'}{\hbar}} \Psi^*(x') \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{iPx}{\hbar}} \Psi(x) = \int dP \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{iPx'}{\hbar}} \Psi^*(x') \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{iPx}{\hbar}} \right) \Psi(x) \\&= \int dP \int \frac{dx'}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{iPx'}{\hbar}} \Psi^*(x') \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{iPx}{\hbar}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \right) = \int dx' \Psi^*(x') \int dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \right) \frac{1}{2\pi\hbar} \int dP e^{\frac{iP(x'-x)}{\hbar}} \\&= \int dx' \Psi^*(x') \int dx \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) \right) \delta(x'-x) = \int dx \Psi^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x) = \int dx \Psi^*(x) \hat{P} \Psi(x)\end{aligned}$$

$$\langle \hat{P} \rangle = \int dx \Psi^*(x) \hat{P} \Psi(x)$$

一般に任意の演算子 \hat{Q} に対して

$$\langle \hat{Q} \rangle = \int dx \Psi^*(x) \hat{Q} \Psi(x)$$

例：運動エネルギー演算子(kinematic operator)

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

・運動量空間で考えると

$$\langle \hat{T} \rangle = \int dP \Psi_P^*(P, t) \frac{P^2}{2m} \Psi_P(P, t) = \int dP \frac{P^2}{2m} |\Psi_P(P, t)|^2$$

・座標空間で考えると

$$\langle \hat{T} \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) \hat{T} \Psi(x, t) = \int dx \Psi^*(x, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi(x, t) = \int dx \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x}$$

演算子の時間進化

$$\frac{d\langle\hat{Q}\rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int dx \psi^* \hat{Q} \psi = \int dx \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{Q} \psi + \psi^* \hat{Q} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) = \int dx \left(\frac{i}{\hbar} (\hat{H} \psi)^* \hat{Q} \psi - \frac{i}{\hbar} \psi^* \hat{Q} \hat{H} \psi \right)$$

$$i\hbar \frac{d\langle\hat{Q}\rangle}{dt} = \int dx \left(\psi^* \hat{Q} \hat{H} \psi - (\hat{H} \psi)^* \hat{Q} \psi \right) = \int dx \left(\psi^* \hat{Q} \hat{H} \psi - \psi^* \hat{H} \hat{Q} \psi \right) = \int dx \psi^* (\hat{Q} \hat{H} - \hat{H} \hat{Q}) \psi$$

$$[\hat{Q}, \hat{H}] = \hat{Q} \hat{H} - \hat{H} \hat{Q}$$

$$i\hbar \frac{d\langle\hat{Q}\rangle}{dt} = \langle [\hat{Q}, \hat{H}] \rangle$$

物理量がハミルトン演算子と可換であれば、その物理量の平均値は時間変化しない

オブザーバブル(観測可能な物理量)とハミルトニアン

すべての演算子には固有値があり，固有値が物理量の期待値

エルミート演算子 \hat{Q} : $\int dx \Psi_1^* \hat{Q} \Psi_2 = \int dx (\hat{Q} \Psi_1)^* \Psi_2$

内積: $(\Psi_1, \Psi_2) = \int dx \Psi_1^* \Psi_2$; $(a \Psi_1, \Psi_2) = a^* (\Psi_1, \Psi_2)$, $(\Psi_1, a \Psi_2) = a (\Psi_1, \Psi_2)$

エルミート演算子 \hat{Q} の ψ での期待値:

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} \rangle_\Psi &= \int dx \Psi^* \hat{Q} \Psi = \int dx (\hat{Q} \Psi)^* \Psi \\ &= (\Psi, \hat{Q} \Psi) = (\hat{Q} \Psi, \Psi) \end{aligned}$$

性質1: $\langle \hat{Q} \rangle_\Psi = \text{実数}$, $\therefore \left(\langle \hat{Q} \rangle_\Psi \right)^* = \int dx \Psi (\hat{Q} \Psi)^* = \int dx (\hat{Q} \Psi)^* \Psi = \int dx \Psi^* \hat{Q} \Psi = \langle \hat{Q} \rangle_\Psi$

性質2: \hat{Q} の固有値 q は実数, $\therefore \langle \hat{Q} \rangle_\Psi = \int dx \Psi^* \hat{Q} \Psi = q \int dx \Psi^* \Psi = q \int dx |\Psi|^2$

固有状態が正規化されていれば $\langle \hat{Q} \rangle_\Psi = q$

ハミルトニアン固有値→スペクトル理論

ハミルトン演算子 \hat{Q} の固有関数と固有値： $\hat{Q}\Psi_1=q_1\Psi_1$, $\hat{Q}\Psi_1=q_1\Psi_1$, $\hat{Q}\Psi_2=q_2\Psi_2, \dots$

性質3 固有関数は正規直交性を満たすように構成できる： $\int dx \Psi_i^* \Psi_j = \delta_{ij}$

$$\begin{aligned} \because q_i \text{ は実数なので, } q_i \neq q_j &\rightarrow \int dx \Psi_i^* \hat{Q} \Psi_j = q_j \int dx \Psi_i^* \Psi_j, \int dx (\hat{Q} \Psi_i)^* \Psi_j = q_i \int dx \Psi_i^* \Psi_j \\ &\rightarrow (q_j - q_i) \int dx \Psi_i^* \Psi_j = 0 \end{aligned}$$

演算子 \hat{Q} の固有関数が基底関数となって、任意の Ψ を固有関数の重ね合わせとして記述できる：

$$\Psi(x, t) = \alpha_1(t) \Psi_1(x) + \alpha_2(t) \Psi_2(x) + \dots = \sum_i \alpha_i(t) \Psi_i(x), \quad \alpha_i(t) = (\Psi_i, \Psi) = \int dx \Psi_i^*(x) \Psi(x, t)$$

$$\because \int dx \Psi_i^*(x) \Psi(x, t) = \int dx \Psi_i^*(x) \sum_j \alpha_j(t) \Psi_j(x) = \sum_j \alpha_j \int dx \Psi_i^*(x) \Psi_j(x) = \sum_j \alpha_j \delta_{ij} = \alpha_i$$

$$\int dx |\Psi|^2 = \int dx \left(\sum_i \alpha_i \Psi_i \right)^* \left(\sum_j \alpha_j \Psi_j \right) = \sum_i \sum_j \alpha_i^* \alpha_j \int dx \Psi_i^* \Psi_j = \sum_i \sum_j \alpha_i^* \alpha_j \delta_{ij} = \sum_i |\alpha_i|^2 = 1$$

測定： 状態 Ψ_i において演算子 \hat{Q} を測定すると，固有値 q_i になる．

q_i を測定する確率 P_i は $P_i = |\alpha_i|^2 = |(\Psi_i, \Psi)|^2$ である．測定する q_i を測定する系の状態は $\Psi = \Psi_i$ となる（波動関数の消滅）．

$$\begin{aligned} \text{例： } \Psi = \sum_i \alpha_i \Psi_i &\rightarrow \langle \hat{Q} \rangle_\Psi = \int dx \left(\sum_i \alpha_i \Psi_i \right)^* \hat{Q} \left(\sum_j \alpha_j \Psi_j \right) = \sum_i \sum_j \alpha_i^* \alpha_j \int dx \Psi_i^* \hat{Q} \Psi_j \\ &= \sum_i \sum_j \alpha_i^* \alpha_j q_j \int dx \Psi_i^* \Psi_j = \sum_i \sum_j \alpha_i^* \alpha_j q_j \delta_{ij} = \sum_i |\alpha_i|^2 q_i \end{aligned}$$

$$\text{例： サークル } x \in [0, L] \text{ 上の粒 } \Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \sin \frac{2\pi x}{L} + \sqrt{\frac{2}{3}} \cos \frac{6\pi x}{L} \right)$$

サークルとは，円と同様な両端連結領域

$$\Psi_m(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} e^{i \frac{2\pi m x}{L}} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi_m = \frac{\hbar 2\pi m}{L} \Psi_m \rightarrow P_m = \frac{\hbar 2\pi m}{L}$$

$$\therefore \Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{e^{i \frac{2\pi x}{L}} - e^{-i \frac{2\pi x}{L}}}{2i} + \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{e^{i \frac{6\pi x}{L}} + e^{-i \frac{6\pi x}{L}}}{2} \right)$$

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \frac{e^{i\frac{2\pi x}{L}} - e^{i\frac{-2\pi x}{L}}}{2i} + \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{e^{i\frac{6\pi x}{L}} + e^{i\frac{-6\pi x}{L}}}{2} \right) = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{2i} \Psi_1 - \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{2i} \Psi_{-1} + \frac{1}{\sqrt{3}} \Psi_3 + \frac{1}{\sqrt{3}} \Psi_{-3}$$

M	P の値	確率
1	$2\pi \hbar/L$	$\left +\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{2i} \right ^2 = \frac{1}{6}$
-1	$-2\pi \hbar/L$	$\left -\sqrt{\frac{2}{3}} \frac{1}{2i} \right ^2 = \frac{1}{6}$
3	$6\pi \hbar/L$	$\left +\frac{1}{\sqrt{3}} \right ^2 = \frac{1}{3}$
-3	$-6\pi \hbar/L$	$\left -\frac{1}{\sqrt{3}} \right ^2 = \frac{1}{3}$

$$\overline{(\Delta Q)^2} = \sum_i P_i (Q_i - \bar{Q})^2 = \sum_i P_i Q_i^2 - 2 \sum_i P_i Q_i \bar{Q} + \sum_i P_i \bar{Q}^2 = \sum_i P_i Q_i^2 - 2 \bar{Q}^2 + \bar{Q}^2 = \overline{Q^2} - \bar{Q}^2 \geq 0$$

性質1 $\overline{(\Delta Q)^2}_\Psi = \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle$

性質1 $\overline{(\Delta Q)^2}_\Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left| (Q - \hat{Q}) \Psi \right|^2$

量子力学から古典力学へ（エーレンフェストの定理）

ポテンシャル V の下での粒子の運動の状態を表す波動関数を ψ とするとき、ニュートンの運動方程式によく似た次式が成り立つ：

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle, \text{ where } \langle x \rangle = \int \psi^* x \psi dx, \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = \int \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi dx$$

以下のように証明される． まず， ψ が無限遠で0になることを用いると

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} &= \frac{d^2}{dt^2} \int \psi^* x \psi dx = \frac{d}{dt} \int \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} x \psi + \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{d}{dt} \int \left[- \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi^* x \psi + \psi^* x \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi \right] dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \frac{d}{dt} \int \left[- \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) x \psi + \psi^* x \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) \right] dx = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{d}{dt} \int \left[\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x \psi + \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] dx \end{aligned}$$

さらに

$$\int \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x \psi dx = - \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial x \psi}{\partial x} dx = \int \psi^* \frac{\partial^2 x \psi}{\partial x^2} dx = \int \left[2\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] dx$$

となる．これを用いると

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = -i\hbar \frac{d}{dt} \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = -i\hbar \frac{d}{dt} \left[\int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right] dx$$

となる．再度，シュレディンガーの方程式を用いると，同様にして

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = - \int \psi^* \frac{\partial V}{\partial x} \psi dx$$

を得る．右辺は $\langle \partial V / \partial x \rangle$ に他ならないので $m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$ QED

離散系のシュレディンガー方程式

古典力学では，有限自由度の系である多重振子の振動は，有限自由度の離散系の問題になる．

連続体である弦や棒の振動などは，加算無限自由度の連続系の振動問題であるが，モード関数で展開することにより，離散系の問題に変換できる．

量子力学でも連続系のシュレディンガー方程式を，離散系の問題に書き直すことが可能である．

例えば，原子の中の電子の状態など自由度が限られた有限自由度の問題は，離散系シュレディンガー方程式に適した問題である．

古典力学系の状態遷移

弦の振動： $\rho \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = T \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0 \quad \eta(0, t) = \eta(l, t) = 0, \quad t > 0$

固有振動： $\eta(x, t) = Y(x)e^{i\omega t} \rightarrow \frac{d^2 Y}{dx^2} = -\frac{\rho}{T} \omega^2 Y \rightarrow Y_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi}{l} x\right), \quad \omega_n^2 = \frac{T}{\rho} \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$

正規直交系： $\int_0^l Y_m(x) Y_n(x) dx = \delta_{mn}$

固有関数展開： $\eta(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(t) Y_n(x), \quad A_n(t) = \int_0^l \eta(x, t) Y_n(x) dx$

離散運動方程式： $\rho \frac{d^2 A_n}{dt^2} = -\rho \omega_n^2 A_n, \quad n = 1, 2, \dots$

$|n\rangle = Y_n(x), \quad |\psi\rangle = A_1 |1\rangle + A_2 |2\rangle + \dots,$

$\rho \frac{d^2 |\psi\rangle}{dt^2} = -H |\psi\rangle$ ここで $|\psi\rangle = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_N \end{bmatrix}, \quad H = \begin{bmatrix} \rho\omega_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \rho\omega_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \rho\omega_N^2 \end{bmatrix}$


シュレディンガー方程式： $i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) |\psi\rangle = H |\psi\rangle, \quad |\psi\rangle: \text{波動関数}$

変数分離： $|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = f(t)\phi(\mathbf{r}) \rightarrow i\hbar \frac{df(t)}{dt} \phi(\mathbf{r}) = f(t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \right)$

H が時間で
変化しないと
すると

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\phi(\mathbf{r})} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \right) = E$$

E_n : 固有値 $|n\rangle$: 正規化された固有関数, $H |n\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \phi_n(\mathbf{r}) = E_n |n\rangle$

$|\psi\rangle$ の基底による展開をシュレディンガー方程式に代入すると 

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle + \dots + c_{N-1} |N-1\rangle \rightarrow \boxed{\frac{dc_n}{dt} = \frac{-iE_n}{\hbar} c_n \rightarrow c_n = c_{n0} \exp\left(\frac{-iE_n}{\hbar} t\right) \rightarrow |c_n|^2 = |c_{n0}|^2}$$

$$\| |\psi\rangle \|^2 = (|\psi\rangle)^\dagger |\psi\rangle = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n=0}^{N-1} |c_n|^2 = \sum_{n=0}^{N-1} |c_{n0}|^2 = 1 \quad \text{同じ確率であり続ける, 各成分の確率不変}$$

離散的なシュレディンガー方程式：

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = H |\psi\rangle, \quad H: N \times N \text{の行列}$$

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle + \cdots + c_{N-1} |N-1\rangle$$



$$\frac{dc_n}{dt} = \frac{-iE_n}{\hbar} c_n(t) \rightarrow c_n(t) = c_{n0} \exp\left(\frac{-iE_n}{\hbar} t\right)$$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \frac{dc_0}{dt} \\ \frac{dc_1}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dc_{N-1}}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cdots & 0 & \cdots & E_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix}$$

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

$$||\psi\rangle|^2 = (|\psi\rangle)^\dagger |\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

$$= \sum_{n=0}^{N-1} |c_n(t)|^2 = \sum_{n=0}^{N-1} |c_{n0}(t)|^2 = 1$$

H が時間の関数でないとき

- ・ ある初期状態から始まった状態は、同じ確率であり続ける、
- ・ 各成分および全体の確率不変



H を時間の関数にして強制的に確率を変化させる． ：アニーリング

$$H = (1-t/\tau)H_A + (t/\tau)H_B$$

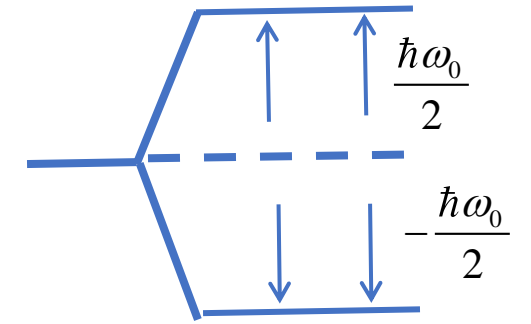
2準位原子の問題

出典：中山 茂，量子アルゴリズム，技報堂出版，第1版，(2014)，p.94

シュレディンガー方程式：
$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}\psi(t)$$

状態 $|0\rangle$ と状態 $|1\rangle$ と2準位を持った原子系を考える：

$$|\psi(t)\rangle = a(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$



エネルギー準位

2準位原子のハミルトニアン：
$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\omega_0}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar\omega_0}{2} \end{pmatrix}$$

レーザーによる操作

角周波数 ω のレーザー光と原子の相互作用（レーザー光強度と遷移確率に依存）の強さを Ω とする．このときのハミルトニアンは

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\omega_0}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar\omega_0}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\hbar\Omega}{2}e^{i\omega t} \\ -\frac{\hbar\Omega}{2}e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\omega_0}{2} & -\frac{\hbar\Omega}{2}e^{i\omega t} \\ -\frac{\hbar\Omega}{2}e^{-i\omega t} & \frac{\hbar\omega_0}{2} \end{pmatrix}$$

成分に関する微分方程式：

$$i\hbar \begin{pmatrix} \frac{da(t)}{dt} \\ \frac{db(t)}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar\omega_0}{2} & -\frac{\hbar\Omega}{2}e^{i\omega t} \\ -\frac{\hbar\Omega}{2}e^{-i\omega t} & \frac{\hbar\omega_0}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$$

変数変換：

$$\begin{cases} a(t) = a'(t)e^{i\frac{\omega}{2}t} \\ b(t) = b'(t)e^{-i\frac{\omega}{2}t} \end{cases} \begin{cases} \dot{a}'(t) = \frac{i}{2}[(\omega_0 - \omega) + \Omega b'(t)] \\ \dot{b}'(t) = \frac{i}{2}[-(\omega_0 - \omega) + \Omega a'(t)] \end{cases}$$

2準位間のエネルギーと光のエネルギーが同じ, すなわち $\hbar\omega_0 = \hbar\omega$ とする
と

$$\begin{cases} \dot{a}'(t) = i\frac{\Omega}{2}b'(t) \\ \dot{b}'(t) = i\frac{\Omega}{2}a'(t) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} \ddot{a}'(t) = -\frac{\Omega^2}{4}a'(t) \\ \ddot{b}'(t) = -\frac{\Omega^2}{4}b'(t) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} a'(t) = a'(0)\cos\frac{\Omega}{2}t + ib'(0)\sin\frac{\Omega}{2}t \\ b'(t) = b'(0)\cos\frac{\Omega}{2}t + ia'(0)\sin\frac{\Omega}{2}t \end{cases}$$

変数を元に戻すと

$$|\psi(t)\rangle = \left[a(0)\cos\frac{\Omega}{2}t + ib(0)\sin\frac{\Omega}{2}t \right] e^{-i\frac{\omega_0}{2}t} |0\rangle + \left[b(0)\cos\frac{\Omega}{2}t + ia(0)\sin\frac{\Omega}{2}t \right] e^{i\frac{\omega_0}{2}t} |1\rangle$$

グローバルな指数関数の位相を無視すると

$$|\psi(t)\rangle = \left[a(0)\cos\frac{\Omega}{2}t + ib(0)\sin\frac{\Omega}{2}t \right] |0\rangle + \left[b(0)\cos\frac{\Omega}{2}t + ia(0)\sin\frac{\Omega}{2}t \right] |1\rangle$$

光をあてる時間や位相を変えると, $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の任意の重ね合わせが可能.

ラビ振動

原子の初期状態として、基底状態 $|0\rangle$ にあるとすると、 $a(0) = 1$, $b(0) = 0$ である。光を原子に当て続けると、時刻 t の原子の状態は

$$\text{状態: } |\psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)|1\rangle \rightarrow \text{確率; } \begin{cases} |a(t)|^2 = \left|\cos\left(\frac{\Omega}{2}t\right)\right|^2 \\ |b(t)|^2 = \left|\sin\left(\frac{\Omega}{2}t\right)\right|^2 \end{cases}$$

すなわち、共鳴項を当て続けると、状態 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の間で確率が振動する（ラビ振動）... イオントラップの原理？

ボーアとアインシュタインの論争

量子力学を巡るアインシュタインとボーアの戦い，その真の勝者は・・・【山椒読書論（301）】

出典： <https://enokidoblog.net/sanshou/2013/11/9927>

『量子革命——アインシュタインとボーア，偉大なる頭脳の激突』（マンジット・クマール著，青木薫訳，新潮社）は，量子力学に関心を抱いている者たちを知的興奮の坩堝に放り込む．

アインシュタインは1926年12月のボルン宛ての手紙に、「量子力学はたしかに立派な理論です。しかしわたしの内なる声が、まだ本物ではないと告げています。その理論は多くを語りますが、わたしたちを本当の意味で、『神』の秘密に近づけてはくれません。いずれにせよわたしは、神はサイコロを振らないと確信しています」と記した。「かくして戦線は敷かれ、アインシュタインは心ならずも、驚くべき大躍進にヒントを与えることになる。量子の歴史のなかでもっとも重要な進展のひとつ、（ボーアの優秀な弟子・ハイゼンベルクが発見した）不確定性原理である」。後に、ボーアがこのように語っている。「アインシュタインの懸念と批判はわれわれ全員にとって、原子レベルの現象を記述することに関するさまざまな面を再検討するためのインセンティブとして非常に貴重だった」。すなわち、ボーアらの量子力学はアインシュタインの批判によって鍛え上げられていったのである。

「量子力学の解釈に関するふたりの論争は、突き詰めれば、実在をどう位置づけるかに関する哲学的な信念にかかわっていた。世界は実在するのだろうか？　ボーアは、量子力学は自然に関する完全な基礎理論だと信じ、その上に立って哲学的な世界観を作り上げた。その世界観にもとづき、**ボーア**はこう断言した。『**量子の世界というものはない。あるのは抽象的な量子力学の記述だけである。物理学の仕事は、自然を見出すことだと考えるのは間違いである。物理学は、自然について何が言えるかに関するものである**』。アインシュタインはそれとは別のアプローチを選んだ。彼は、**観測者とは独立した、因果律に従う世界がたしかに実在するという揺るがぬ信念**の上に立って量子力学を評価した。その結果として、彼はコペンハーゲン解釈を受け入れることができなかった。『われわれが科学と呼ぶものの唯一の目的は、存在するものの性質を明らかにすることである』」。

現在では、「量子力学は完全だという主張が本格的に疑問視されるようになって、アインシュタイン＝ボーア論争ではアインシュタインが敗北したという、従来の判定が見直しを受けている」。この部分を読んだ時、私の目から鱗が落ちた。アインシュタインが負けたとばかり思い込んでいたからである。「ボーアとの論争で決定打を出すことはできなかったものの、アインシュタインの挑戦は後々まで余韻を残し、さまざまな思索の引き金となった」。「しだいに多くの物理学者が、量子力学より深い理論を探すようになっていく」。これらの後代の成果を踏まえ、「かつては革命的な考えを次々と打ち出したアインシュタインも、年老いてひびの入った骨董品のようになり、新しい量子力学の考え方についてこられなくなった」といったアインシュタイン像が見直され、名誉回復が進んでいるのである。

第3章 量子計算の理論

2023/08/28

測位技術振興会 (SAPT) 知能・情報・エネルギー分科会
一色 浩

量子計算の理論とは

量子計算の理論：矛盾のない数学的理論

この理論で説明できる実現象がある：量子情報処理

量子力学の特徴

(エントロピー減少による発熱なし…ランダウアー効果)

量子性

線型性

2重性：量子は波であり粒子である

非決定性：重ね合わせ状態

不確定性

遠距離相関可能性：絡み合い

←
複素数の理論と同様



Rubinの壺の一例

ビット表現の違い

・古典的ビット



0

デジタル情報
(確率100%で0となる)



1

デジタル情報
(確率100%で1となる)

・確率的ビット

- 0,1 の重みのみが変えられる

$$P+Q=1 \quad (P, Q \geq 0)$$



0

確率的デジタル情報
(確率 P で0となる)

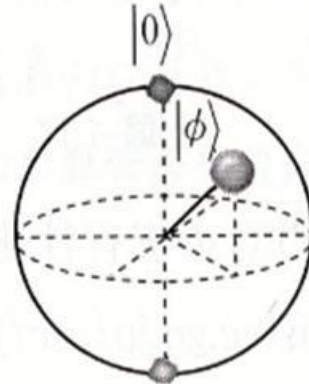
1

確率的デジタル情報
(確率 Q で1となる)

・量子ビット

- 0,1 の重みと位相が変えられる

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$



量子情報
(確率振幅 α で0となる)

量子情報
(確率振幅 β で1となる)

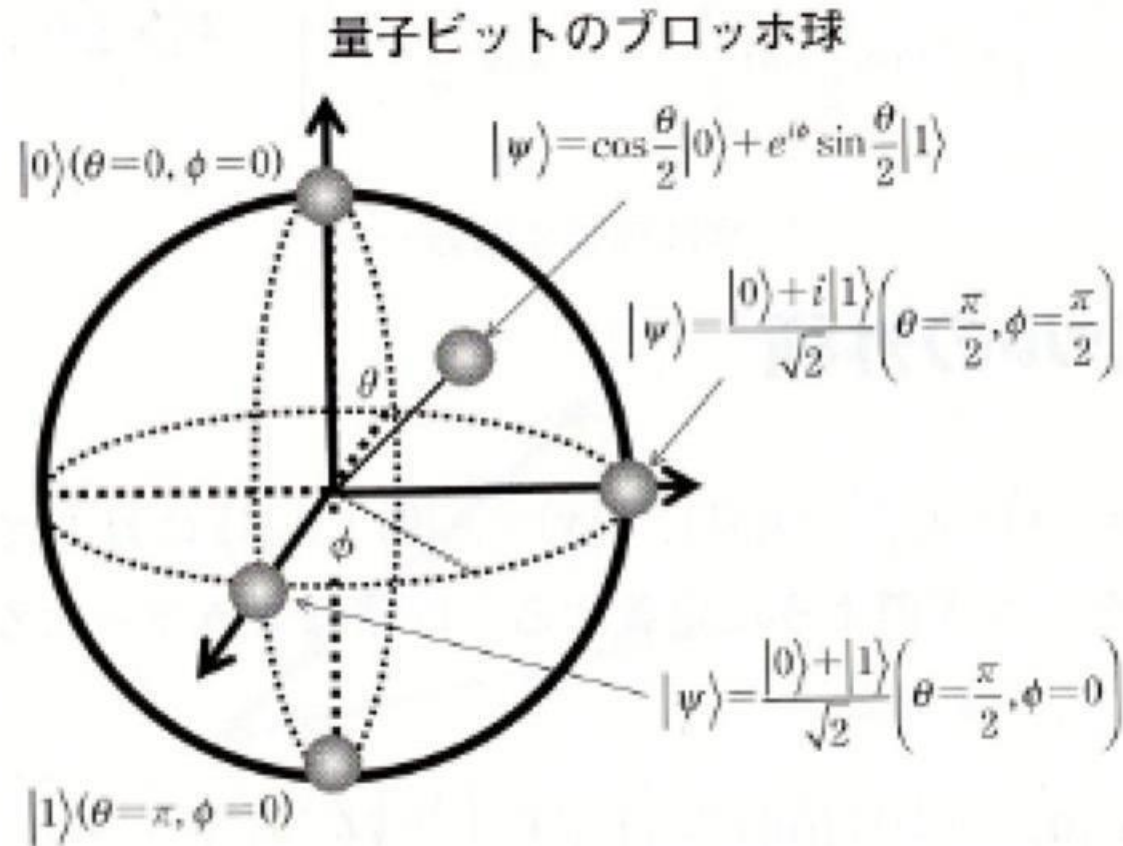
確率ビットは1次元であるが、量子ビットには2次元の表現力がある。

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

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

$$0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi$$

ビット表現の違い



量子ビット $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ のブロッホ球

出典：中山 茂，量子アルゴリズム，技報堂出版，第1版，(2014)，p.57

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

で表される全ての状態は，ブロッホ球面上の点で表される．

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

$$0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi$$

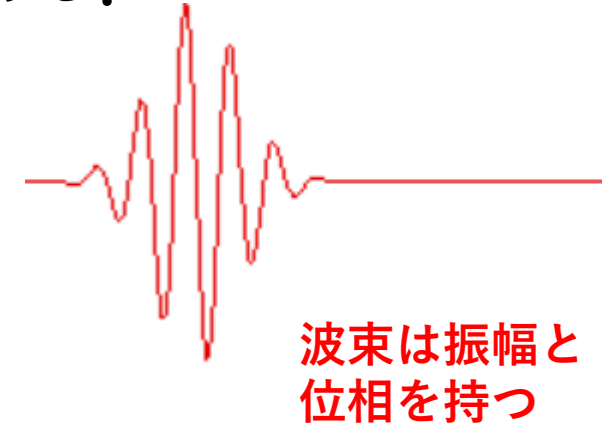
左の図の意味は，球面上の点（まる）：
 $(x, y, z) = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$
 に，状態：

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

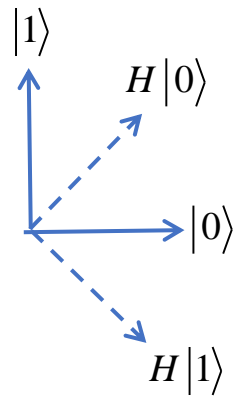
が対応することを意味する．

量子の世界では
大きさ，質量，エネルギーなど単独の物理量に最小値がある。

光子は粒子か波か？
本質は波束で波や粒子はその現象（見え方）



光子の観測値は観測装置に依存する



$$\begin{aligned}
 H|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) && H|0\rangle \text{ を } |0\rangle \text{ と } |1\rangle \text{ を基底とする座標で観測すれば50\%} \\
 &&& \text{の確率で } |0\rangle \text{ または } |1\rangle \text{ を観測する.} \\
 H|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) && H|0\rangle \text{ を } H|0\rangle \text{ と } H|1\rangle \text{ を基底とする座標で観測すれば} \\
 &&& \text{100\%の確率で } H|0\rangle \text{ を観測する.} \\
 |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(H|0\rangle + H|1\rangle) && |0\rangle \text{ を } H|0\rangle \text{ と } H|1\rangle \text{ を基底とする座標で観測すれば50\%} \\
 |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(H|0\rangle - H|1\rangle) && \text{の確率で } H|0\rangle \text{ または } H|1\rangle \text{ を観測する.}
 \end{aligned}$$

見ることができる量子的現象1…ヤングの2重スリット

通常の光（光子の集団）

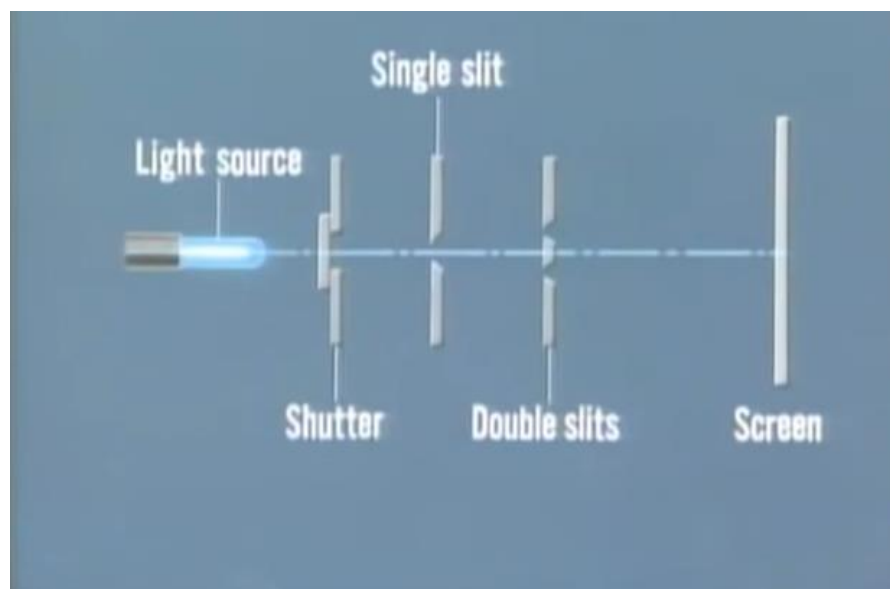
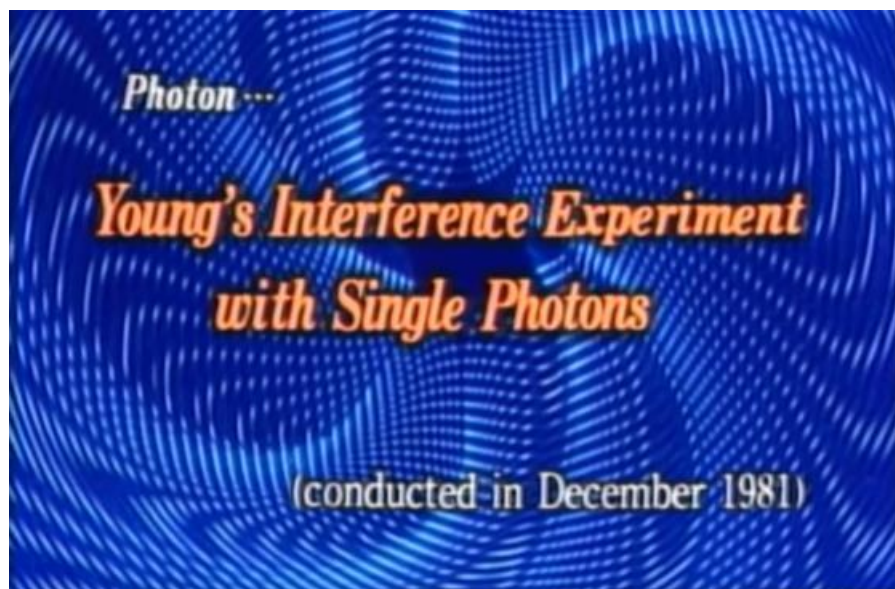
シングルスリット：単なるかたまり（**粒子**）

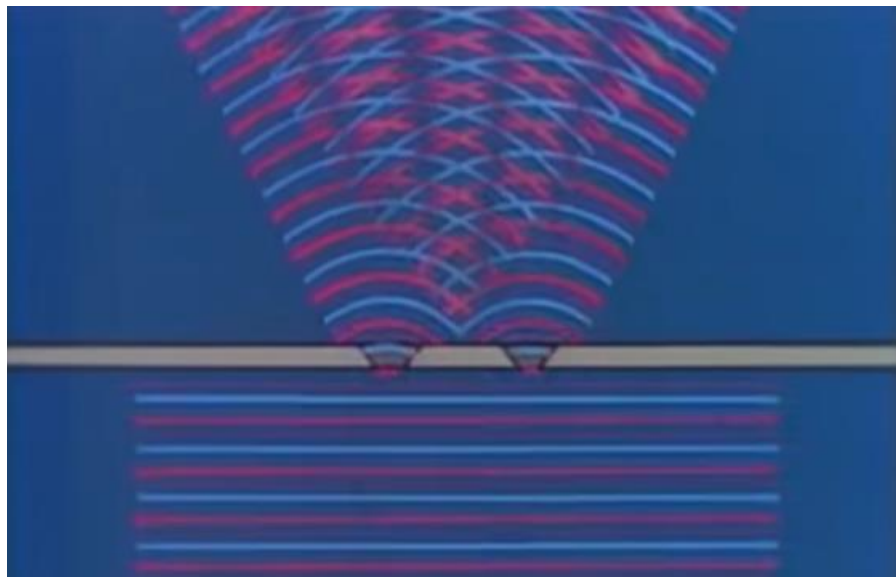
ダブルスリット：干渉縞が現れる（**波**）

単一光子が存在し，通常の光+と同じ性質を示す

単一電子で実験しても干渉像が現れる

出典：浜松ホトニクス <https://www.youtube.com/watch?v=l9Ab8BLW3kA>

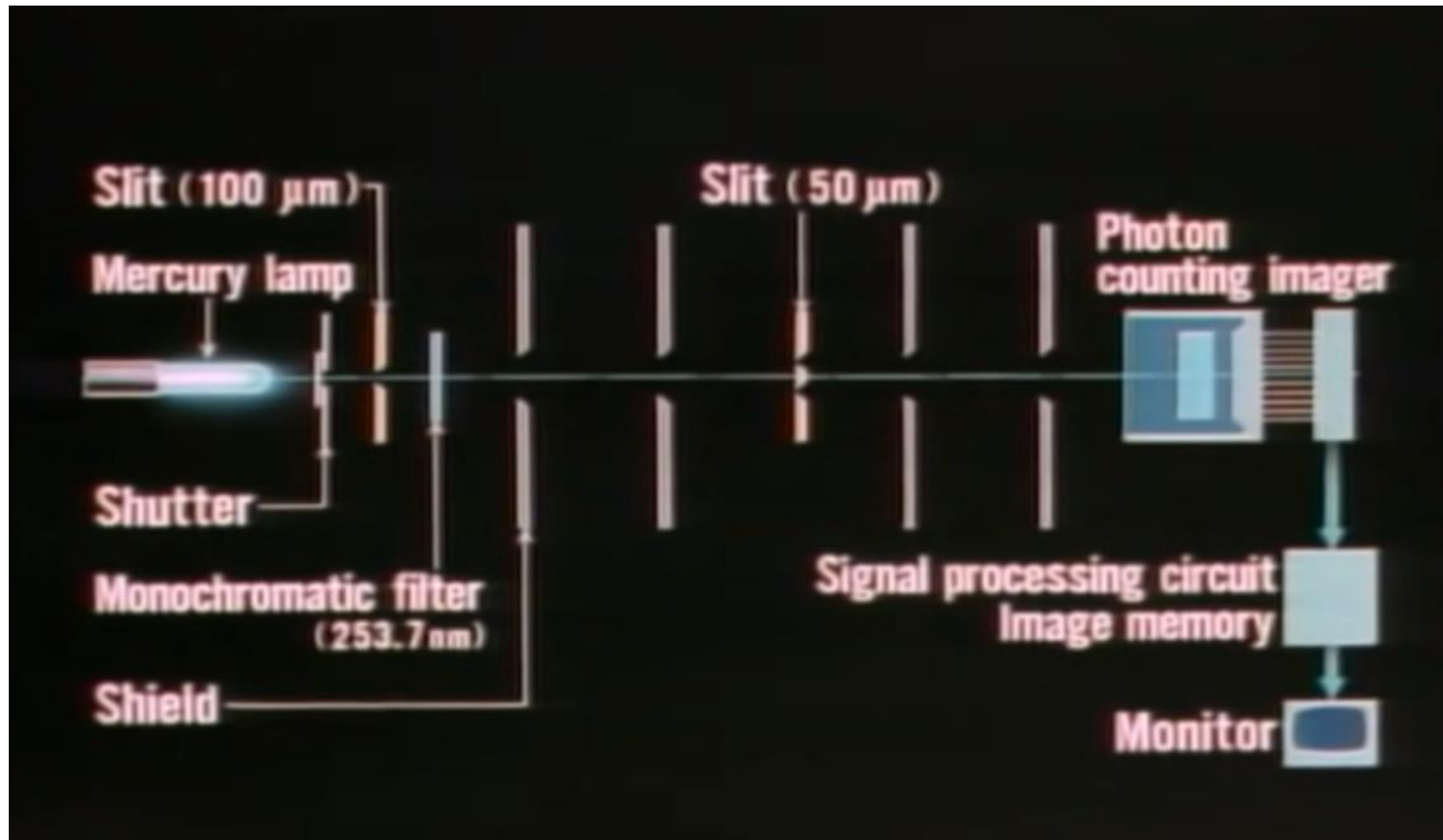




毎秒100個

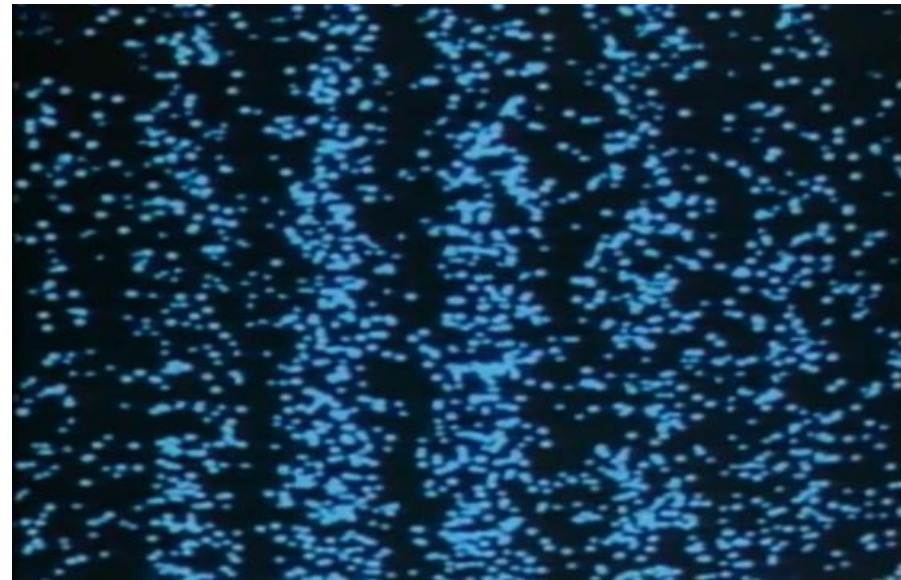
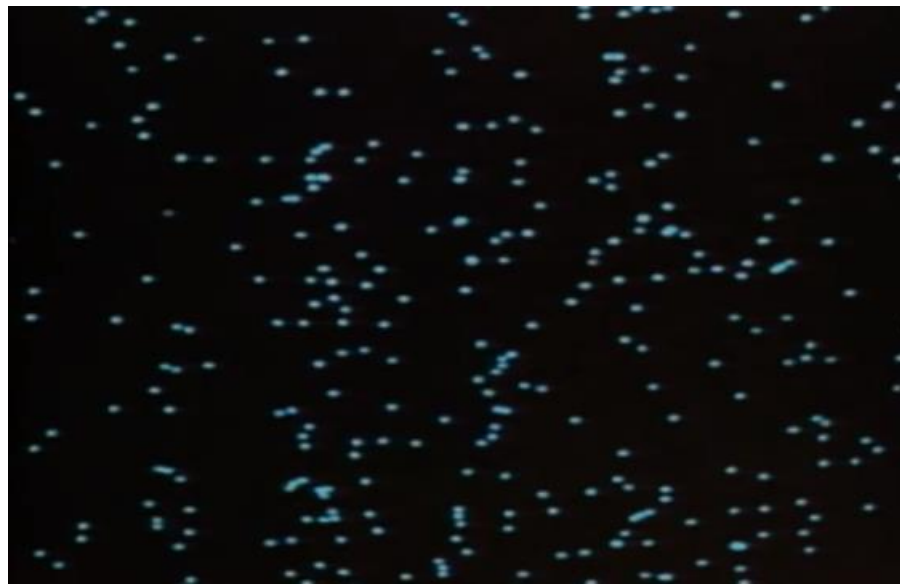


高さが等しい

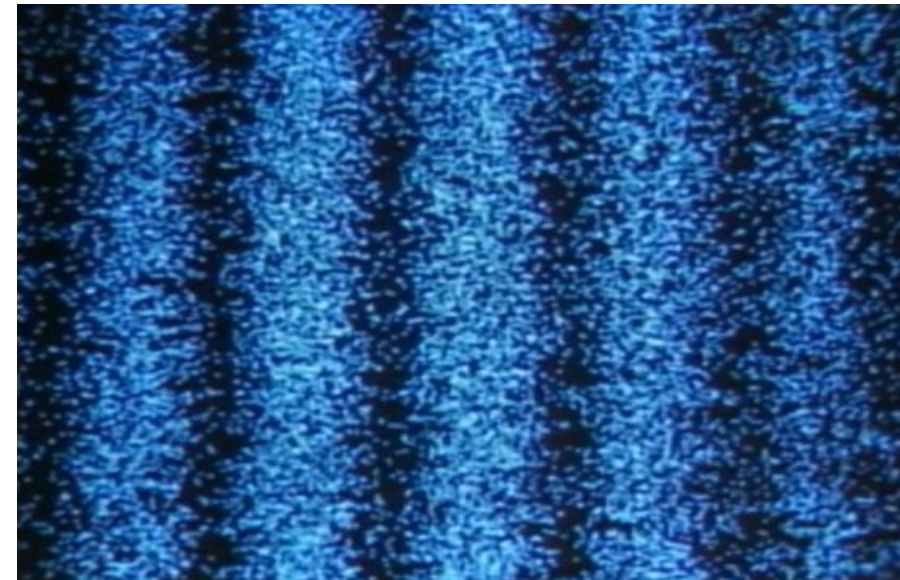




3分後

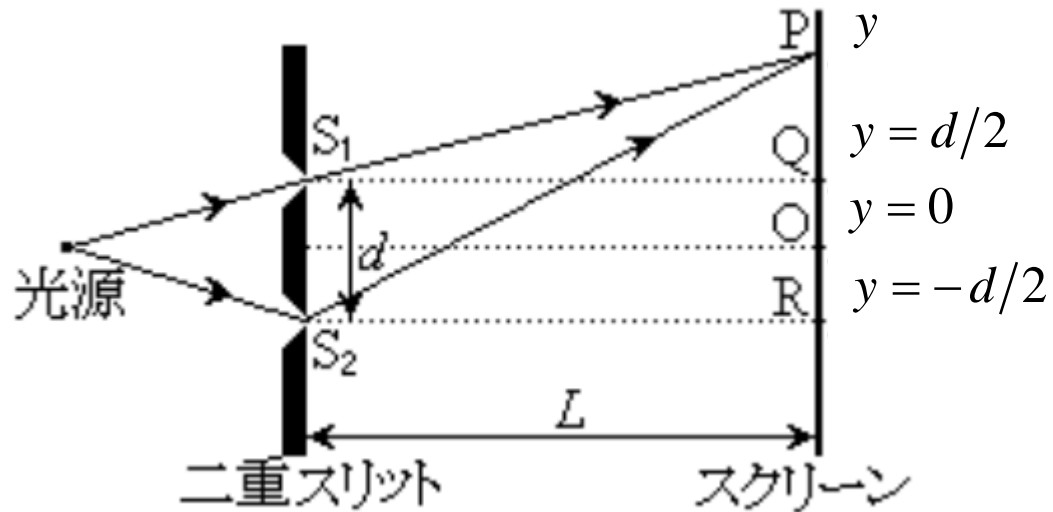


25分後



6時間後

連続波としての干渉



まず
$$PS_1 = \left(L^2 + \left(y - \frac{d}{2} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} = L \left(1 + \left(\frac{y - d/2}{L} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

\$L\$ が大きいとすると
$$PS_1 \approx L \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{y - d/2}{L} \right)^2 \right)$$

同様に考えると
$$PS_2 \approx L \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{y + d/2}{L} \right)^2 \right)$$

経路差 \$\Delta\$ は
$$\Delta = PS_2 - PS_1 \approx L \frac{yd}{L^2} = \frac{yd}{L}$$

経路差が波長 \$\lambda\$ の整数倍になると位相がそろうので強め合う． 故に**明線条件**は

$$\frac{yd}{L} = n\lambda, \quad n = 1, 2, \dots$$

シングルフォトンとしての干渉

シュレディンガー方程式の解 $\psi(x,t) = \exp(i(kx - \omega(k)t))$ の解釈

分散方程式 $\hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$ はエネルギーの式 $E = \frac{P^2}{2m}$ から求めたもの.

$|\Psi(x,t)|^2 = |e^{i(kx - \omega(k)t)}|^2 = 1$ であるので, 無限領域では確率として解釈できない.

確率として解釈できるためには, 全領域での確率が1となるように正規化できることが必要である.

確率解釈を放棄して, 正規化が必要でない粒子数分布の解釈で矛盾しない.

例えば, 連続した光子の流れ (光線) における光子数分布と解釈可能.

連続光子流を単一光子を表す波束が無数に連なっている状態と見做す.

波束で考える.

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \Phi(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}, \quad \Phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \Psi(x, 0) e^{-i(kx - \omega(k)t)}$$

であるので $\Phi(k - k_0) = \delta(k - k_0) \rightarrow \Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)}$

従って, 連続光は波束が連続したものである.

故に, 波束で干渉縞が現れれば, 連続光でも干渉縞が現れる.

波長が僅かに違う波の干渉（うなりと群速度）

確率波 $e^{i(kx-\omega(k)t)}$ は線型なので波束の集まり，すなわち光子の連続状態(連続波)

$$\Psi_1(x,t) = e^{i(kx-\omega(k)t)}, \quad \Psi_2(x,t) = e^{i(kx-\omega(k+\Delta k)t)} = e^{i((k+\Delta k)x-\omega(k+\Delta k)t)} = e^{i((kx-\omega(k)t)} e^{i\left(\Delta kx - \frac{d\omega}{dk}\Delta kt\right)}$$

$$\Psi(x,t) = \Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t) = e^{i(kx-\omega(k)t)} \left(1 + \exp\left(i\left(\Delta kx - \frac{d\omega}{dk}\Delta kt \right) \right) \right)$$

$$\text{単純な和を取ると } |\Psi_1(x,t)|^2 = |\Psi_2(x,t)|^2 = 1 \rightarrow |\Psi_1(x,t)|^2 + |\Psi_2(x,t)|^2 = 2$$

光子の粒子数分布密度は

$$\begin{aligned} |\Psi(x,t)|^2 &= \left| 1 + e^{i\left(\Delta kx - \frac{d\omega}{dk}\Delta kt\right)} \right|^2 = \left(1 + \exp\left(-i\left(\Delta kx - \frac{d\omega}{dk}\Delta kt \right) \right) \right) \left(1 + \exp\left(i\left(\Delta kx - \frac{d\omega}{dk}\Delta kt \right) \right) \right) \\ &= 2 \left(1 + \cos\left(\Delta k \left(x - \frac{d\omega}{dk}t \right) \right) \right) \end{aligned}$$

粒子数分布に干渉が現れる → 光の明るさが周期的に変化し，群速度で移動する

2重スリットの場合にはレイセオリーによる近似を使用

確率波はスリットを波源として、直線的に進む1次元波で近似される。

1スリットを波源とするレイセオリー近似： $\Psi(r,\theta,t) \approx \frac{f(\theta)}{r} e^{i(kr-\omega t)}$

小間隔の2重スリットを波源とするレイセオリー近似：

$$\Psi(r,\theta,t) \approx \frac{f(\theta_1)}{r_1} e^{i(kr_1-\omega t)} + \frac{f(\theta_2)}{r_2} e^{i(kr_2-\omega t)} \approx \frac{f(\theta_0)}{r_0} \left(e^{i(kr_1-\omega t)} + e^{i(kr_2-\omega t)} \right)$$

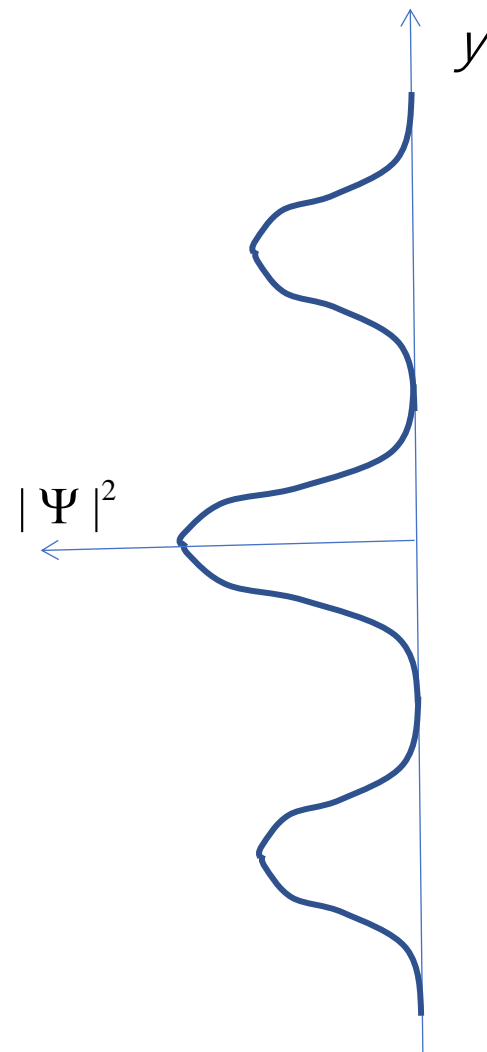
ここで $r_1 = PS_1 \approx L \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{y-d/2}{L} \right)^2 \right)$, $r_2 = PS_2 \approx L \left(1 + \frac{1}{2} \left(\frac{y+d/2}{L} \right)^2 \right)$, $\Delta = r_2 - r_1 = \frac{yd}{L}$

従って、スクリーン上で

$$\Psi(r,\theta,t) \approx \frac{f(\theta_0)}{r_0} \left(e^{i(kr_1-\omega t)} + e^{i(kr_2-\omega t)} \right) \approx \frac{f(\theta_0(y))}{r_0(y)} e^{i(kr_2-\omega t)} \left(1 + e^{i k \frac{yd}{L}} \right)$$

故にスクリーン上の光子の粒子数分布密度は

$$\begin{aligned} |\Psi(r, \theta, t)|^2 &\approx \frac{f^2(\theta_0(y))}{r_0^2(y)} \left(1 + e^{-i k \frac{y d}{L}} \right) \left(1 + e^{i k \frac{y d}{L}} \right) \\ &= \frac{f^2(\theta_0(y))}{r_0^2(y)} \left(2 + e^{-i k \frac{y d}{L}} + e^{i k \frac{y d}{L}} \right) \\ &= 2 \frac{f^2(\theta_0(y))}{r_0^2(y)} \left(1 + \cos \left(k \frac{y d}{L} \right) \right) \\ &= 2 \frac{f^2(\theta_0(y))}{r_0^2(y)} \cos^2 \left(\frac{1}{2} k \frac{y d}{L} \right) \end{aligned}$$

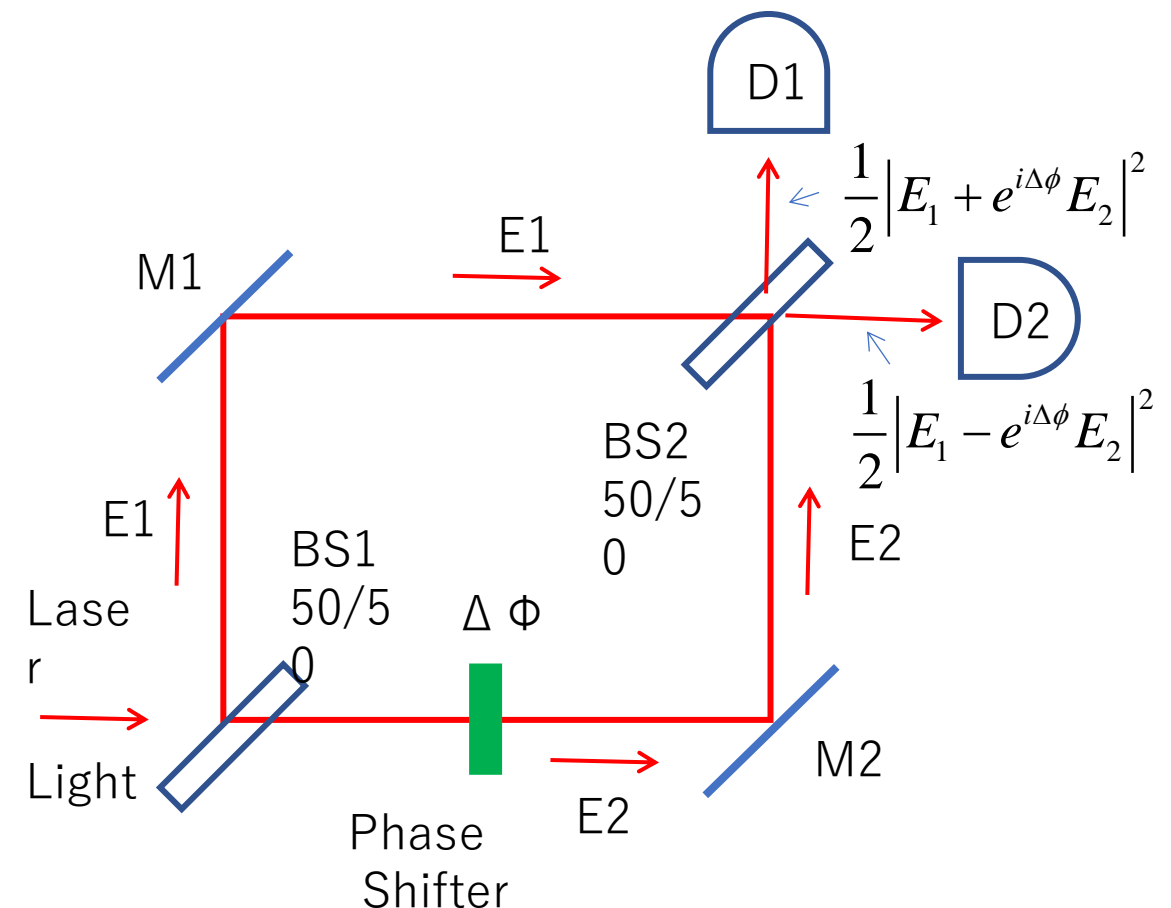
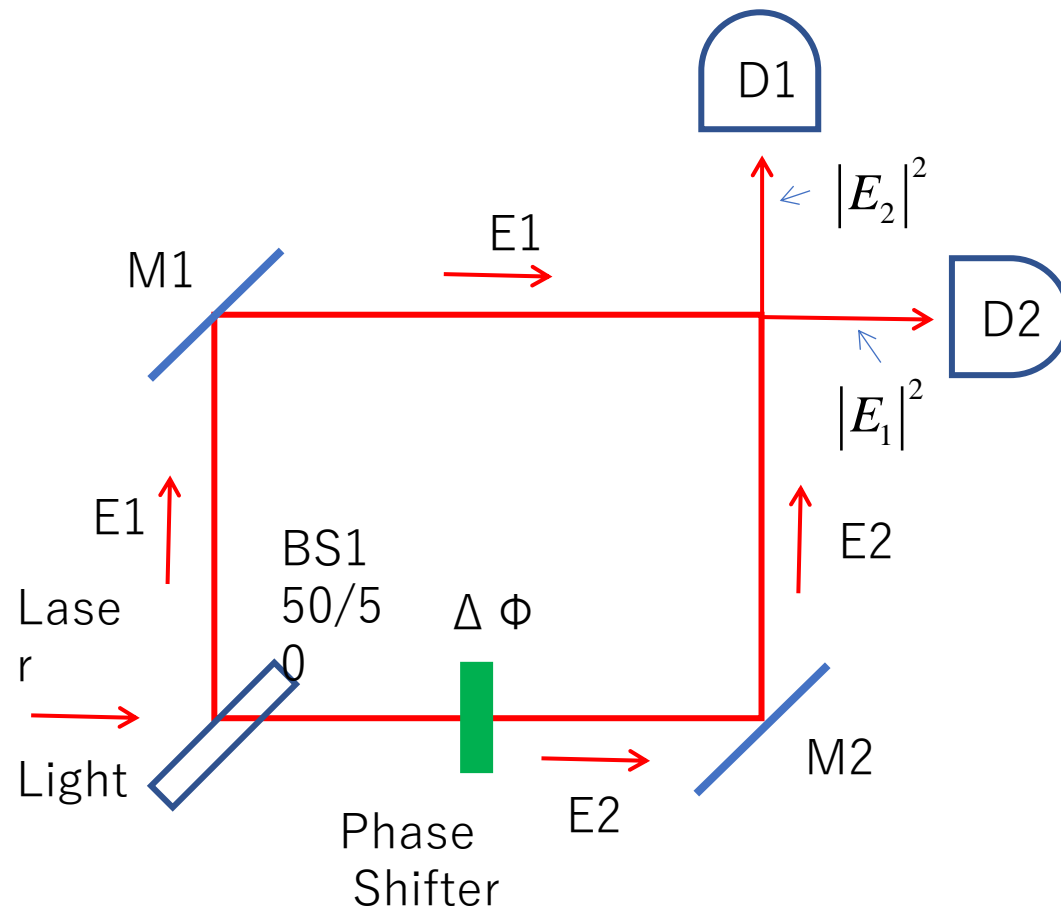


光子の粒子数分布密度は光子数（明るさ）に比例

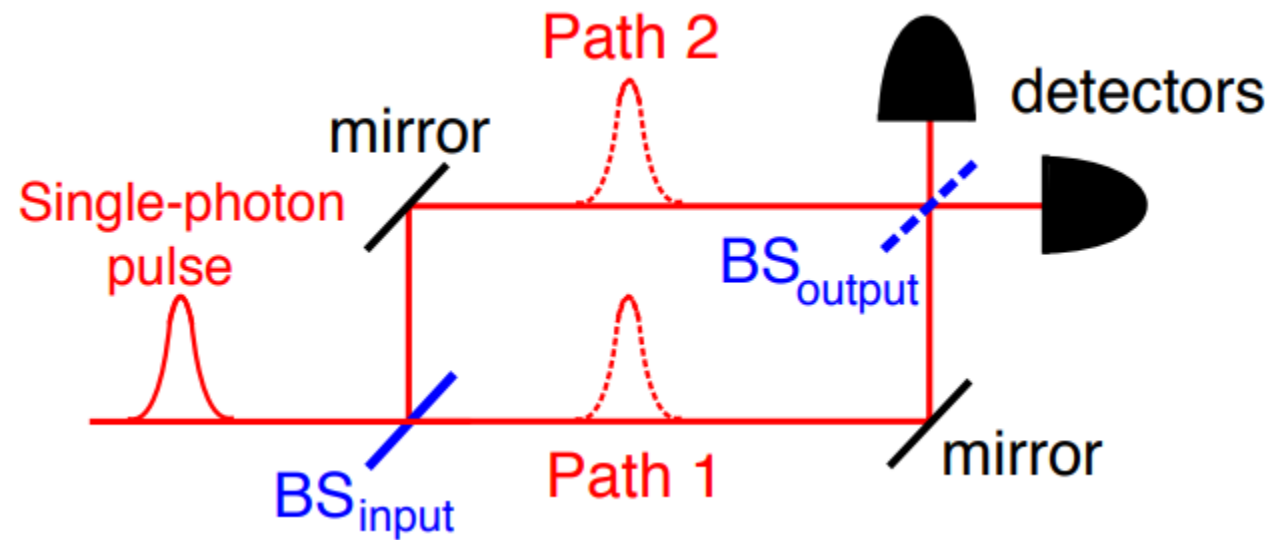
見ることができる量子的現象2…マッハ・ツェンダー干渉計

連続光の場合

BS2なし：光子～粒子（干渉なし） BS2あり：光子～波（干渉あり）



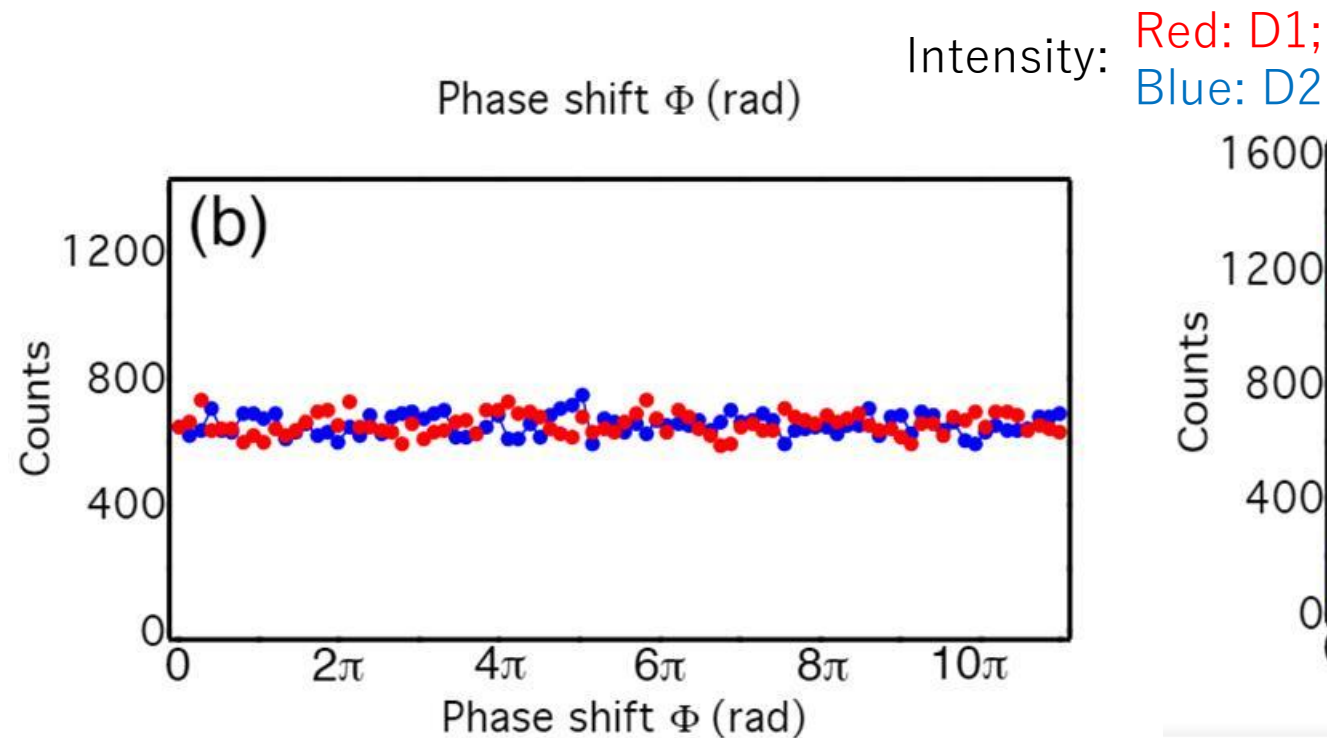
一光子の場合



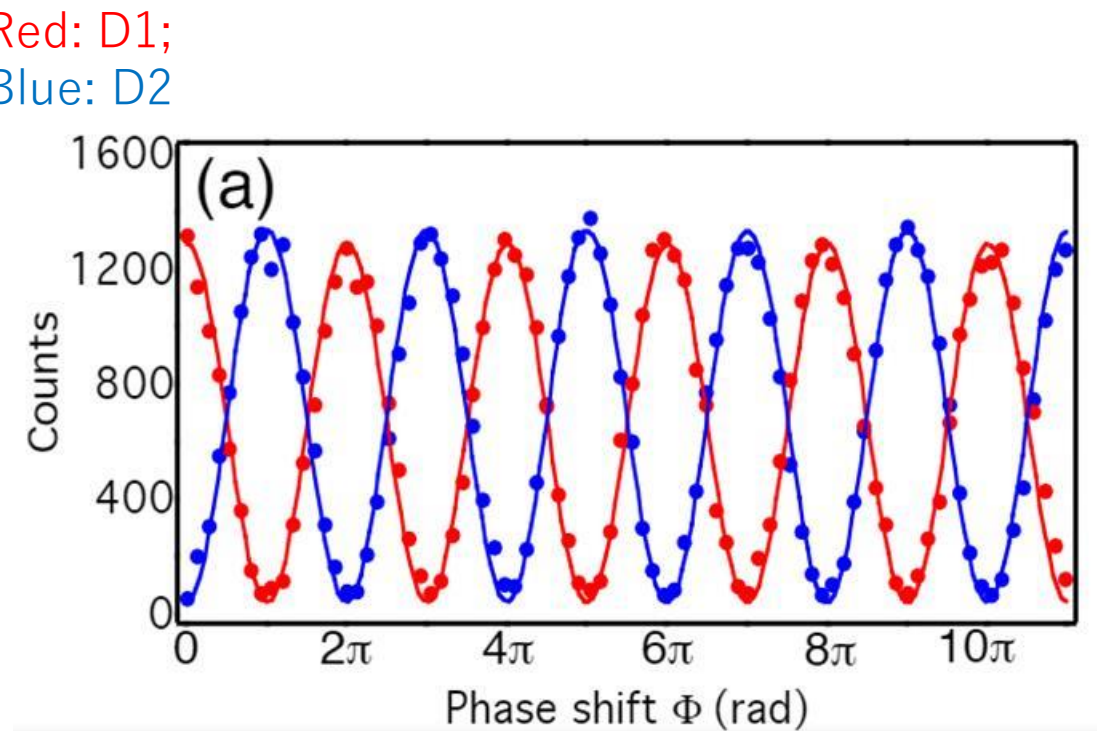
出典：

V. Jacques et al, Experimental realization of Wheeler's delayed-choice GedankenExperiment, Science 315, 966(2007), https://www.researchgate.net/publication/6501301_Experimental_Realization_of_Wheeler%27s_Delayed-Choice_Gedanken_Experiment

BS2なし：干渉なし



BS2あり：干渉あり



出典：

V. Jacques et al, Experimental realization of Wheeler's delayed-choice GedankenExperiment, Science 315, 966(2007), https://www.researchgate.net/publication/6501301_Experimental_Realization_of_Wheeler%27s_Delayed-Choice_Gedanken_Experiment

連続波としての干渉（BSありの場合）

$$2I_1 = \left| E_1 + e^{i\Delta\phi} E_1 \right|^2 = E_1^* E_1 (1 + e^{-i\Delta\phi})(1 + e^{i\Delta\phi}) = E_1^* E_1 (2 + e^{i\Delta\phi} + e^{-i\Delta\phi}) = 2|E_1|^2 (1 + \cos(\Delta\phi))$$

$$2I_2 = \left| E_1 - e^{i\Delta\phi} E_1 \right|^2 = E_1^* E_1 (1 - e^{-i\Delta\phi})(1 - e^{i\Delta\phi}) = |E_1|^2 (2 - e^{i\Delta\phi} - e^{-i\Delta\phi}) = 2|E_1|^2 (1 - \cos(\Delta\phi))$$

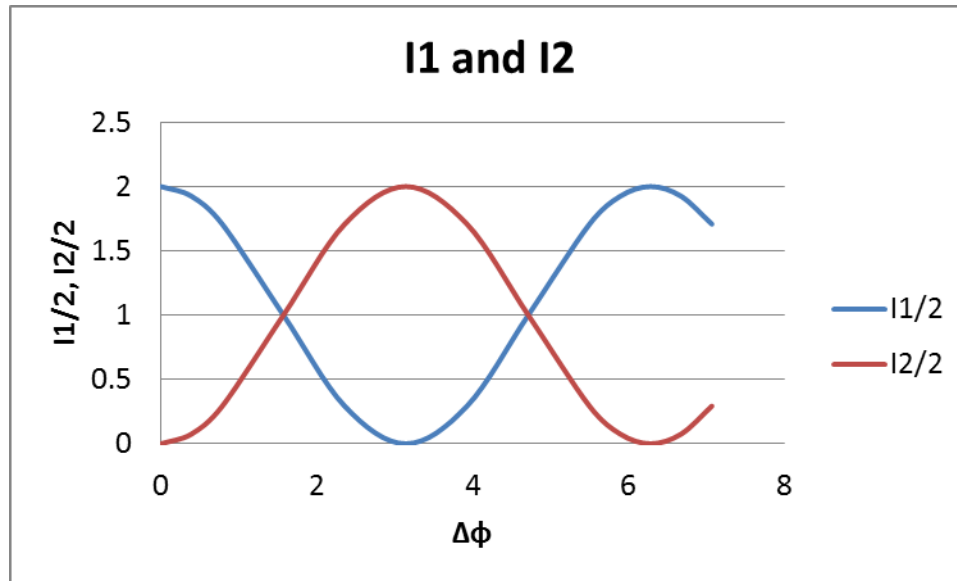
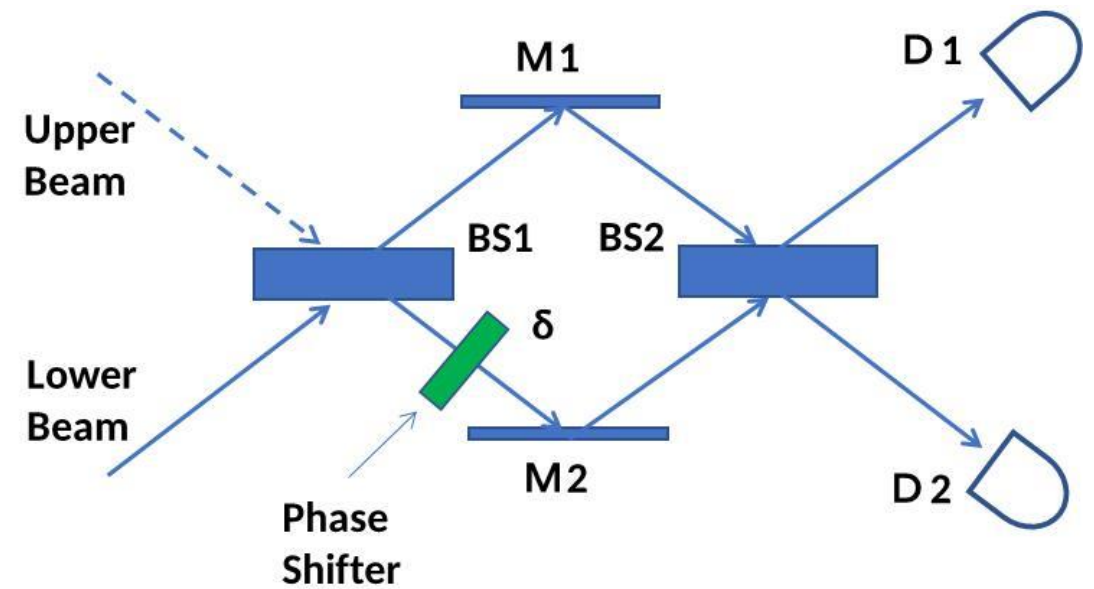
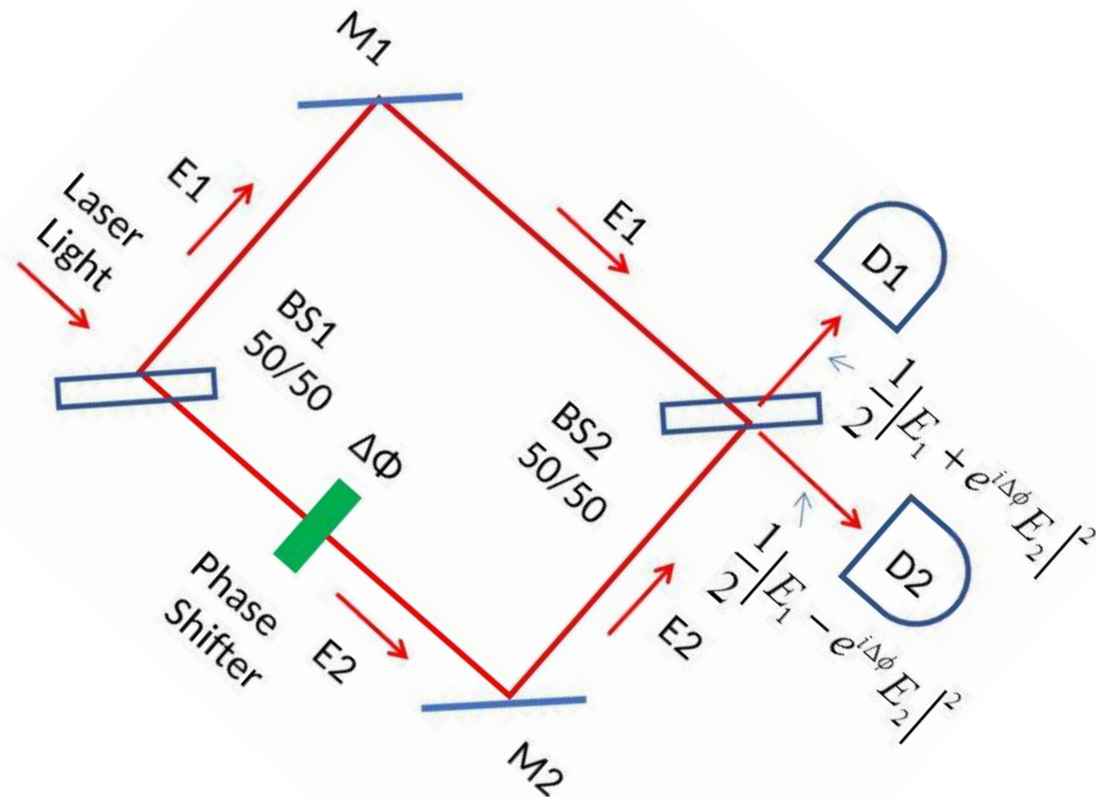


図 $E_1 = \sqrt{2}$ のとき

シングルフォトンとしての干渉 (BSありの場合)



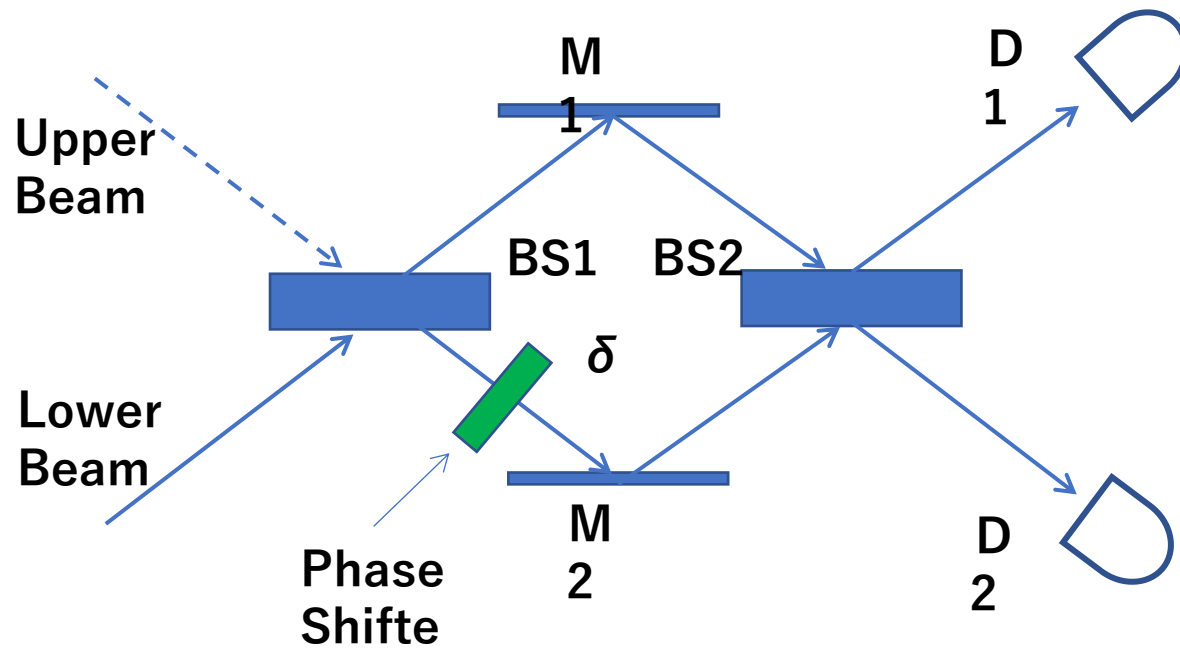
BS: Beam Splitter, M: Mirror, D: Detector

シングルフォトン干渉の考え方

出典：MITOCW Quantum Physics I Part 1: Basic Concepts, [Prof. Barton Zwiebach](#)

L2.3 Mach-Zehnder interferometers and beam splitters

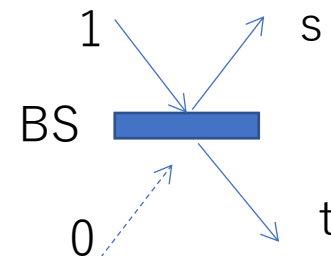
<https://ocw.mit.edu/courses/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/resources/mach-zehnder-interferometers-and-beam-splitters/>



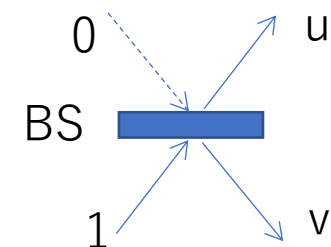
BS: Beam Splitter, M: Mirror, D: Detector

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad \text{Normalized: } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

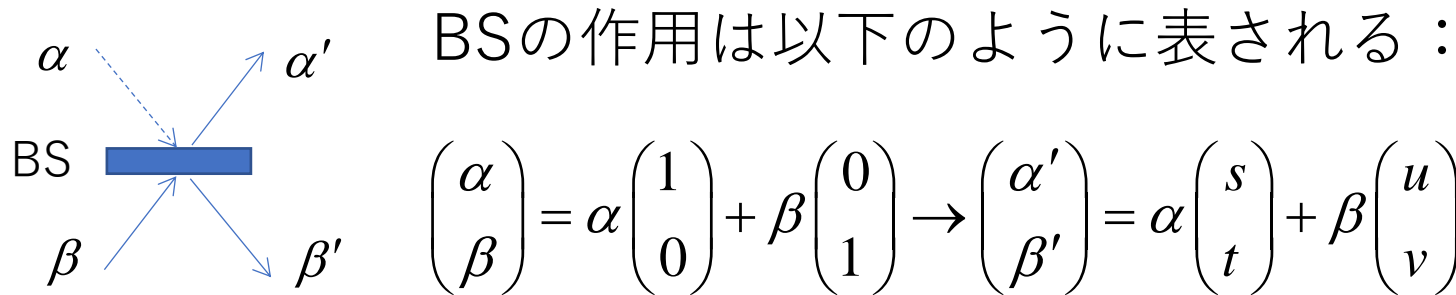
$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}: \text{Upper beam}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}: \text{Lower beam}$$



$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} s \\ t \end{pmatrix}, \quad s^2 + t^2 = 1$$



$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad u^2 + v^2 = 1$$



$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} s \\ t \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha s + \beta u \\ \alpha t + \beta v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s & u \\ t & v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

Balanced Beam Sprederの場合 $s^2 = t^2 = u^2 = v^2 = \frac{1}{2}$ は

これは確率の規則に反するのでダメ！

$$BS: \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \dots 1^2 + 1^2 = 2 \dots \text{NG}$$

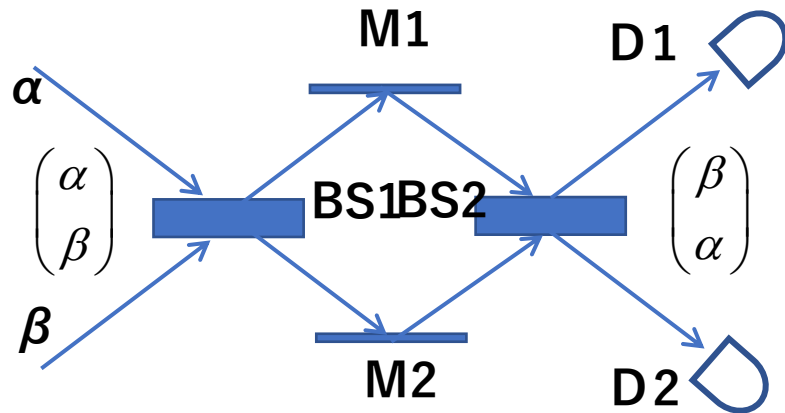
$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \alpha + \beta \\ \alpha - \beta \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2} |\alpha + \beta|^2 + \frac{1}{2} |\alpha - \beta|^2 = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \dots \text{OK}$$

アダマールゲート $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$

$$|\alpha + \beta|^2 = (\alpha^* + \beta^*)(\alpha + \beta) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 + \alpha^* \beta + \beta^* \alpha$$

$$|\alpha - \beta|^2 = (\alpha^* - \beta^*)(\alpha - \beta) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 - \alpha^* \beta - \beta^* \alpha$$

下図において $(BS1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, $(BS2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ とする（他の設定も可）。



$$(BS2)(BS1) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} : \text{パウリXゲート}$$

$$\text{output} = (BS2)(BS1) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix}$$

連続光を通すと，M1, M2経由の光がとD1, D2で足し合ったり消し合ったりする干渉が起こる．1光子の実験を多数回繰り返した結果も同じである．これは1光子のレベルで干渉が起きることを意味する．光子は粒子であり波でもあるという2重性に他ならない．

重ね合わせの根拠

1光子の思考実験を行うと、光子はこれ以上分割できないので、どちらかの検出器で検出される。X偏光の場合には確率1でD1で検出される。Y偏光の場合には確率1でD2に検出される。

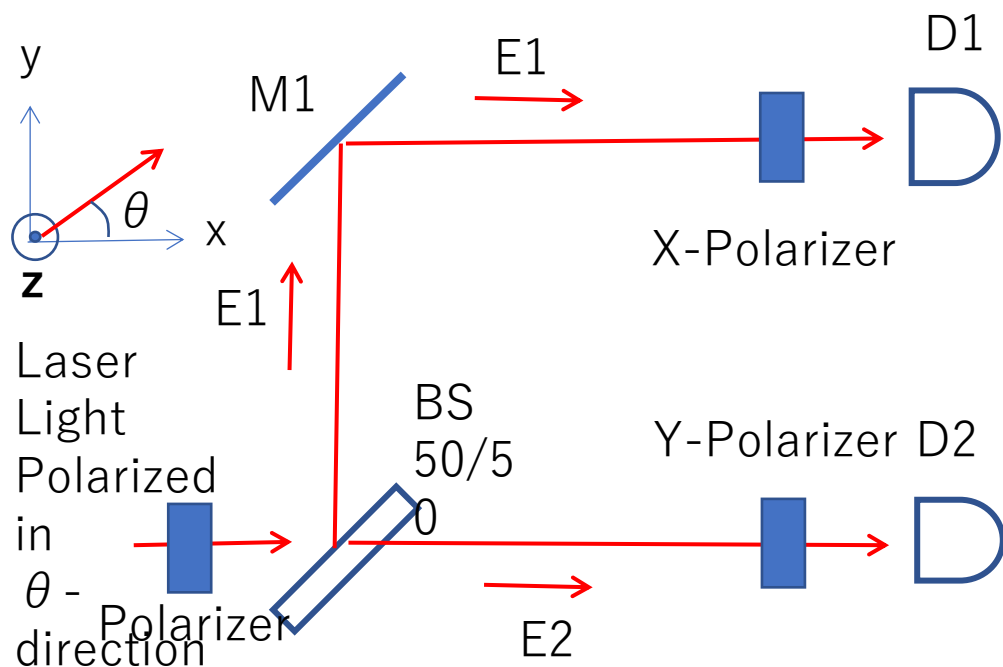


図 偏光は光子の進行方向をz, 水平にx, 垂直にyとする。

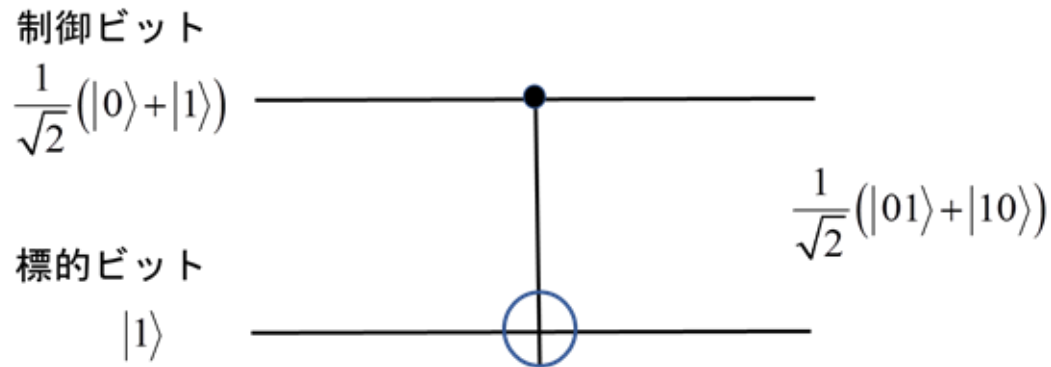
θ 方向に偏光した連続光 E_0 の実験を行うとx成分は $E_0 \cos \theta$, y成分は $E_0 \sin \theta$ となる。明度は光子数に比例するので、光子の個数は $\cos^2 \theta$ と $\sin^2 \theta$ に比例することに成る。

θ 方向に偏光した多数の光子の実験を行うと、連続光は多数の光子の極限であるから、光子数が十分に多ければ、連続光の明度は光子数に比例するので、1光子の確率になる。

従って、1光子の状態を以下のような重ね合わせと仮定することは実験に裏付けられた根拠のあることである。

$$|\psi\rangle = \alpha|X\rangle + \beta|Y\rangle, \quad \alpha^2 + \beta^2 = 1$$

エンタングルメント



この量子回路の出力 $\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|01\rangle + |10\rangle)$ は、第1ビットと第2ビットの直積の形、独立な形に書けない。いわゆるエンタングルされた（絡み合った）状態にある。

状態 $|01\rangle$ と $|10\rangle$ の観測確率がともに0.5で第1ビットが0なら第2ビットは1、第1ビットが1なら第2ビットは0と観測される。

絡み合い状態は、第1ビットと第2ビットがどんなに離れても解消されない。こんな遠隔作用は古典力学ではあり得ない。

アインシュタインは、この点に異を唱え、何か足りないものがあると主張した。

足りないものを補えば、このようなことは起こり得ないと主張した（EPR論文）。

ベルの理論とそれに基づくアスペらの実験により、彼の考えは否定された。

彼は量子の世界が非決定論であることにも反対した。隠れた情報を補えば、確率的な重ね合わせでないはずと主張した。

光子の状態が重ね合わせになる事実は、実験に裏付けられるが、何故そうなるのか、その理由は不明といえよう。

量子ゲート回路問題

NOTゲート

$$|x\rangle \text{ --- } \bigoplus \text{ --- } |x+1\rangle$$

パウリのX,Y,Zゲート

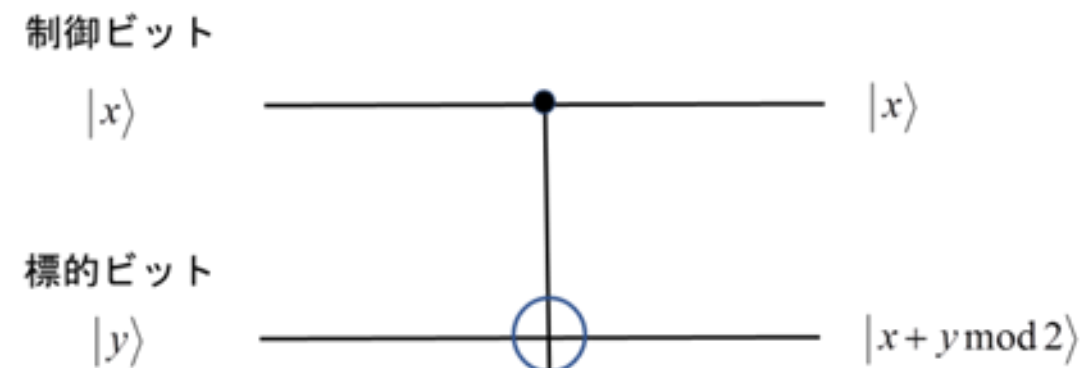
$$\text{パウリX: } \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle \rightarrow |1\rangle, \quad |1\rangle \rightarrow |0\rangle$$

$$\text{パウリY: } \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle \rightarrow i|1\rangle, \quad |1\rangle \rightarrow -i|0\rangle$$

$$\text{パウリZ: } \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle \rightarrow |0\rangle, \quad |1\rangle \rightarrow -|1\rangle$$

$$|0\rangle \rightarrow i|1\rangle: \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = i|1\rangle$$

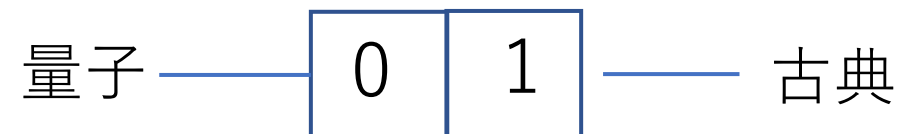
制御NOTゲート



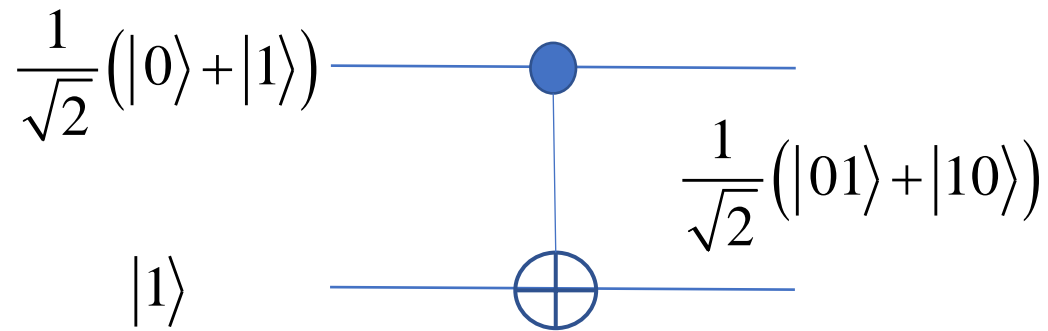
アダマールゲート

$$\text{--- } \boxed{H} \text{ --- } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$
$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

古典ゲート (量子情報 → 古典情報)

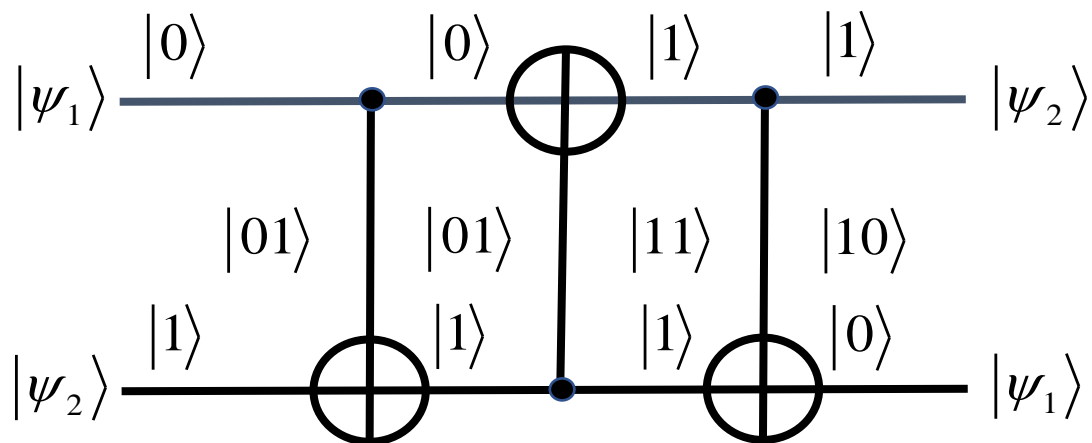


量子もつれ，可逆性



$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |11\rangle) \neq \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$$

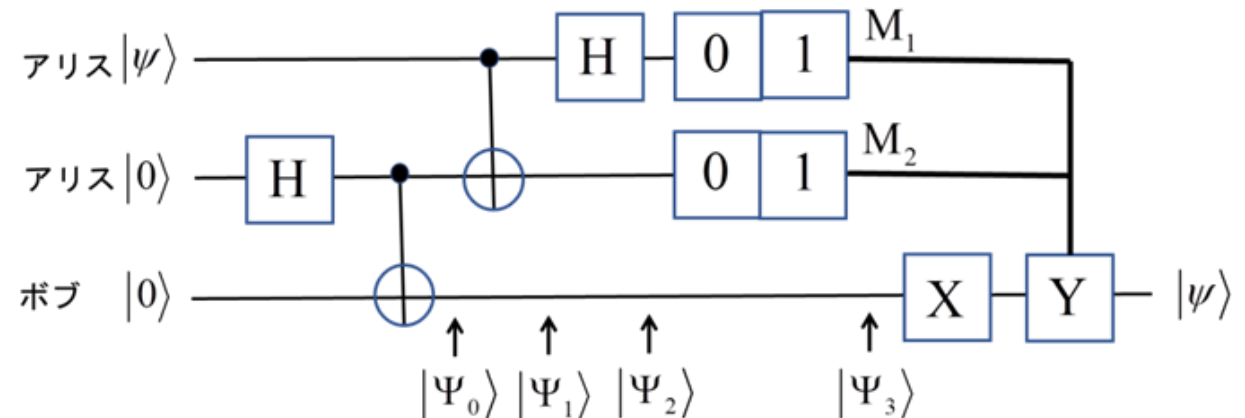
スワップゲート



エルミート性： $U^{*T} = U$ 自己随伴

ユニタリー性： $U^{*T} = U^{-1}$

量子テレポーテーション



アニーリング問題

整数2値変数の2次関数の最小値問題を解く． D-Waveと呼ばれる専用計算機がある，

D-Waveができること：2値変数の2次関数の最小値：
$$\min_{\mathbf{x} \in [0,1]^n} \left(a + \sum_{i=0}^{n-1} b_i x_i + \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} c_{ij} x_i x_j \right)$$

- ・ 最小値問題の数値解法の基本は最急降下法であるが、**ひたすら山下りをするだけでは局所的最小値に捕まる**．坂を上がったり、**他の峰に飛び移ることを混ぜると、大域的最小値に到達できる可能性が出る**．
- ・ 探索の初期には、激しく動き回り段々動きを小さくすると、時間とともに結果が改善するように仕向けられる．同様な金属の熱処理(焼き鈍し)とのアナロジーでこの名がある．

鋼の熱処理：焼き入れ，焼き戻し，**焼き鈍し**，焼き慣らし

鋼の焼き鈍し：工具や機械部品を製作するには切削が容易な鋼が理想的である．そのためには鋼を軟らかくする処理が欠かせない．それが「焼なまし(焼鈍：しょうどん)」と呼ばれる熱処理で，英語ではアニーリングと呼ばれる．**焼なましには組織を均一にする役割もあり，残留応力を除去できる．**

ゼロから学ぶ熱処理の基本，<https://www.keyence.co.jp/ss/products/recorder/heat/basics/type.jsp>

シミュレーテッド・アニーリング

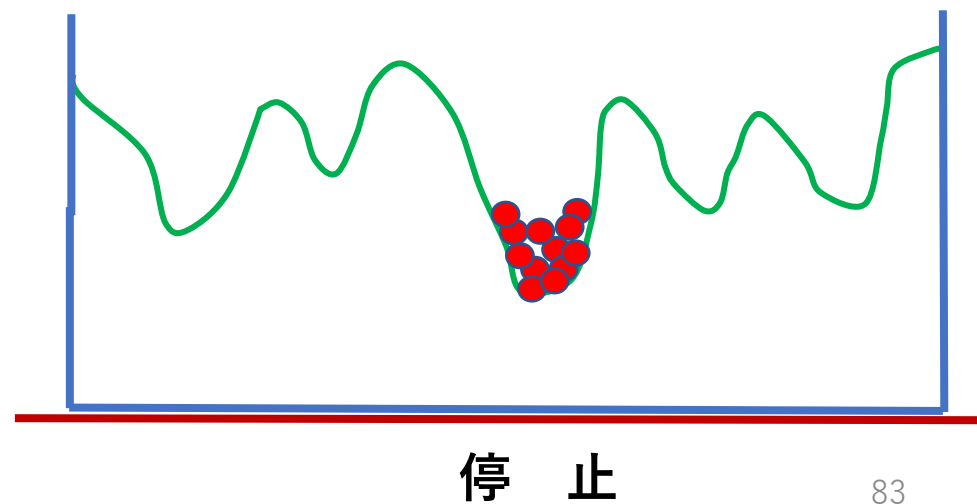
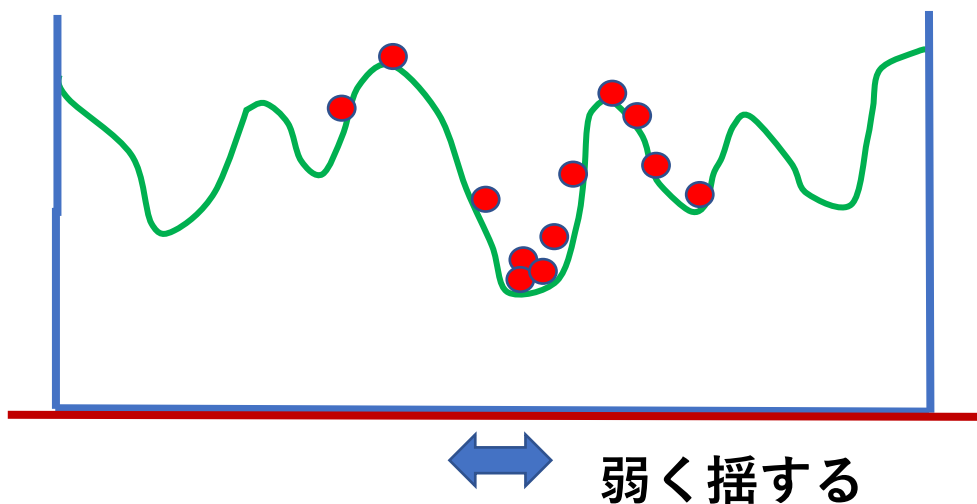
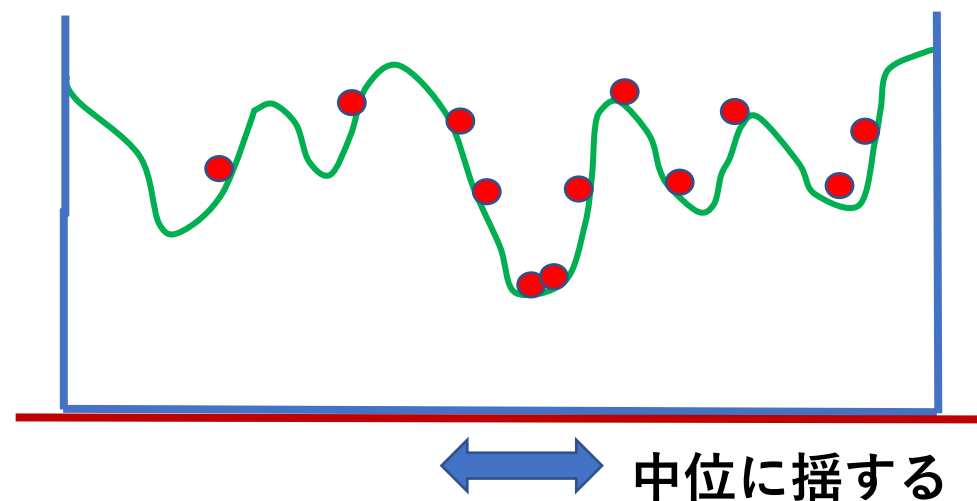
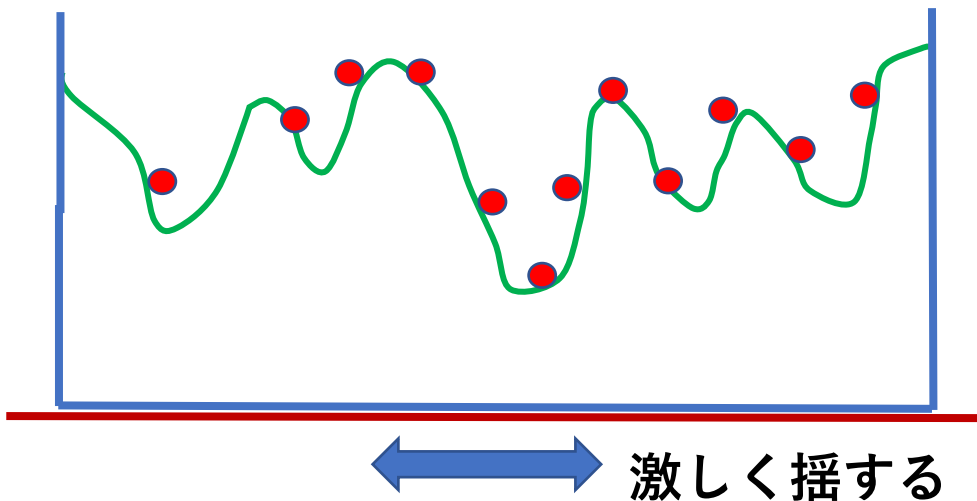
大部分の探索は山下りにし，**小さな確率で山登り**をさせる…単なる飛移り

量子アニーリング

東工大の西森教授と大学院学生(現デンソー)だった門脇氏が考案したもので，**量子力学のトンネル効果を利用**する．確率的な方法よりも成功するケースが高く速度も速いとされる…量子力学的な遷移過程

並列+アニーリング

量子計算で最小値を求めるイメージ：凸凹の地形の上に豆粒をばらまき、箱を揺する。最初は大きく、次第に小さく、豆粒が段々一番低い所に集まる。豆粒の数が並列計算に、揺らし方がアニーリングに相当。古典計算では一粒の豆の動きを追う。



第4章 モード展開された シュレディンガー方程式

2023/08/28

測位技術振興会 (SAPT) 知能・情報・エネルギー分科会
一色 浩

シュレディンガー方程式：

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) |\psi\rangle = H |\psi\rangle, \quad |\psi\rangle: \text{波動関数}, \quad \text{解の例: } |\psi\rangle = e^{i(kx - \omega t)}$$

変数分離： H が時間で変化しないとすると

$$|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = f(t)\phi(\mathbf{r}) \rightarrow i\hbar \frac{df(t)}{dt} \phi(\mathbf{r}) = f(t)H\phi(\mathbf{r})$$

$$\text{従って} \quad \frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\phi(\mathbf{r})} H\phi(\mathbf{r}) = E$$

固有値問題： E_n を固有値, $|\Psi_n(\mathbf{r})\rangle$ を固有関数とすると

$$H |\Psi_n(\mathbf{r})\rangle = E_n |\Psi_n(\mathbf{r})\rangle, \quad n = 0, 1, \dots, \infty$$

固有関数 $|\Psi_n(\mathbf{r})\rangle$ は直交性あり，更に正規化されているものとする：

$$\langle \Psi_m(\mathbf{r}) | \Psi_n(\mathbf{r}) \rangle = \delta_{mn}$$

$|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle$ の基底による展開： $i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) |\psi\rangle = H |\psi\rangle$ ， $|\psi\rangle$ ：波動関数

$$|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = c_0(t) |\Psi_0(\mathbf{r})\rangle + c_1(t) |\Psi_1(\mathbf{r})\rangle + \dots$$

をシュレディンガー方程式に代入すると， E_n が時間の関数でないので

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = E_n c_n \rightarrow c_n = c_{n0} \exp\left(-\frac{iE_n}{\hbar} t\right) \rightarrow |c_n|^2 = |c_{n0}|^2$$

$|c_n|^2 = |c_{n0}|^2$ だから同じ確率であり続ける，各成分の確率不変

モード分解されたシュレディンガー方程式

2qubitのイジングモデルのとき

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= (C_{00}|0\rangle + C_{01}|1\rangle) \otimes (C_{10}|0\rangle + C_{11}|1\rangle) \\ &= C_{00}C_{10}|0\rangle \otimes |0\rangle + C_{00}C_{11}|0\rangle \otimes |1\rangle + C_{01}C_{10}|1\rangle \otimes |0\rangle + C_{01}C_{11}|1\rangle \otimes |1\rangle \\ &= c_0|00\rangle + c_1|01\rangle + c_2|10\rangle + c_3|11\rangle \end{aligned}$$

2ビットの直積（テンソル積）： $|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$|00\rangle = (1 \ 0 \ 0 \ 0)^T, |10\rangle = (0 \ 1 \ 0 \ 0)^T, |01\rangle = (0 \ 0 \ 1 \ 0)^T, |11\rangle = (0 \ 0 \ 0 \ 1)^T$$

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = E_n c_n(t) \rightarrow c_n(t) = c_{n0} \exp\left(-\frac{iE_n}{\hbar} t\right)$$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \frac{dc_0}{dt} \\ \frac{dc_1}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dc_{2N-1}}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cdots & 0 & \cdots & E_{2N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{2N-1} \end{pmatrix}$$

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

$$\|\psi\rangle\|^2 = (|\psi\rangle)^\dagger |\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

$$= \sum_{n=0}^{2N-1} |c_n(t)|^2 = \sum_{n=0}^{2N-1} |c_{n0}(t)|^2 = 1$$

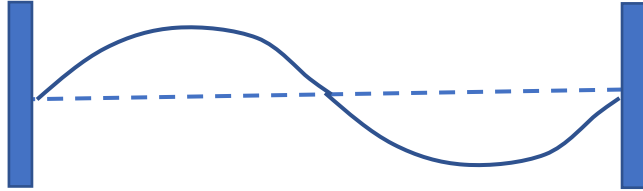
- ・ ある初期状態から始まった状態は、同じ確率であり続ける、
- ・ 各成分および全体の確率不変



最小値を得るためには、強制的に確率を変化させる：アニーリング

上述のことは弦の振動を考えると理解し易い.

可算無限自由度の振動



$$\text{運動方程式: } \rho \frac{\partial^2 \eta(x,t)}{\partial t^2} = T \frac{\partial^2 \eta(x,t)}{\partial x^2}$$

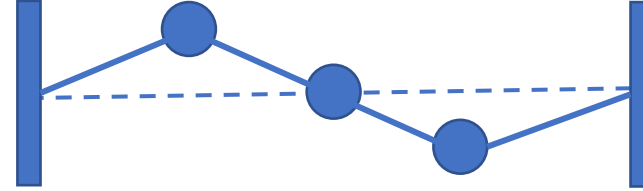
$$\eta(x,t) = Y(x) e^{i\omega t} \quad \text{とすると} \quad \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{T} \omega^2 Y$$

加算無限個の振動モード:

$$\omega_n^2 = Y_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

$$\omega_n^2 = \frac{T}{\rho} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2$$

有限自由度の振動



$$\begin{pmatrix} \ddot{\eta}_1 \\ \ddot{\eta}_2 \\ \ddot{\eta}_3 \end{pmatrix} = \frac{T}{m\Delta x} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \end{pmatrix}$$

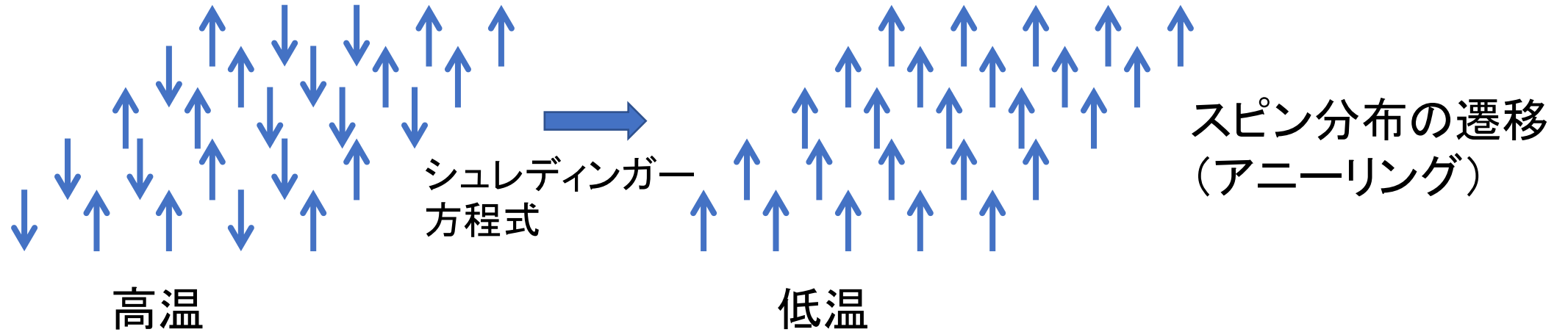
$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \end{pmatrix} = -\frac{m\Delta x}{T} \omega^2 \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \end{pmatrix}$$

3個の振動モード:

イジング問題

結晶格子状のエネルギー最小磁気スピン分布

量子アニーリングはイジング問題がベースになっているので、以下においてはイジング問題を解説する。量子アニーリングそのものは次章で詳しく議論する。



途中の状態ではさまざまな状態の線形重ねあわせ. 係数の絶対値の2乗和が測定時の出現確率.

低温ではエネルギー最小の状態の確率が1. このj状態で測定すれば正解が求まる.

解きたい問題を量子状態に埋め込む
巡回セールスマン問題(TSP)なら, 場所変数の値(0,1) をスピンの上向き, 下向きになぞらえる.

TSPのコスト関数を H に反映する.

Ising(σ)とQubo(q)の変換

$$(1,1) \square (1,0)$$

$$q = \frac{1}{2}(\sigma + 1), \quad \sigma = 2q - 1$$

イジング問題では、時間進化をシュレディンガー方程式で考える。ハミルトニアン H が時間の関数でないと各基底の確率が変化しない。物理的には絶対温度0では、磁気スピン・エネルギー最小になるので、高温から低温への温度変化(アニーリング)を導入する。具体的には、 H に熱運動を表す項を導入し、絶対0度でこの項が0になるようにする。

式で表すと、量子アニーリングは下記のように表現される。

$$H_{QA}(t) = A(t)H_A + B(t)H_B$$

ここで、 H_A は熱運動(かきまぜ効果)を表す項を H_B は最小化したい磁気スピン・エネルギー関数の項をそれぞれ表わす。スケジュール $A(t)$, $B(t)$ は任意であるが、例えば

$$A(t) = 1 - \frac{t}{\tau} \quad B(t) = \frac{t}{\tau}$$

とすると $H_{QA}(0) = H_A \quad H_{QA}(\tau) = H_B$

最小値問題(強磁性体のイジング模型 Ising model):

$$\sigma_i = |\uparrow\rangle = 1, \quad |\downarrow\rangle = -1 \quad \text{として} \quad E = -\sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i$$

$$2\text{スピンの場合には} \quad E = -J_{12} \sigma_1 \sigma_2 - h_1 \sigma_1 - h_2 \sigma_2$$

スピン同士が同じ向きするとき, スピンと磁場の方向が同じとき, エネルギーが小さい.

$$2\text{量子ビットの列ベクトル表現: } |00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

2量子ビット以下の場合の基底は

$$|\uparrow\uparrow\rangle = |00\rangle_{(2)} = |0\rangle_{(10)} = (1 \ 0 \ 0 \ 0)^T : \quad \sigma_1 = 1, \quad \sigma_2 = 1;$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle = |01\rangle_{(2)} = |1\rangle_{(10)} = (0 \ 1 \ 0 \ 0)^T : \quad \sigma_1 = 1, \quad \sigma_2 = -1;$$

$$|\downarrow\uparrow\rangle = |10\rangle_{(2)} = |2\rangle_{(10)} = (0 \ 0 \ 1 \ 0)^T : \quad \sigma_1 = -1, \quad \sigma_2 = 1;$$

$$|\downarrow\downarrow\rangle = |11\rangle_{(2)} = |3\rangle_{(10)} = (0 \ 0 \ 0 \ 1)^T : \quad \sigma_1 = -1, \quad \sigma_2 = -1$$

したがって

$$\begin{aligned}
 E(|00\rangle) &= -J_{12} - h_1 - h_2 & E(|01\rangle) &= J_{12} - h_1 + h_2 \\
 E(|10\rangle) &= J_{12} + h_1 - h_2 & E(|11\rangle) &= -J_{12} + h_1 + h_2
 \end{aligned}$$

これより, ハミルトニアン H_B は

$$H_B = \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix}$$

∴)

$$H_B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = (-J_{12} - h_1 - h_2) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ハミルトニアン H_A は $H_A = \Gamma_A \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ ← $-X = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ を横方向に
に左右反転し，縦方向に
上下反転したもの。

H_A の役割はかき混ぜること

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \\ \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\beta_1 - \alpha_2 \\ -\alpha_1 - \beta_2 \\ -\alpha_1 - \beta_2 \\ -\beta_1 - \alpha_2 \end{pmatrix}$$

初期条件: 例えば $|\psi_{t=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^2}} (1 \ 1 \ 1 \ 1)^T$

2量子ビット
のシュレディ
ンガー方程式

$$\begin{pmatrix} dc_0/dt \\ dc_1/dt \\ dc_2/dt \\ dc_3/dt \end{pmatrix} = -\frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

実部

$$\begin{pmatrix} dc_{0c}/dt \\ dc_{1c}/dt \\ dc_{2c}/dt \\ dc_{3c}/dt \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{0s} \\ c_{1s} \\ c_{2s} \\ c_{3s} \end{pmatrix}$$

虚部

$$\begin{pmatrix} dc_{0s}/dt \\ dc_{1s}/dt \\ dc_{2s}/dt \\ dc_{3s}/dt \end{pmatrix} = -\frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{0c} \\ c_{1c} \\ c_{2c} \\ c_{3c} \end{pmatrix}$$

以下においては，上の連立常微分方程式を直接積分するが，時間間隔 Δt で時間を離散化して，時間発展演算子：

$$U(t, \Delta t) = \exp\left(\frac{-iH_{QA}(t)}{\hbar} \Delta t\right)$$

を用いて：

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(n\Delta t)\rangle = U((n-1)\Delta t, \Delta t)U((n-2)\Delta t, \Delta t) \cdots U(0, \Delta t)|\psi(0)\rangle$$

とできよう．これを量子断熱時間発展と呼ぶ．

時間発展演算子は，次式によりユニタリー演算子である．

$$U^*(t, \Delta t)U(t, \Delta t) = \exp\left(\frac{iH_{QA}(t)}{\hbar} \Delta t\right) \exp\left(\frac{-iH_{QA}(t)}{\hbar} \Delta t\right) = \exp(0) = 1$$

時間発展演算子は，次式のように分解可能である：

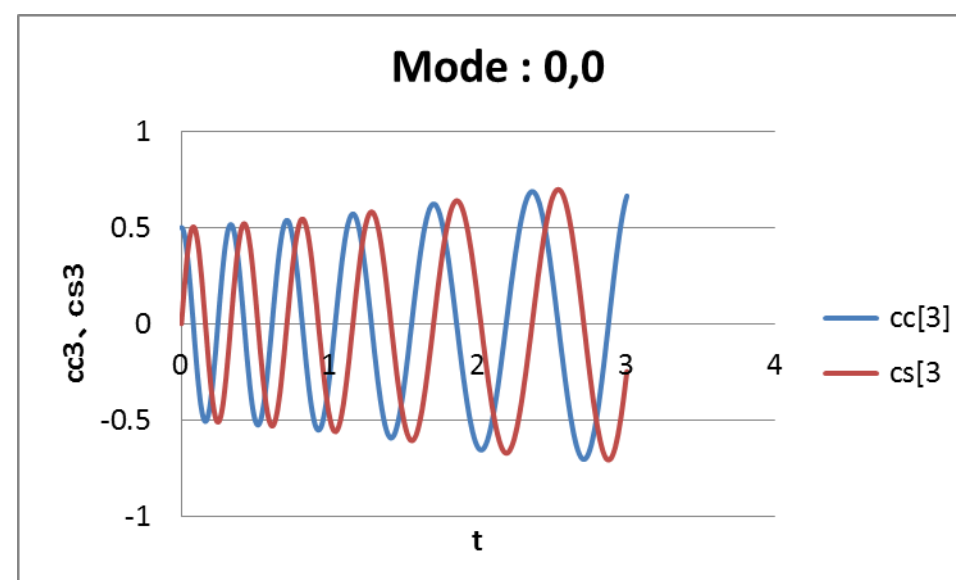
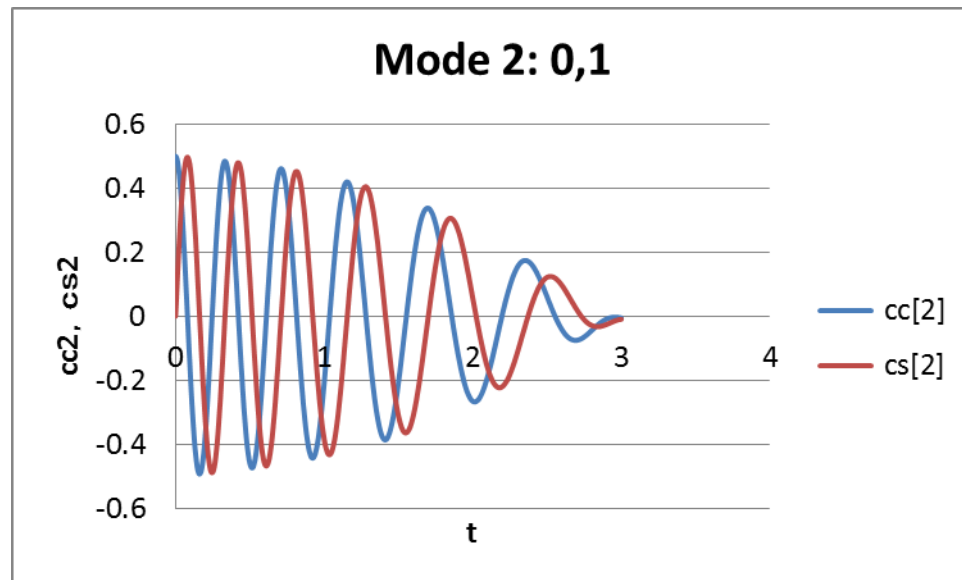
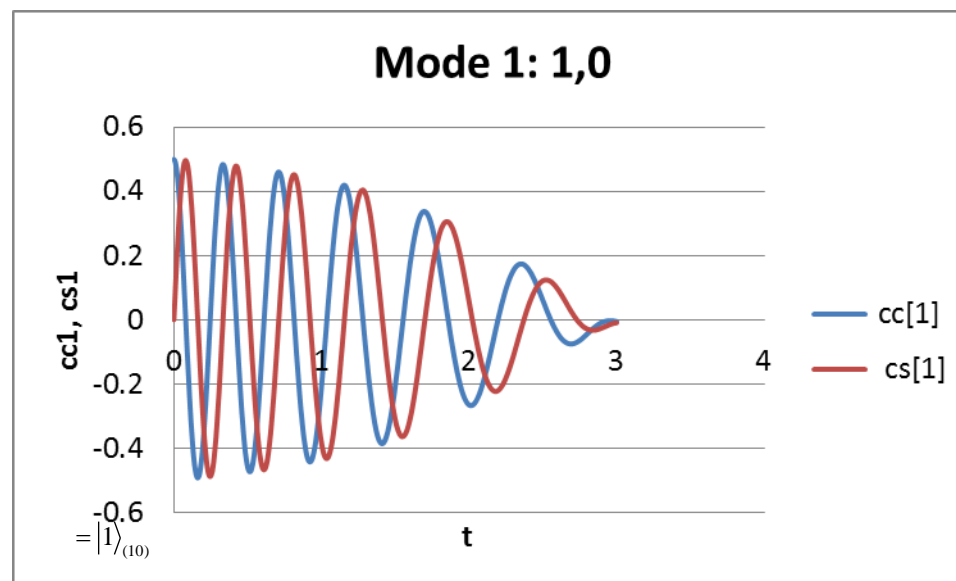
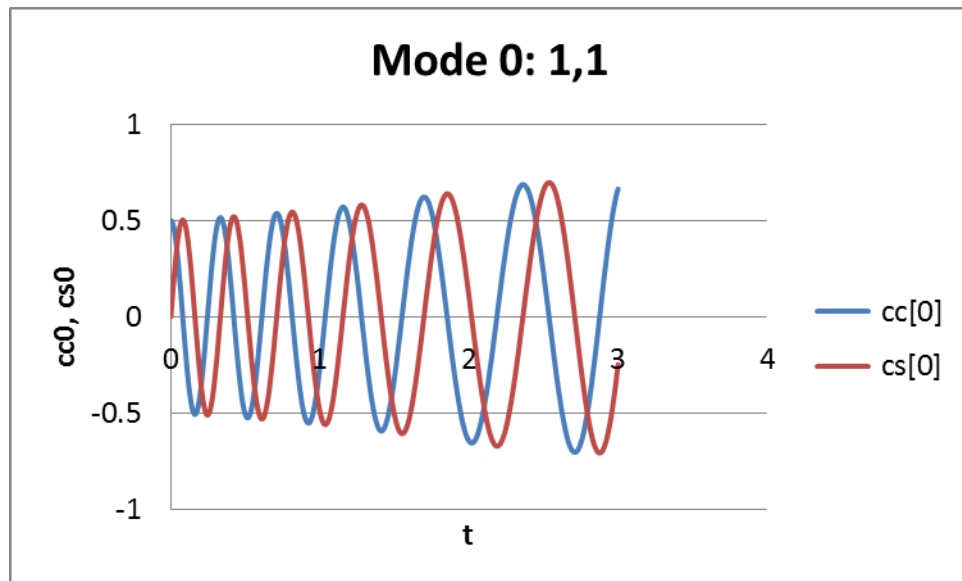
$$U(t, \Delta t) = \exp\left(\frac{-i(A(t)H_A + B(t)H_B)}{\hbar} \Delta t\right) = \exp\left(\frac{-iA(t)H_A}{\hbar} \Delta t\right) \exp\left(\frac{-iB(t)H_B}{\hbar} \Delta t\right)$$

実部，虚部を t で微分すると，以下の様（全結合型の調和振動）にも書ける：

$$\begin{pmatrix} d^2 c_{0c}/dt^2 \\ d^2 c_{1c}/dt^2 \\ d^2 c_{2c}/dt^2 \\ d^2 c_{3c}/dt^2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} c_{0c} \\ c_{1c} \\ c_{2c} \\ c_{3c} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} d^2 c_{0s}/dt^2 \\ d^2 c_{1s}/dt^2 \\ d^2 c_{2s}/dt^2 \\ d^2 c_{3s}/dt^2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} c_{0s} \\ c_{1s} \\ c_{2s} \\ c_{3s} \end{pmatrix}$$

2スピンの数値計算結果1 (磁場なし) 時間発展



磁場なし

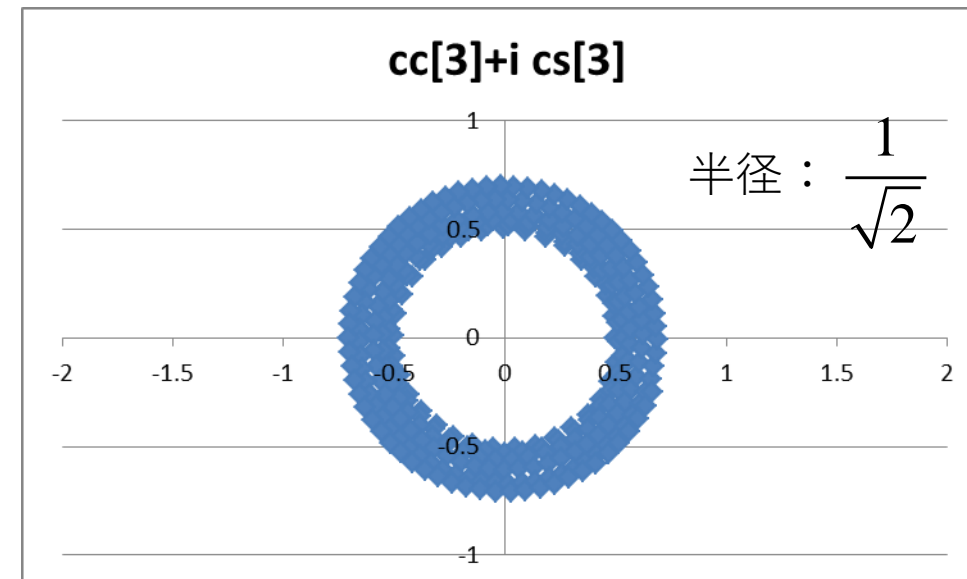
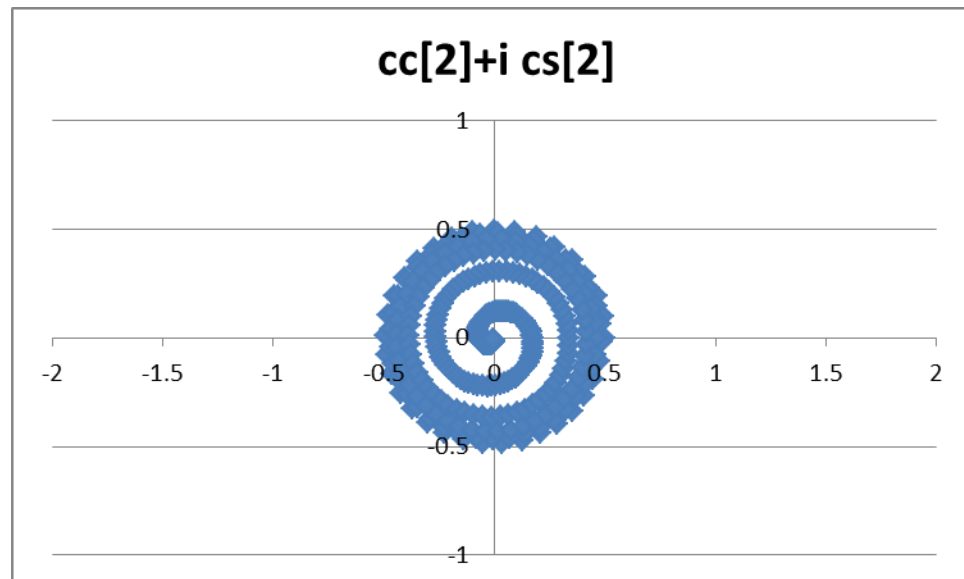
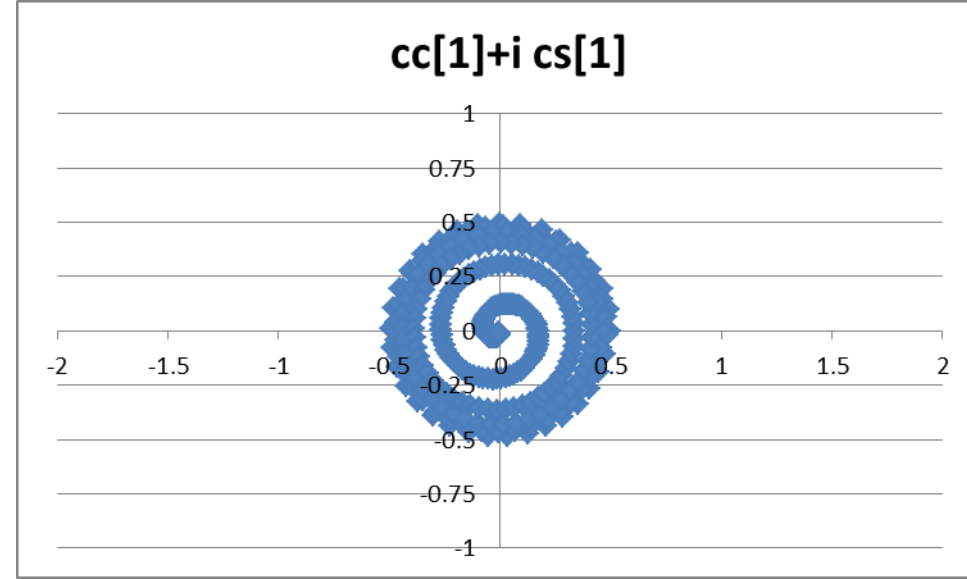
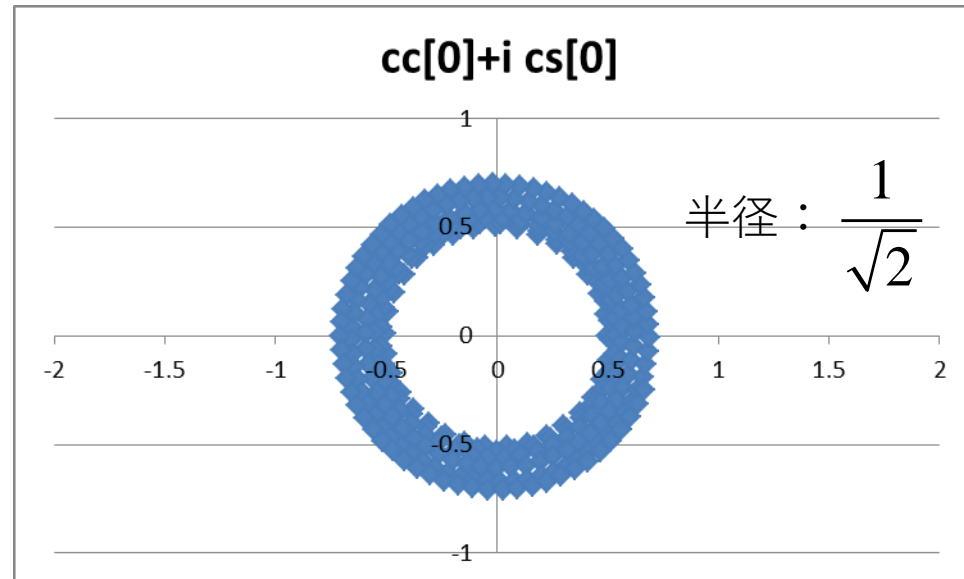
$$J_{12} = 1$$

$$h_1 = 0$$

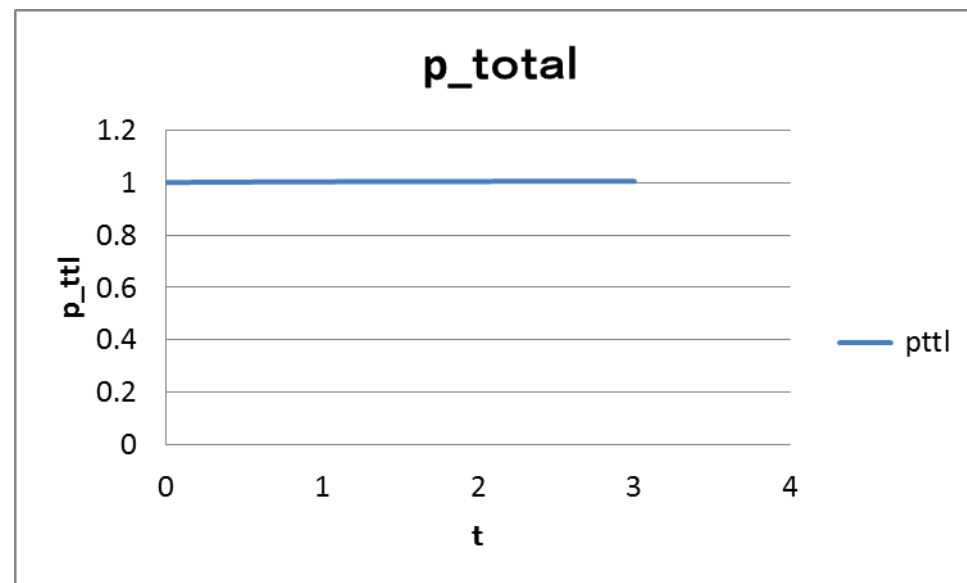
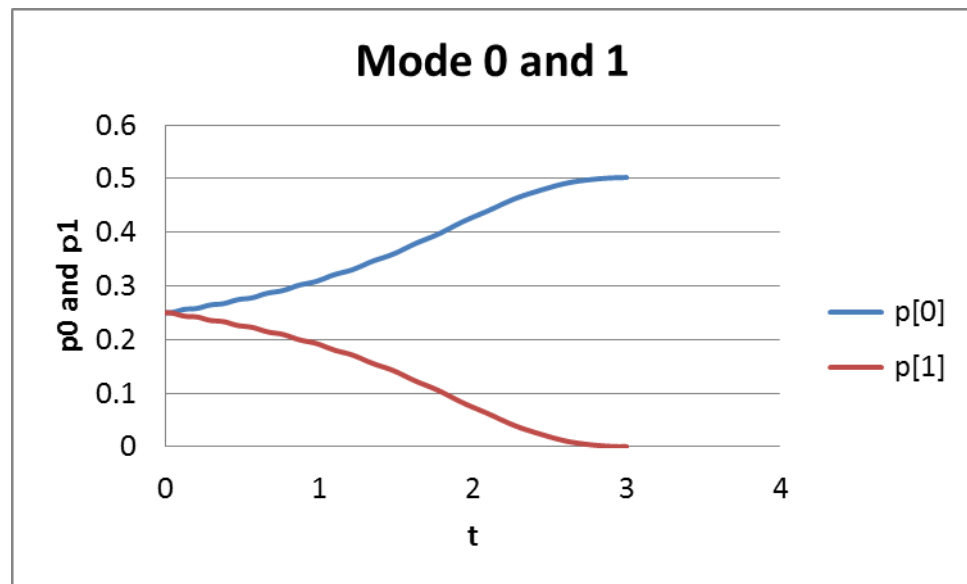
$$h_2 = 0$$

$$\hbar = 0.1$$

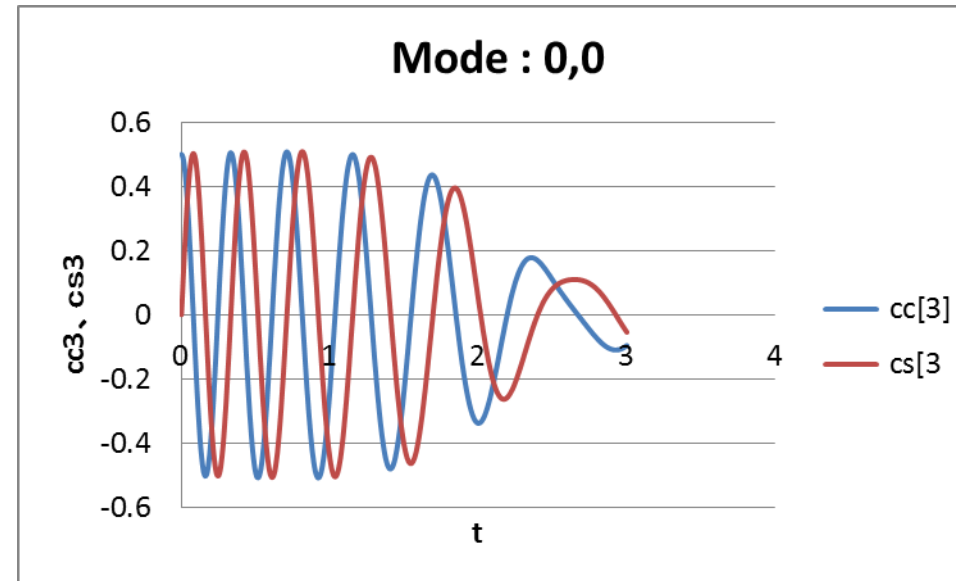
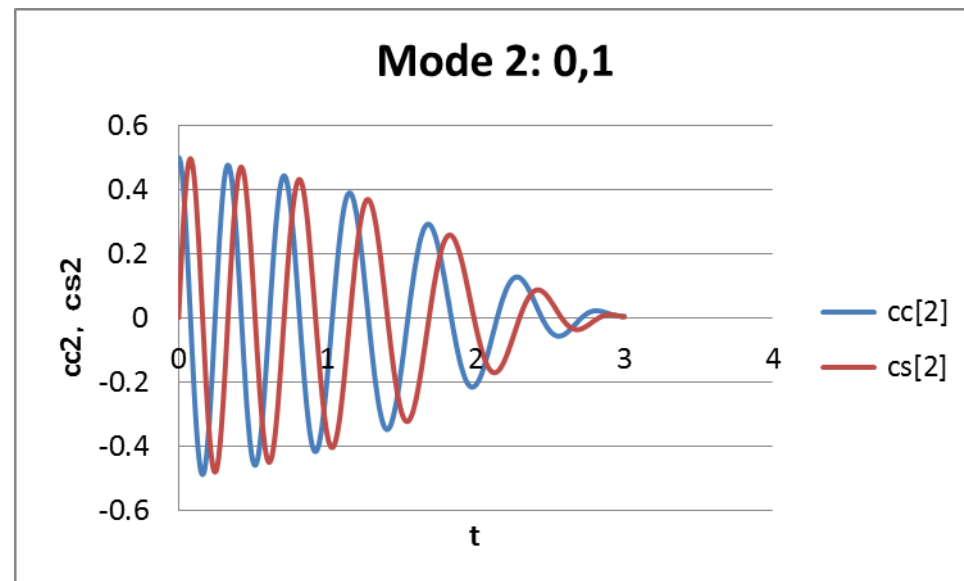
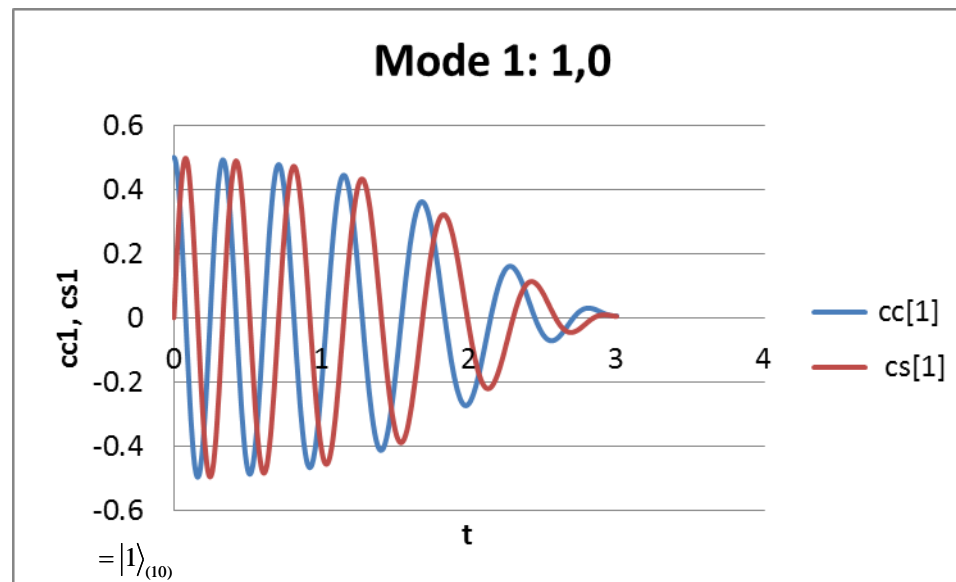
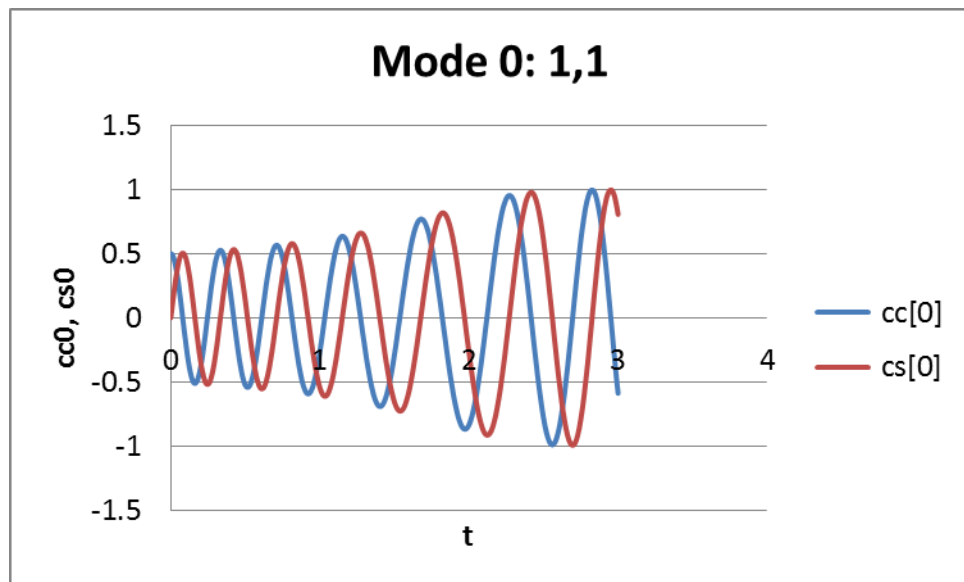
複素表示



確率



2スピンの数値計算結果2（上向き磁場あり） 時間発展



上向き磁場
あり

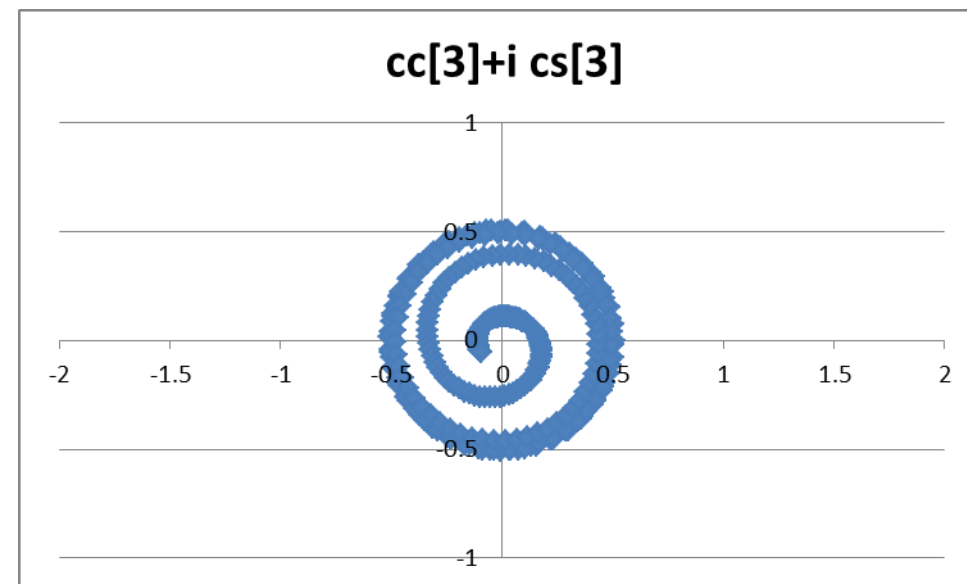
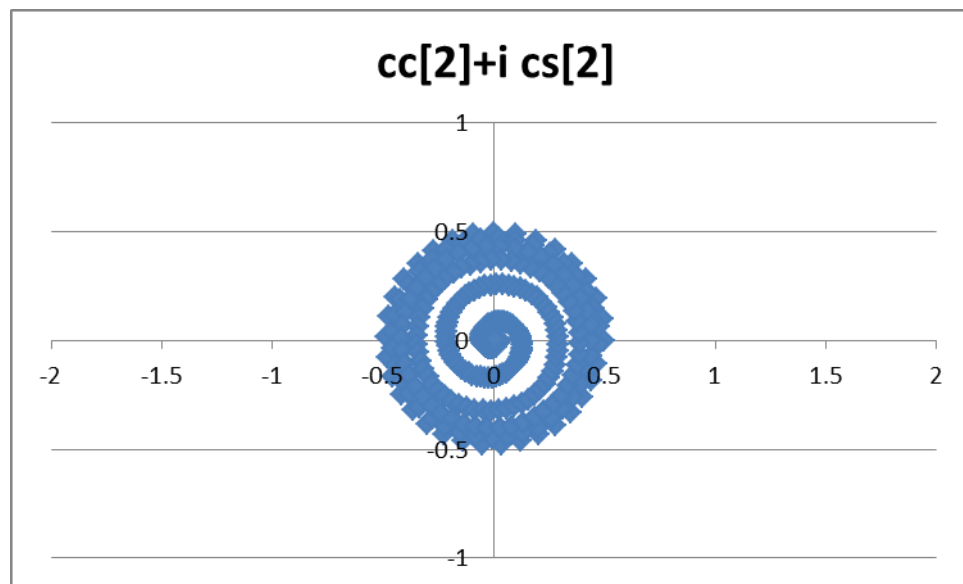
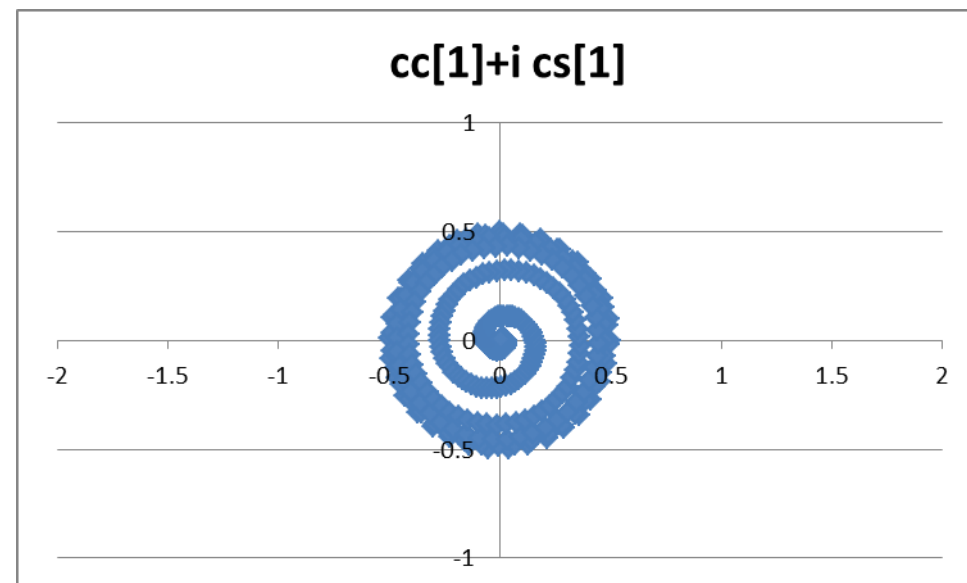
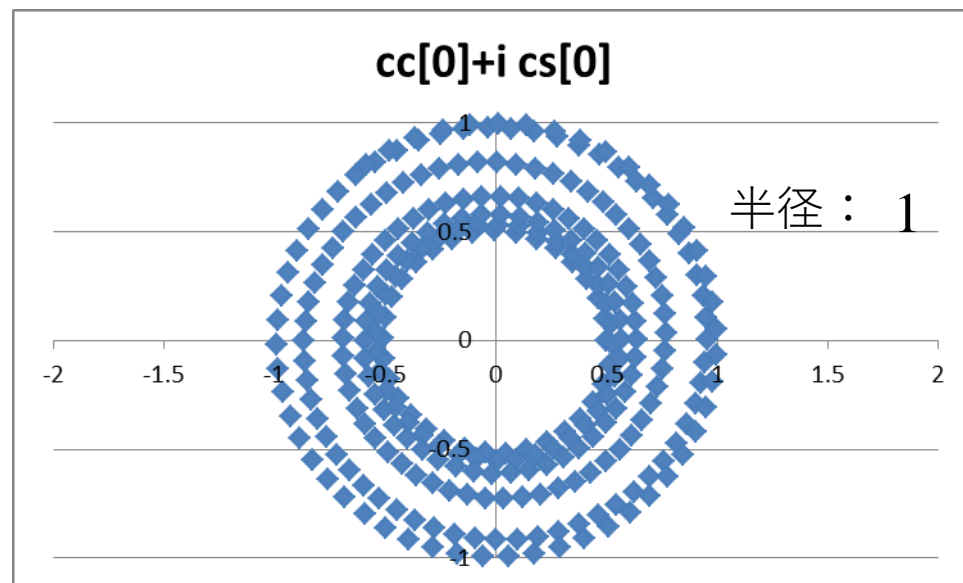
$$J_{12} = 1$$

$$h_1 = 0.3$$

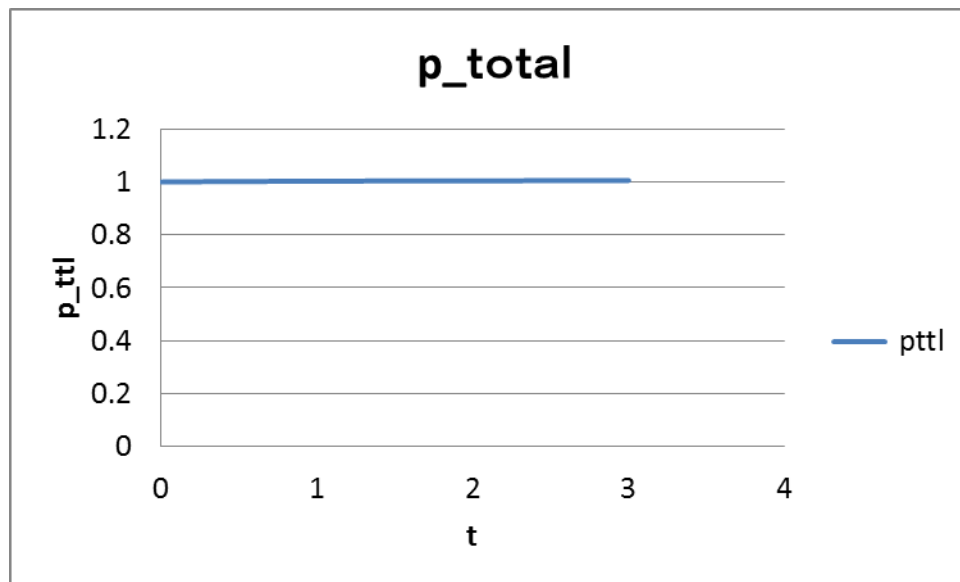
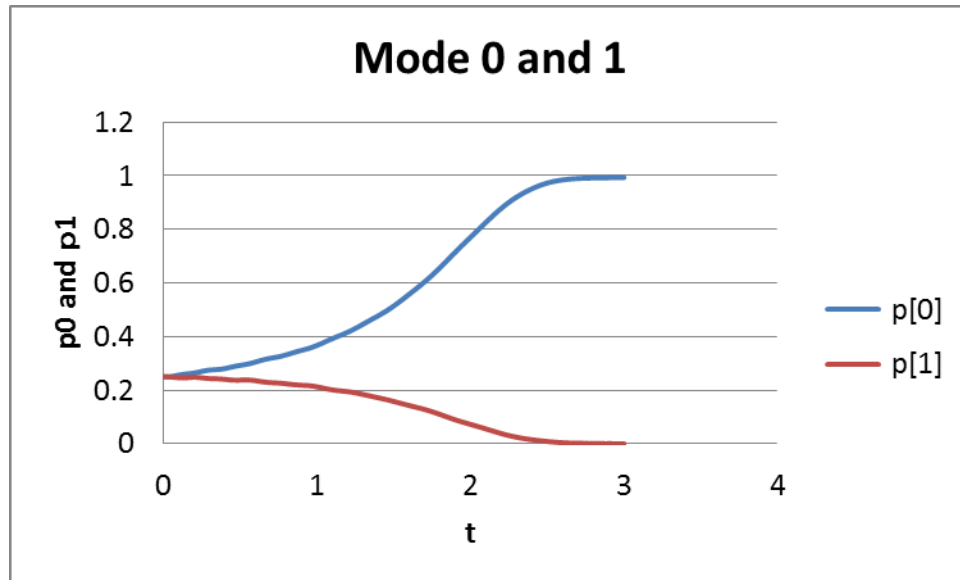
$$h_2 = 0$$

$$\hbar = 0.1$$

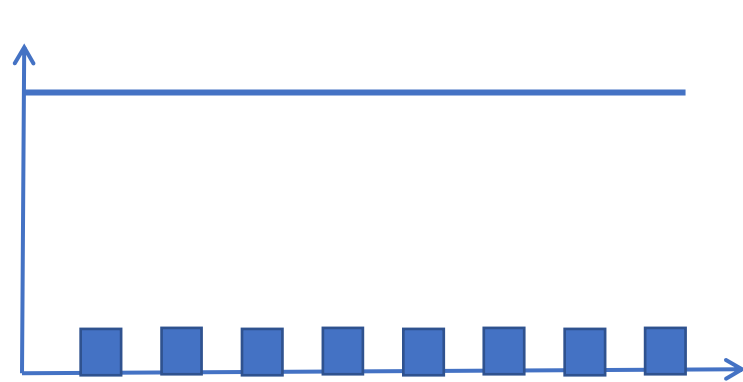
複素表示



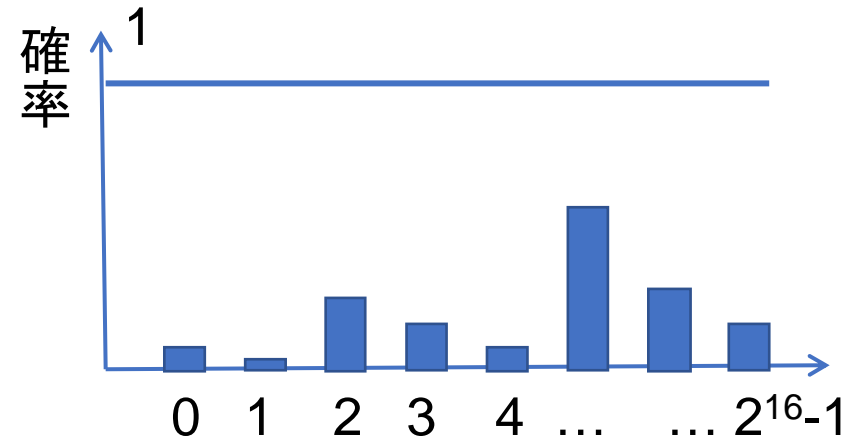
確率



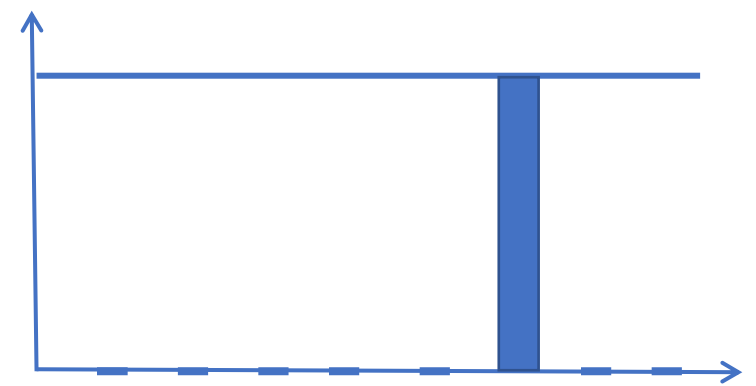
焼きなましシミュレーション



高温状態



途中の状態



絶対0度の状態

- ・高温状態から絶対0度に遷移させて、測定する.
- ・途中の状態はすべての可能な道順が並列している.

スパコンと量子計算機の比較

	計算速度	消費電力
スパコン	変数が多いと不可能	「京」：27,000戸分
量子計算機	現実的な時間	極めて少ない

量子アニーリングで解く場合：

- ・ 以上の計算では、一つの初期状態に対する計算であった.
- ・ 量子計算の場合はあらゆる初期状態（この問題に対しては、2の8乗 = 256個の初期条件）が同時に行われる.
- ・ 時間が経つとすべてが最小エネルギーの状態になるので、すなわち、最小エネルギーを与える状態の確率が1になる. この時点で観測すれば、正解が得られる.

量子ゲート回路で解く場合：

- ・ 解を与えるエンタングルメントを一つ作り出す(回路が難しい).
- ・ 状態が一つ（確率100%）であるから、観測すれば必ず解が得られる.

量子計算機が特に向いている問題＝組み合わせ爆発問題

現在の量子アニーラーは守備範囲が狭い：

2進変数の2次関数の最小値問題

守備範囲を広げる：

2進→10進，整数→実数，2次関数→一般の関数

量子計算で問題を解くことのまとめ

量子計算で問題を解く = 解となる状態の確率を100%にする

その方法は二つある：

- (1) エンタングルメントを利用する
- (2) 最小値問題に変換して、アニーリングを利用する

エンタングルメントで解く：量子ゲートにより，唯一解を与える状態をエンタングルメントで作り出す

アニーリングで解く：重ね合わせを利用して，超並列で時間進化（アニーリング）させて大域的最小に到達させる

量子計算で圧倒的に時間短縮するのは，組み合わせ爆発問題
→ 問題を組み合わせ爆発問題（2進変数の2次関数の最小）
に変換

第5章 量子アニーリング問題

2023/08/28

測位技術振興会 (SAPT) 知能・情報・エネルギー分科会
一色 浩

前章では、量子アニーリングの基礎となっているイジング問題について詳しく述べた。本章では、イジング問題を一般化した量子アニーリングについて述べる。

2値整数変数の2次関数の最小値問題を考えるという点では、両者は一致している。一方、イジング問題の場合には、絶対温度0でエネルギー最小が物理的に保証されているが、量子アニーリングではこの点が保証されていない。

しかし、「量子アニーリングで得られた結果が最小値である確率が高い」とは言えるであろう。その意味で量子アニーリングは、最小値を求める近似的な方法と言えよう。

量子アニーリングには、「2値整数変数の2次関数の最小値問題の解法」という制約がある。この制約を外す努力が重要である。ニューラルネットワークの学習の可能性を開くことが最重要であろう。

量子力学の登場による大変革

古典力学…決定論的自然観

量子力学…非決定論的自然観

タバコモザイクウィルスの登場による大変革

結晶化でき、結晶も感染できる。

生命と非生命の境界があいまいになった。

ウィルスは生命ではない（生物は死、ウィルスは不活化）。

工学系と物理系の違い

機械工学系

ニュートンの
運動方程式

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = f$$

物理系

ハミルトンの
運動方程式

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

古典力学：弦の波動・振動の物理と数学

非加算無限自由度の波動（無限領域，質量が連続分布）

$$\rho \frac{\partial^2 \eta(x, t)}{\partial t^2} = T \frac{\partial^2 \eta(x, t)}{\partial x^2}, \quad -\infty < x < \infty, \quad 0 < t < \infty$$

$$\eta(x, t) = u(x), \quad \eta_t(x, t) = v(x), \quad \eta(\pm\infty, t) = 0, \quad |\eta_x(\pm\infty, t)| < \infty$$

$\eta(x, t) = Y(x)e^{-i\omega t}$ を仮定して

$$Y(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

分散方程式：

$$\rho\omega^2 = Tk^2$$

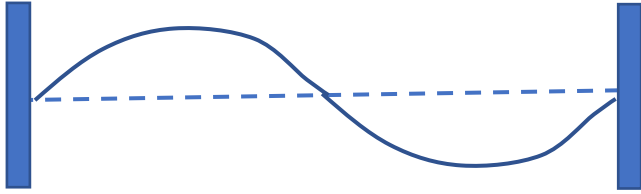
モード関数 $Y(x)$ の直交性：

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-ik'x} dx = \delta(k - k')$$

波動方程式の一般解： $V(x) = \int v(x) dx$ として

$$\eta(x, t) = f(x - ct) + g(x + ct) = \frac{1}{2} u(x - ct) + \frac{1}{2} u(x + ct) \\ - \frac{1}{2c} V(x - ct) + \frac{1}{2c} V(x + ct)$$

加算無限自由度の振動
(質量が連続分布)

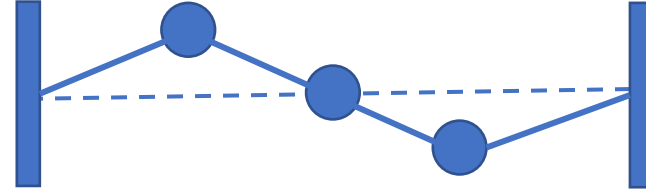


$$\rho \frac{\partial^2 \eta(x, t)}{\partial t^2} = T \frac{\partial^2 \eta(x, t)}{\partial x^2}, \quad \eta(0, t) = \eta(L, t) = 0$$

$$\eta(x, t) = Y(x) e^{-i\omega t} \quad \text{とすると}$$

$$-\frac{\rho}{T} \omega^2 Y = \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2}, \quad Y(0) = Y(L) = 0$$

有限自由度の振動
(質量が集中分布)



$$\begin{pmatrix} d^2 \eta_0(t) / dt^2 \\ d^2 \eta_1(t) / dt^2 \\ d^2 \eta_2(t) / dt^2 \end{pmatrix} = -\frac{T}{m\Delta x} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_0(t) \\ \eta_1(t) \\ \eta_2(t) \end{pmatrix}$$

$$\eta_i(t) = Y_i e^{-i\omega t} \quad \text{とすると}$$

$$\omega^2 \begin{pmatrix} Y_0 \\ Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} = \frac{T}{m\Delta x} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_0 \\ Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix}$$

固有値問題：

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{T} \omega^2 Y, \quad Y(0) = Y(L) = 0$$

加算無限個の振動モード

$$Y_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{(n+1)\pi}{L} x\right), \quad n = 0, 1, \dots, \infty$$

加算無限個の振動モードの周波数：

$$\omega_n^2 = \frac{1}{2m} \left(\frac{(n+1)\pi}{L} \right)^2, \quad n = 0, 1, \dots, \infty$$

固有値問題：

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_0 \\ Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix} = -\frac{m\Delta x}{T} \omega^2 \begin{pmatrix} Y_0 \\ Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix}$$

3個の振動モード

$$Y_n = (Y_{n0} \quad Y_{n1} \quad Y_{n2})^T, \quad n = 0, 1, 2$$

3個の振動モードの周波数：

$$\begin{vmatrix} \frac{m\Delta x}{T} \omega^2 - 2 & 1 & 0 \\ 1 & \frac{m\Delta x}{T} \omega^2 - 2 & 1 \\ 0 & 1 & \frac{m\Delta x}{T} \omega^2 - 2 \end{vmatrix} = 0$$

モードの正規直交性

$$(Y_m, Y_n) = \int_0^L Y_m(x) Y_n(x) dx = \delta_{mn}$$

弦の任意の変位

$$\eta(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) Y_n(x), \quad c_n(t) = (\eta, Y_n)$$

モード毎の振動方程式

$$\frac{d^2 c_n(t)}{dt^2} = -\omega_n^2 c_n(t) \quad n = 0, 1, \dots, \infty$$

モード毎の振動

$$c_n(t) = A_n \sin \omega_n t + B_n \cos \omega_n t, \\ n = 0, 1, \dots, \infty$$

モードの正規直交性

$$(Y_m, Y_n) = \sum_{i=0}^2 Y_{mi} Y_{ni} = \delta_{mn}$$

弦の任意の変位

$$\eta_i(t) = \sum_{n=0}^2 c_n(t) Y_{ni}, \quad c_n(t) = (\eta, Y_n)$$

モード毎の振動方程式

$$\frac{d^2 c_n(t)}{dt^2} = -\omega_n^2 c_n(t), \quad n = 0, 1, 2$$

モード毎の振動

$$c_n(t) = A_n \sin \omega_n t + B_n \cos \omega_n t \\ n = 0, 1, 2$$

運動エネルギー

$$K = \frac{\rho}{2} \int_0^L \left(\frac{\partial \eta(x, t)}{\partial t} \right)^2 dx = \frac{\rho}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{dc_n(t)}{dt} \right)^2$$

位置エネルギー

$$V = \frac{T}{2} \int_0^L \left(\frac{\partial \eta(x, t)}{\partial x} \right)^2 dx = \frac{\rho}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n^2 c_n^2(t)$$

全エネルギー

$$H = K + V$$

$$= \frac{\rho}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{dc_n(t)}{dt} \right)^2 + \frac{\rho}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \omega_n^2 c_n^2(t)$$

運動エネルギー

$$K = \frac{m}{2} \begin{pmatrix} d\eta_0(t)/dt & d\eta_1(t)/dt & d\eta_2(t)/dt \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d\eta_0(t)/dt \\ d\eta_1(t)/dt \\ d\eta_2(t)/dt \end{pmatrix}$$

位置エネルギー

$$V = \frac{1}{2} \frac{T}{\Delta x} \begin{pmatrix} \eta_0(t) & \eta_1(t) & \eta_2(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_0(t) \\ \eta_1(t) \\ \eta_2(t) \end{pmatrix}$$

全エネルギー

$$H = K + V$$

量子力学：1量子の運動（確率波）の物理と数学

非加算無限自由度の波動（無限領域，自由運動）

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \psi(x,t) = \hat{H} \psi(x,t), \quad -\infty < x < \infty, \quad 0 < t < \infty$$

$$\psi(\pm\infty, t) = 0, \quad |\psi_x(\pm\infty, t)| < \infty$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V \quad \text{where} \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad H = \frac{p^2}{2m} + V$$

$$\psi(x,t) = \Psi(x) e^{-i\omega t} \quad \text{を仮定して} \quad \Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \quad \text{とすると}$$

$$\text{分散方程式：} \quad \hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V$$

モード関数 $\Psi(x, k)$ の直交性：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, k) \Psi^*(x, k') dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} e^{-ik'x} dx = \delta(k - k')$$

波動方程式の一般解

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{ikx} e^{-i\omega(k)t}$$

$$\text{ここで} \quad \psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{ikx} \quad \text{at } t = 0 \quad \rightarrow \quad \phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, 0) e^{-ikx}$$

加算無限自由度の振動

(箱 $x \in [0, L]$ 中の自由粒子)

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(x, t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi(x, t)\rangle, \quad 0 < x < L$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V = \hat{p}^2 + V, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V$$

$$|\psi(x, t)\rangle = |\Psi(x)\rangle e^{-i\omega t} \quad \text{とすると}$$

$$\hbar\omega |\Psi(x)\rangle = \left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) |\Psi(x)\rangle,$$

$$|\Psi(0)\rangle = |\Psi(L)\rangle = 0$$

有限自由度の振動
(2準位原子)

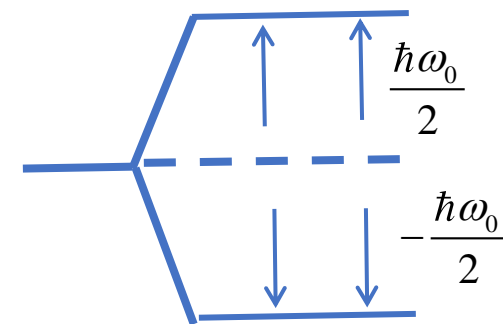
$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = c_0(t)|0\rangle + c_1(t)|1\rangle = \begin{pmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_0(t) \\ \dot{c}_1(t) \end{pmatrix} = \hat{H} \begin{pmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{pmatrix}, \quad \hat{H} = \begin{pmatrix} -\hbar\omega_0/2 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_0/2 \end{pmatrix}$$

$$c_n(t) = C_n e^{-i\omega t} \quad \text{とすると}$$

$$\hbar\omega \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\hbar\omega_0/2 & 0 \\ 0 & \hbar\omega_0/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$$



エネルギー準位

固有値問題：

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V\right)|\Psi(x)\rangle=\hbar\omega|\Psi(x)\rangle,$$
$$|\Psi(0)\rangle=|\Psi(L)\rangle=0$$

$V=0$ なら加算無限個の振動モード

$$|\Psi_n(x)\rangle=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{(n+1)\pi}{L}x\right),$$
$$n=0,1,\dots,\infty$$

加算無限個の振動モードの周波数：

$$\omega_n=\frac{1}{2m}\left(\frac{(n+1)\pi}{L}\right)^2$$

固有値問題：

$$\begin{pmatrix}-\hbar\bar{\omega}_0/2 & 0 \\ 0 & \hbar\bar{\omega}_0/2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_0 \\ c_1\end{pmatrix}=\hbar\omega\begin{pmatrix}c_0 \\ c_1\end{pmatrix}$$

2個の振動モード

$$|\psi_n(t)\rangle=\begin{pmatrix}c_{n0} \\ c_{n1}\end{pmatrix}e^{-i\omega_n t}, \quad n=0,1$$

2個の振動モードの周波数とモード：

$$\begin{vmatrix}\hbar(\omega+\bar{\omega}_0/2) & 0 \\ 0 & \hbar(\omega-\bar{\omega}_0/2)\end{vmatrix}=0\rightarrow\omega=\mp\frac{\bar{\omega}_0}{2}$$

$$|0\rangle=\begin{pmatrix}1 \\ 0\end{pmatrix}, \quad |1\rangle=\begin{pmatrix}0 \\ 1\end{pmatrix}$$

モードの正規直交性

$$(\Psi_m, \Psi_n) = \int_0^L \Psi_m(x) \Psi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

弦の任意の変位

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) \Psi_n(x), \quad c_n(t) = (\eta, \Psi_n)$$

モード毎の振動方程式

$$\frac{dc_n(t)}{dt} = -i\omega_n c_n(t)$$

モード毎の振動

$$c_n(t) = c_n(0)e^{-i\omega_n t}, \quad n = 0, 1, \dots, \infty$$

モードの正規直交性

$$(\Psi_m, \Psi_n) = \sum_{i=0}^1 \Psi Y_{mi} Y_{ni} = \delta_{mn}$$

電子の任意の状態

$$\psi(t) = \sum_{n=0}^1 c_n(t) \Psi_{ni}(t), \quad c_n(t) = (\psi, \Psi_n)$$

モード毎の振動方程式

$$\frac{dc_n(t)}{dt} = -i\omega_n c_n(t), \quad n = 0, 1$$

モード毎の振動

$$c_n(t) = c_n(0)e^{-i\omega_n t}, \quad n = 0, 1, 2$$

イジングモデル（結晶格子上的磁気スピン）

以上の議論は、1電子の運動などのような1量子に N 個の運動モード（自由電子の場合は $N = \text{infinite}$ ，原子の中の電子の場合は $N = \text{finite}$ ）がある場合に、それを個々のモードに分解する場合の議論である．量子計算機の場合には、1と-1（イジングモデル）あるいは0と1（クボモデル）という2個のモード（状態）を持った多数の量子の全体の状態が議論される．クボモデルの場合個々の量子の $(0,1)$ の重ね合わせ状態は、全体の量子全体 2^N では $|\Psi_n\rangle$ 個の：

$$(0,0,0,\dots,0,0), (1,0,0,\dots,0,0), (0,1,0,\dots,0,0), \dots, (0,1,1,\dots,1,1), (1,1,1,\dots,1,1)$$

の重ね合わせ状態になる．これらの状態に最初から番号付けをすると、括弧内の2進数（左から右に大きな桁）を10進数に読み替えた

$$0,1,2,\dots,2^N-2,2^N-1$$

となる．すなわち

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{2^N-1} c_n(t) |\Psi_n\rangle$$

イジングモデルの変数 σ とクボモデルの変数 q 変数変換

は

$$\sigma_i = 2q_i - 1, \quad q_i = \frac{1}{2}(\sigma_i + 1), \quad i = 0, 1, \dots, N$$

イジングモデルの1量子ビットは上述の2準位モデルやジョセフソン素子 (D-Waveの専用機に使われている素子. 極低温において, 薄い絶縁体を挟んだリング状の導体に時計方向と反時計方向の電流の重ね合わせが起きることを利用する素子) などと考える.

これらの素子が N 個組み合わせされた状態を図に示す. 組み合わせの結果, 2^N 個の基底 $|\Psi_n\rangle$ が生まれ, その全体の状態 $|\psi(t)\rangle$, はこれらの基底の重ね合わせとして以下のようなになる:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= c_0(t)|000\cdots 00\rangle + c_1(t)|100\cdots 00\rangle + c_2(t)|010\cdots 00\rangle + \\ &\quad \cdots + c_{2^N-2}(t)|011\cdots 11\rangle + c_{2^N-1}(t)|111\cdots 11\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{2^N-1} c_n(t) |\Psi_n\rangle \end{aligned}$$

数式で考えると

(2量子ビットの場合)

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= (C_{00}|0\rangle + C_{01}|1\rangle) \otimes (C_{10}|0\rangle + C_{11}|1\rangle) \\
 &= C_{00}C_{10}|0\rangle \otimes |0\rangle + C_{00}C_{11}|0\rangle \otimes |1\rangle + C_{01}C_{10}|1\rangle \otimes |0\rangle + C_{01}C_{11}|1\rangle \otimes |1\rangle \\
 &= c_0|00\rangle + c_1|01\rangle + c_2|10\rangle + c_3|11\rangle
 \end{aligned}$$

2量子ビットの直積(テンソル積)は $|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle$ を基底とする」 4次元の列ベクトル:

$$|00\rangle = |0\rangle_{(10)} = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle = |1\rangle_{(10)} = |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|01\rangle = |2\rangle_{(10)} = |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 0 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |11\rangle = |3\rangle_{(10)} = |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

基底 $|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle$ のエネルギーを
 E_0, E_1, E_2, E_3 とする系のハミルトニアンは
 で与えられる. 何故なら

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix}$$

$$(c_0 \quad c_1 \quad c_2 \quad c_3) \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = (c_0 \quad c_1 \quad c_2 \quad c_3) \begin{pmatrix} E_0 c_0 \\ E_1 c_1 \\ E_2 c_2 \\ E_3 c_3 \end{pmatrix} = E_0 c_0^2 + E_1 c_1^2 + E_2 c_2^2 + E_3 c_3^2$$

イジングモデルのハミルトニアン

ハミルトニアン \hat{H} について考える.



図 2量子ビットのエネルギー

イジングモデルの場合には, 2量子ビット (2スピン) の場合:

$$E = -J_{12}\sigma_1\sigma_2 - h_1\sigma_1 - h_2\sigma_2$$

ここで, J_{12} は, スピン間の相互作用を, h_1 と h_2 は横磁場の強さである. スピン1とスピン2の方向が同じで, スピンと横磁場の方向が同じときに, エネルギー E の値が小さいことを示す. このことは, 低温になりエネルギーの低い状態では, スピンの方向が横磁場の方向に整列することを意味する.

2量子ビットのエネルギーは

$$E_0 = E(|00\rangle) = -J_{12} - h_1 - h_2 \quad E_1 = E(|10\rangle) = J_{12} + h_1 - h_2$$

$$E_2 = E(|01\rangle) = J_{12} - h_1 + h_2 \quad E_3 = E(|11\rangle) = -J_{12} + h_1 + h_2$$

2量子ビットのハミルトニアンは

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_{00} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{10} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{01} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix}$$

1次元3量子ビットのエネルギーは：

$$\begin{aligned}
 E_0 &= E(|000\rangle) = -J_{12} - J_{23} - h_1 - h_2 - h_3 & E_1 &= E(|100\rangle) = J_{12} - J_{23} + h_1 - h_2 - h_3 \\
 E_2 &= E(|010\rangle) = J_{12} + J_{23} - h_1 + h_2 - h_3 & E_3 &= E(|110\rangle) = -J_{12} + J_{23} + h_1 + h_2 - h_3 \\
 E_4 &= E(|001\rangle) = -J_{12} + J_{23} - h_1 - h_2 + h_3 & E_5 &= E(|101\rangle) = J_{12} + J_{23} + h_1 - h_2 + h_3 \\
 E_6 &= E(|011\rangle) = J_{12} - J_{23} - h_1 + h_2 + h_3 & E_7 &= E(|111\rangle) = -J_{12} - J_{23} + h_1 + h_2 + h_3
 \end{aligned}$$

3量子ビットのハミルトニアンは：

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & & & & & & \\ & E_1 & & & & & \\ & & E_2 & & & & \\ & & & E_3 & & & \\ & & & & E_4 & & \\ & & & & & E_5 & \\ & & & & & & E_6 \\ & & & & & & & E_7 \end{pmatrix}$$

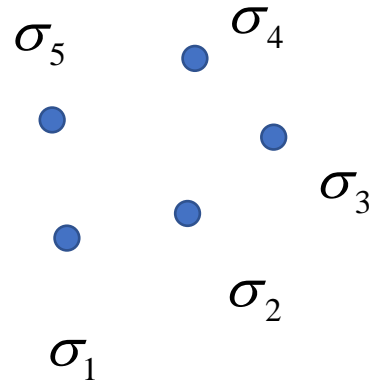


図 2量子ビットイジングモデルのエネルギー

一般に N 量子ビットのエネルギーは：
$$E_n = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{2^N-1} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=0}^{2^N-1} h_i \sigma_i$$

一般に N 量子ビットのハミルトニアンは：
$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & E_{2^N-1} \end{pmatrix} \quad (\text{f0})$$

クボモデルのハミルトニアン

下記のような目的関数 F をクボモデルのエネルギーと考えた最小値問題を考える：

$$F(q_0, q_1, \dots, q_{N-1}) = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} a_{ij} q_i q_j + \sum_{i=0}^{N-1} b_i q_i \quad (\text{f1})$$

これらの素子が N 個組み合わせされた状態を以下に示す。組み合わせの結果、 2^N 個の基底 $|\Psi_n\rangle$ が生まれ、その全体の状態 $|\psi(t)\rangle$ はこれらの基底の重ね合わせとして以下のようなになる：

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle = & c_0(t) |000 \dots 00\rangle + c_1(t) |100 \dots 00\rangle + c_2(t) |010 \dots 00\rangle + \\ & \dots + c_{2^N-2}(t) |011 \dots 11\rangle + c_{2^N-1}(t) |111 \dots 11\rangle = \sum_{n=0}^{2^N-1} c_n(t) |\Psi_n\rangle \end{aligned}$$

この場合の計算点は基底に他ならないので，基底における F の値を求め，その中の最小点を量子力学に従って，自律的に求めればよいことになる．

例えば，基底 $|\Psi_2\rangle = |010\cdots 00\rangle$ における値は $F(010\cdots 00)$ とすればよい．

従って，ハミルトニアン \hat{H} は

$$E_0 = F(|\Psi_0\rangle) = F(000\cdots 00)$$

$$E_1 = F(|\Psi_1\rangle) = F(100\cdots 00)$$

$$E_2 = F(|\Psi_2\rangle) = F(010\cdots 00)$$

\vdots

$$E_{2^N-2} = F(|\Psi_{2^N-2}\rangle) = F(011\cdots 11)$$

$$E_{2^N-1} = F(|\Psi_{2^N-1}\rangle) = F(111\cdots 11)$$

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & E_{2^N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & E_{2^N-1} \end{pmatrix} \quad (\text{f2})$$

量子アニーリング

自律的な最小点の追及は，以下のような量子アニーリングを含んだシュレディンガーの方程式を解く：

$$i\hbar \frac{dc}{dt} = \left[\left(1 - \frac{t}{\tau}\right) H_A + \frac{t}{\tau} H_B \right] c, \quad 0 < t < \varsigma$$

ここで

$$c = \left(c_0, c_1, c_2, \dots, c_{2^N-2}, c_{2^N-1} \right)^T$$

τ ： アニーリングに必要な時間

\hat{H}_A ： かき混ぜ効果を行うハミルトニアン→次ページ

\hat{H}_B ： 式(f0)や式(f2)で与えられる最小値を産み出す本来のハミルトニアン→次ページ

$N = 2$ の場合

パウリ行列 $-X$ を左右反転, 上下反転で作る

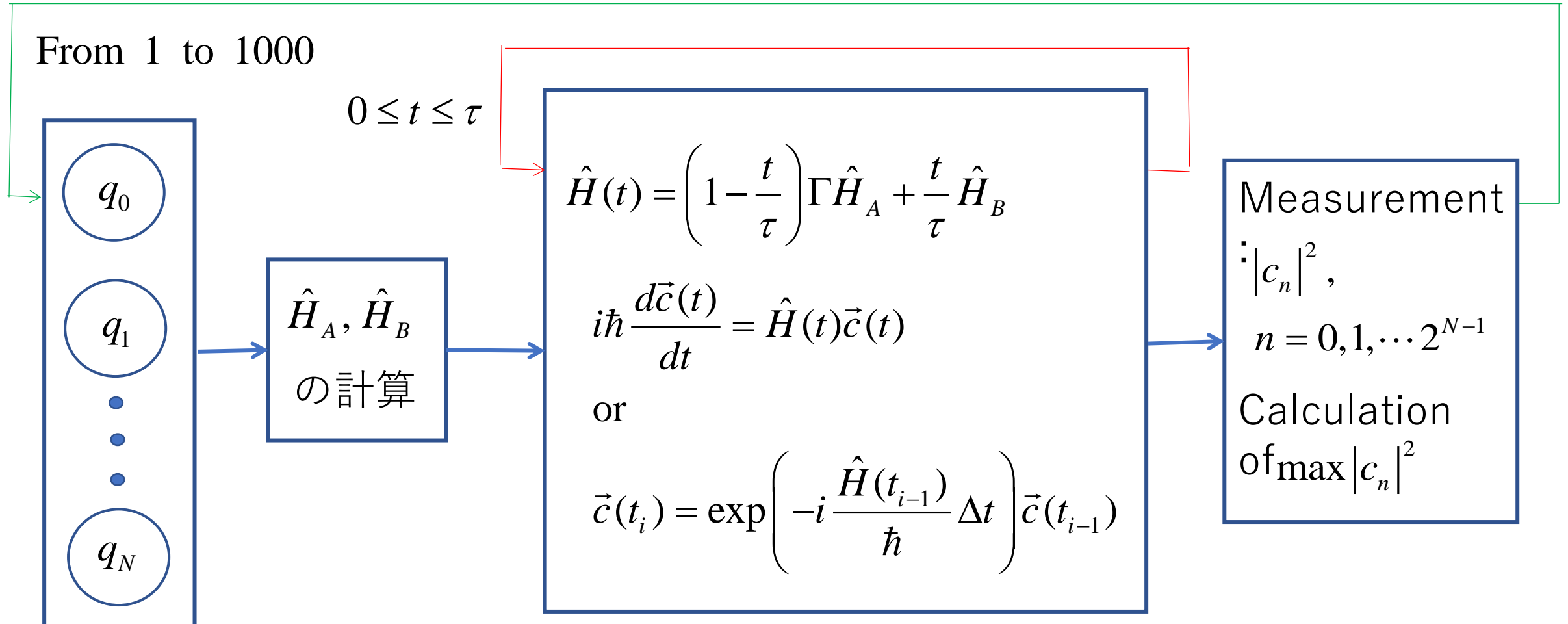
$$\hat{H}_A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$N = 3$ の場合

$N=2$ の \hat{H}_A を左右反転, 上下反転で作る

$$\hat{H}_A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

D-Waveの量子アニーリング計算法の推定



イジングモデルの数値計算例

2磁気スピン（2量子ビット），磁場のある場合とない場合
既に前章で示されているが，再び示す．

2量子ビット
のシュレディ
ンガー方程式

$$\begin{pmatrix} dc_0/dt \\ dc_1/dt \\ dc_2/dt \\ dc_3/dt \end{pmatrix} = -\frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

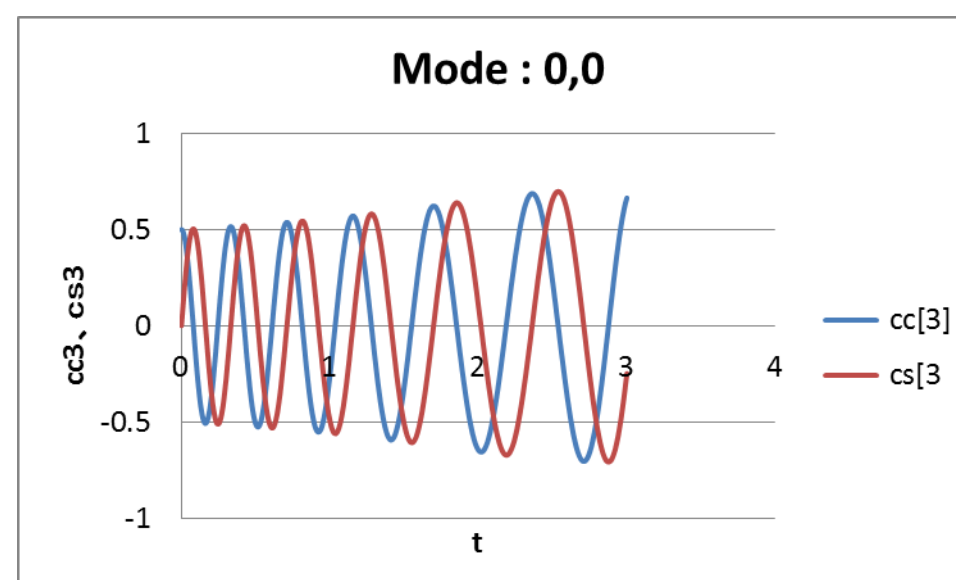
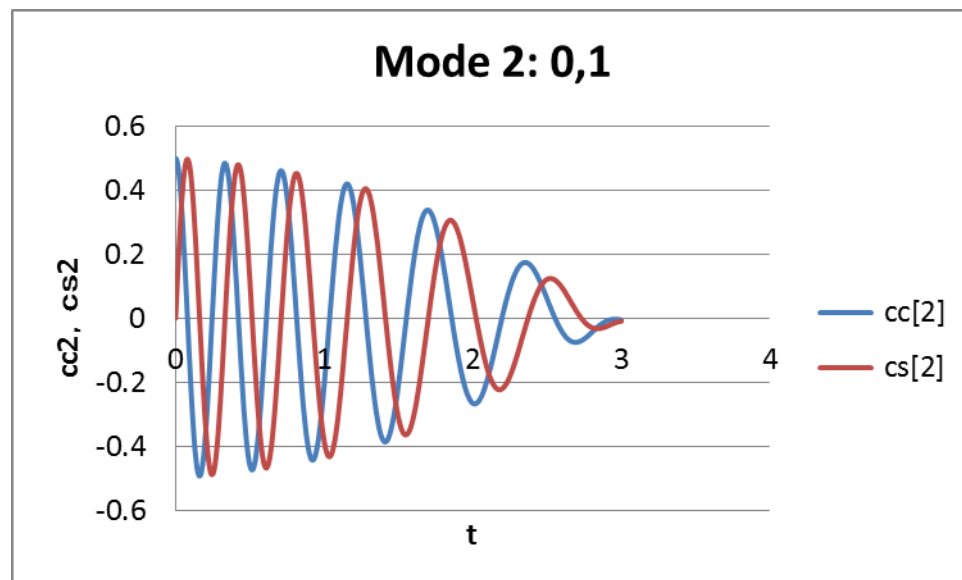
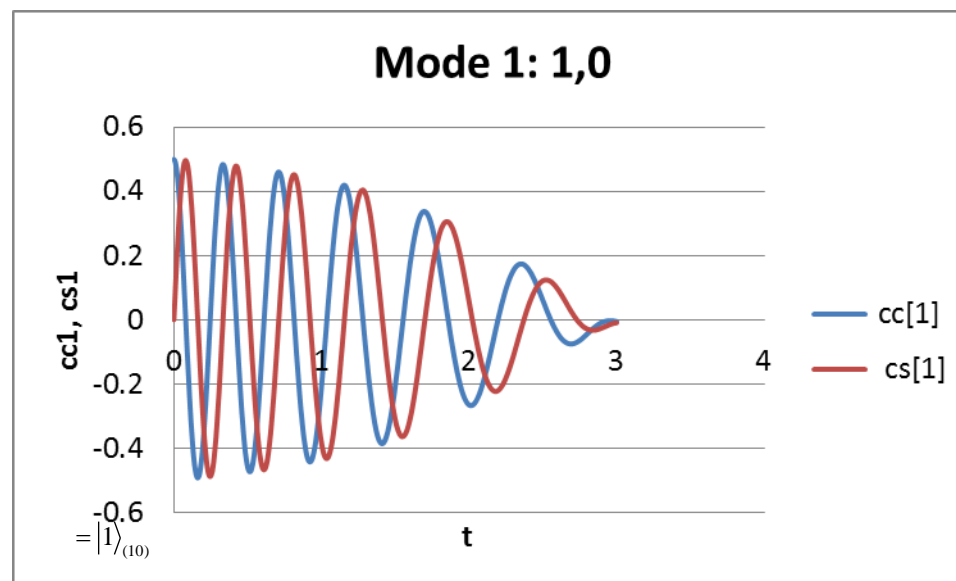
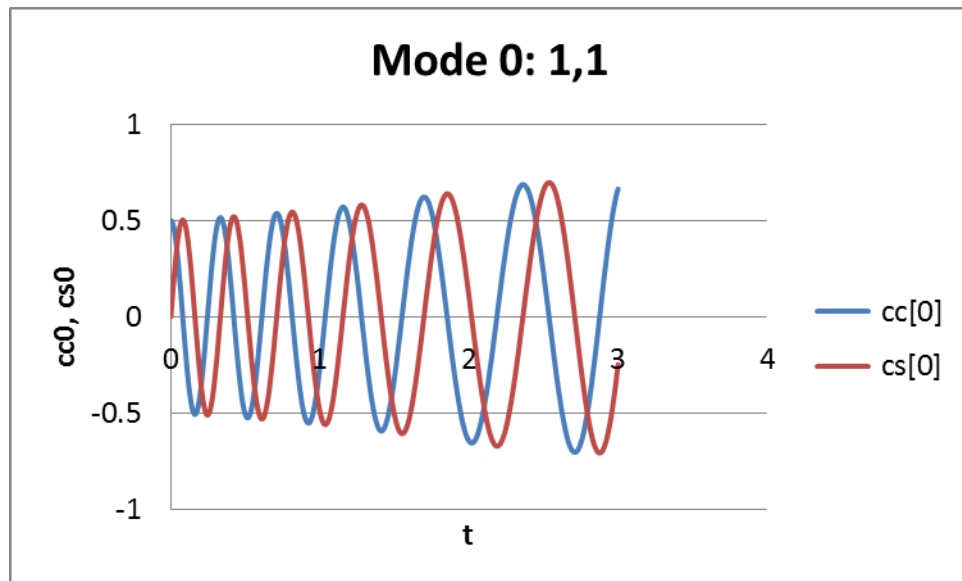
実部

$$\begin{pmatrix} dc_{0c}/dt \\ dc_{1c}/dt \\ dc_{2c}/dt \\ dc_{3c}/dt \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{0s} \\ c_{1s} \\ c_{2s} \\ c_{3s} \end{pmatrix}$$

虚部

$$\begin{pmatrix} dc_{0s}/dt \\ dc_{1s}/dt \\ dc_{2s}/dt \\ dc_{3s}/dt \end{pmatrix} = -\frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} -J_{12} - h_1 - h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & J_{12} + h_1 - h_2 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & J_{12} - h_1 + h_2 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & -J_{12} + h_1 + h_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{0c} \\ c_{1c} \\ c_{2c} \\ c_{3c} \end{pmatrix}$$

2スピンの数値計算結果1 (磁場なし) 時間発展



磁場なし

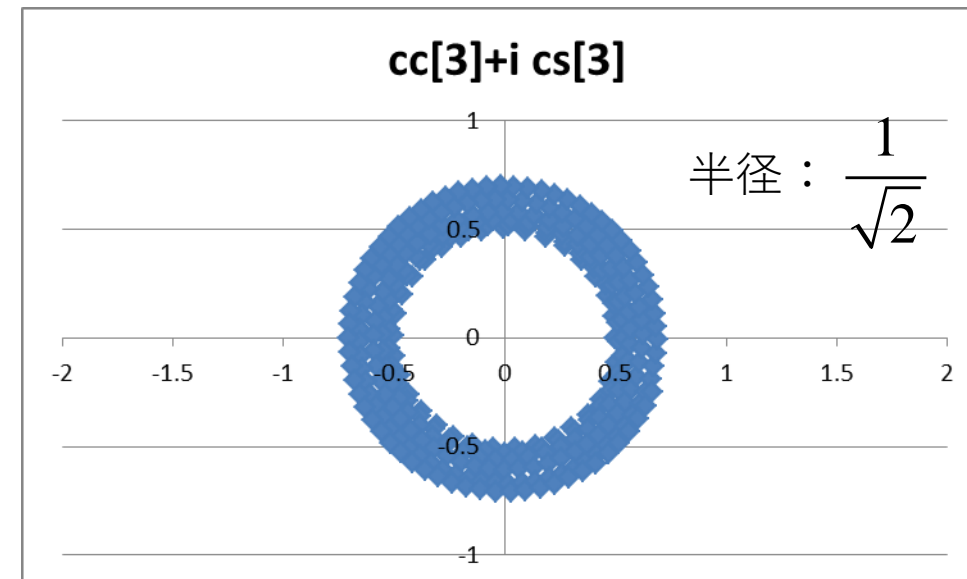
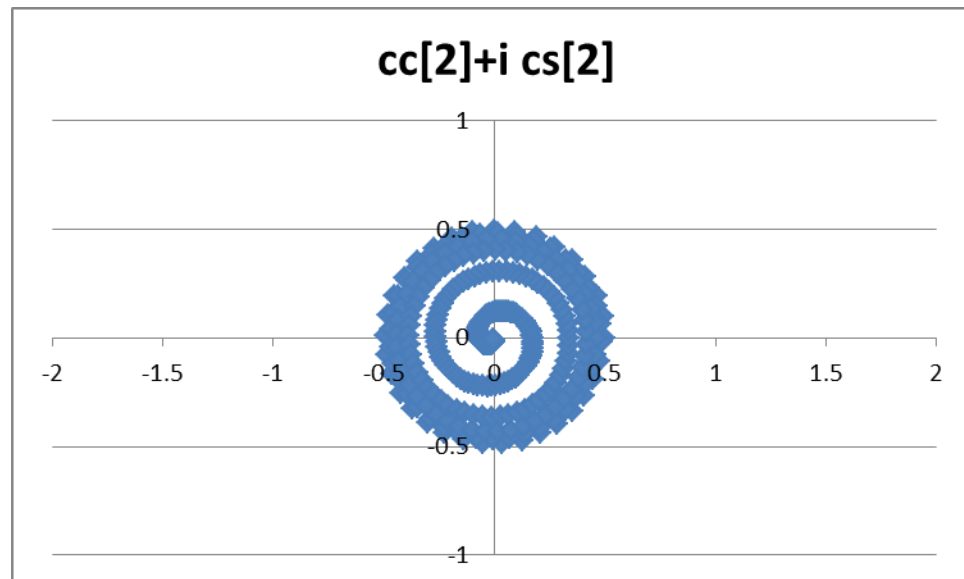
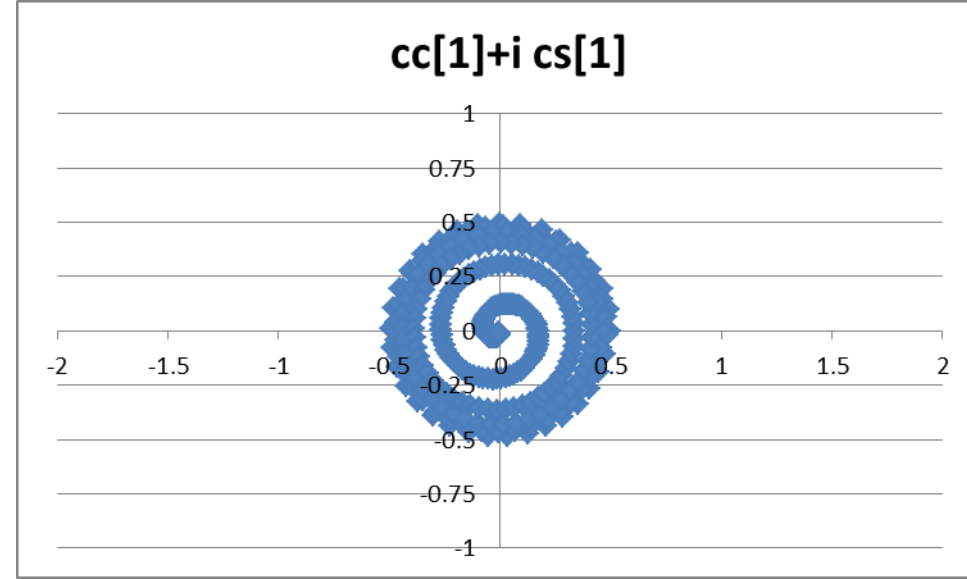
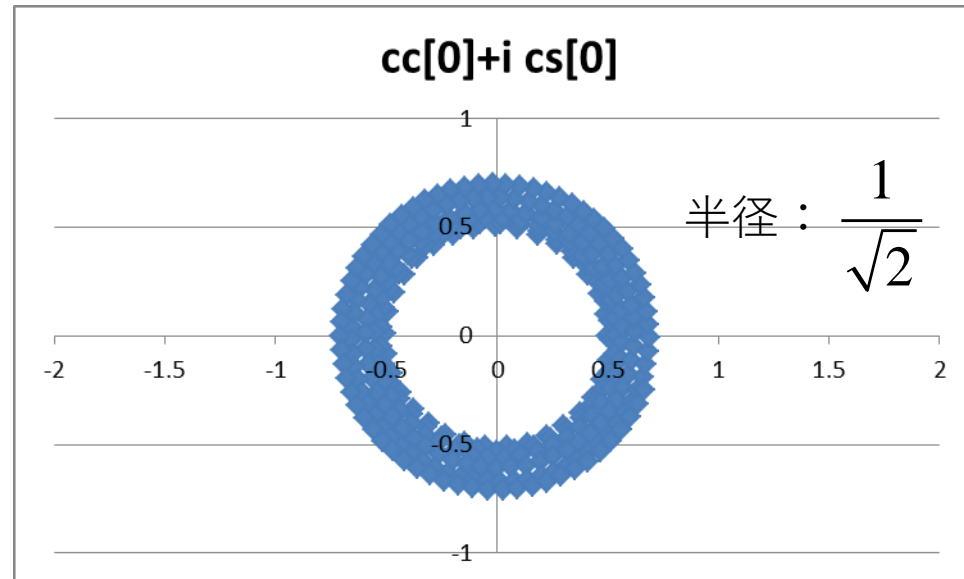
$$J_{12} = 1$$

$$h_1 = 0$$

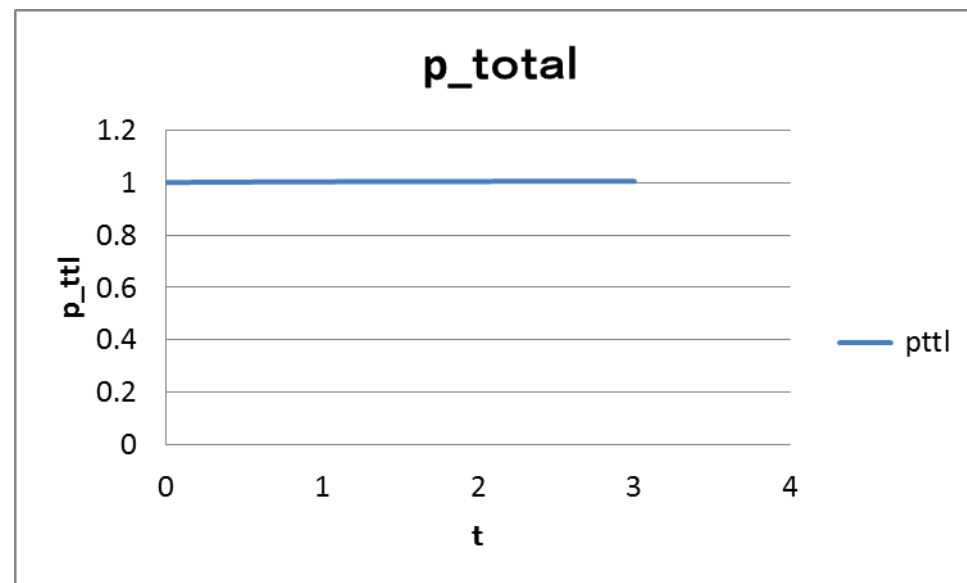
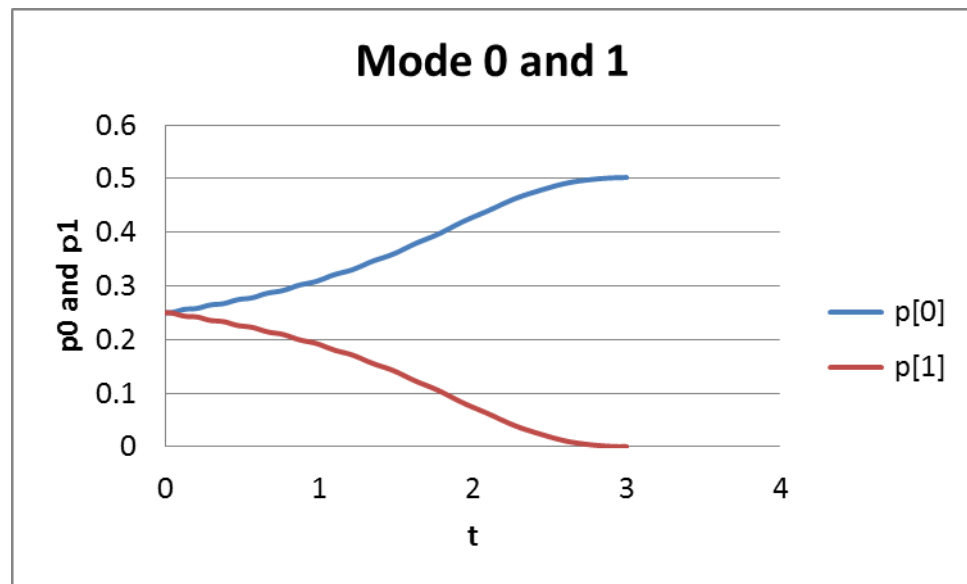
$$h_2 = 0$$

$$\hbar = 0.1$$

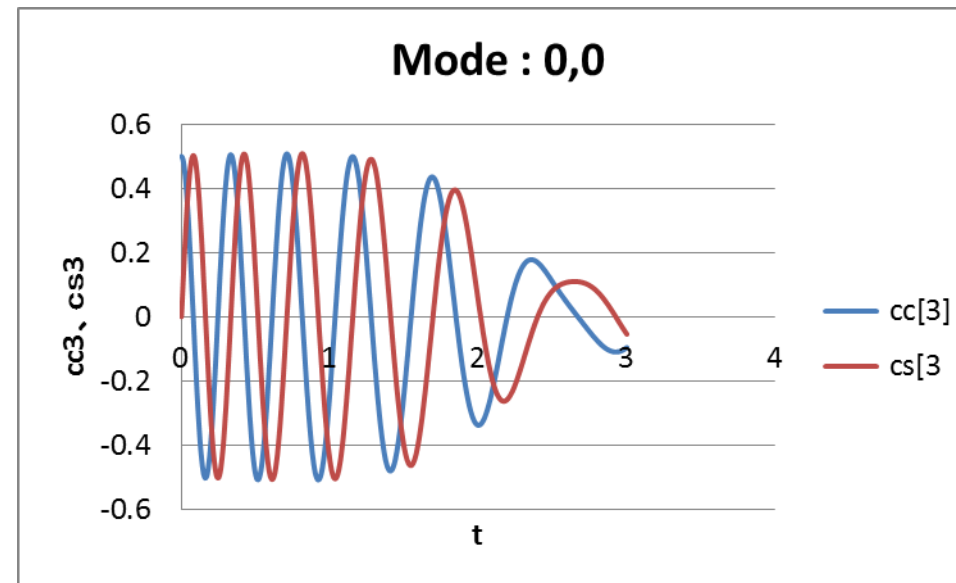
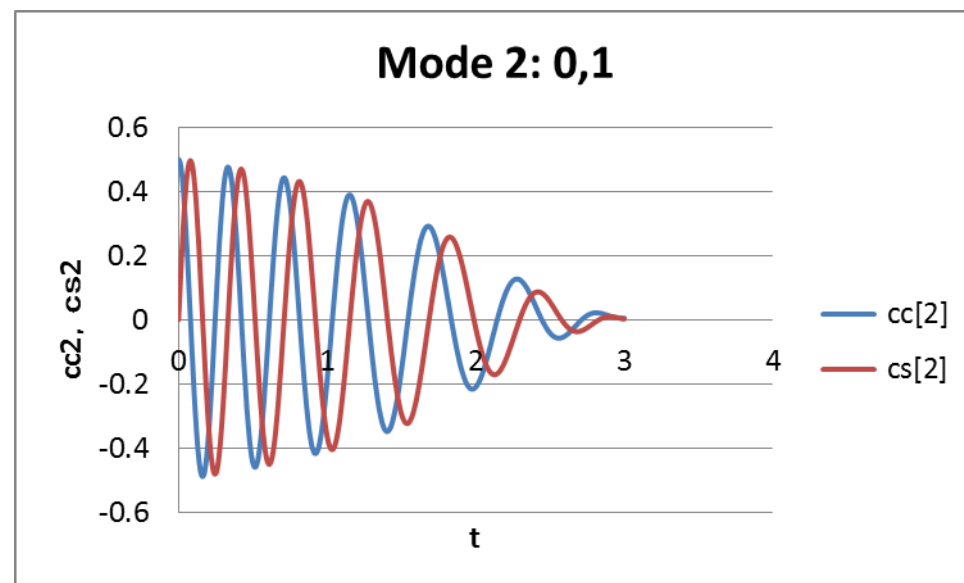
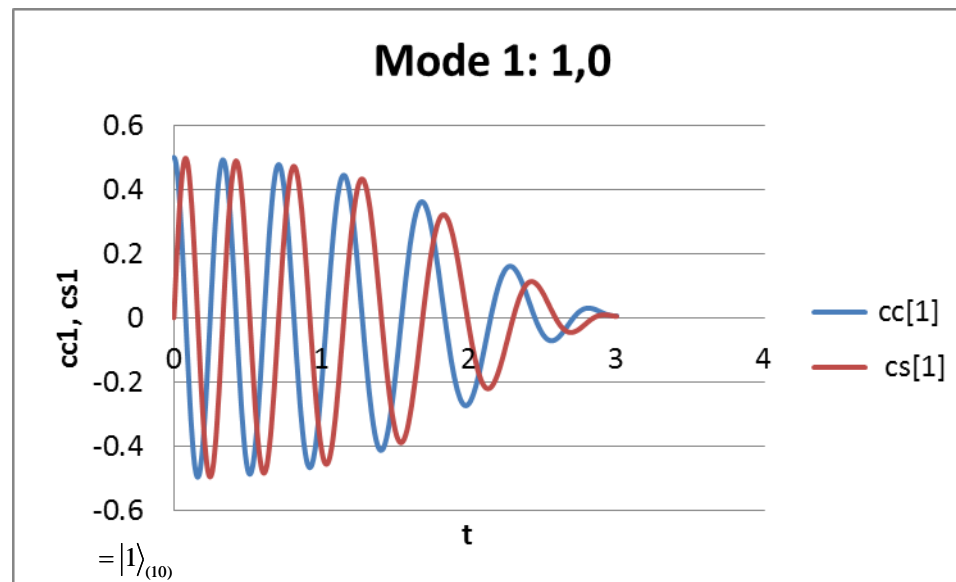
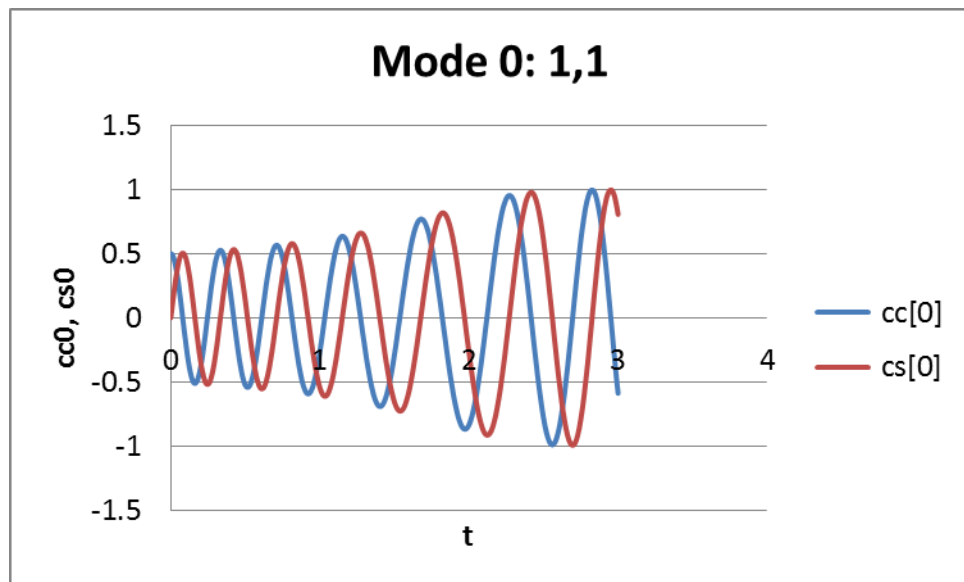
複素表示



確率



2スピンの数値計算結果2（上向き磁場あり） 時間発展



上向き磁場
あり

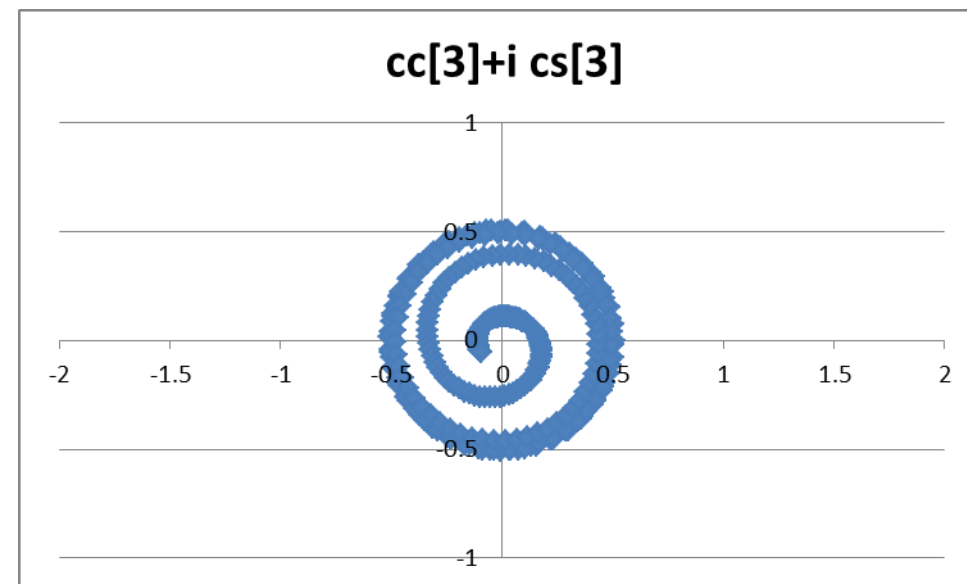
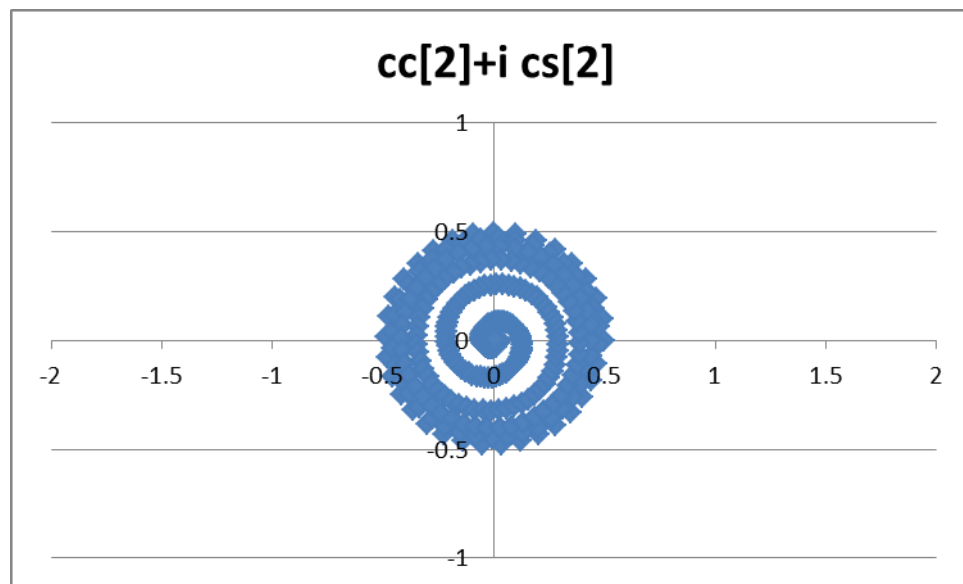
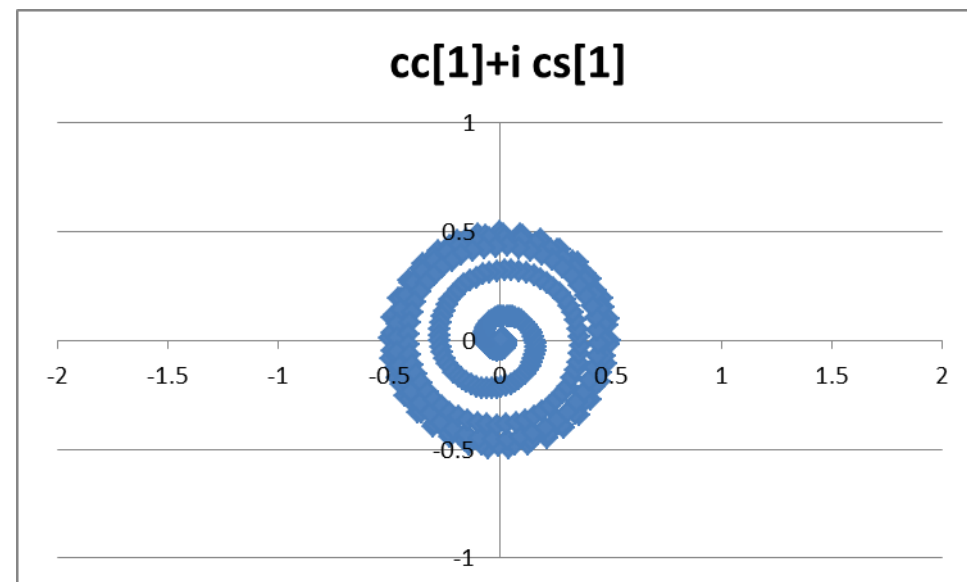
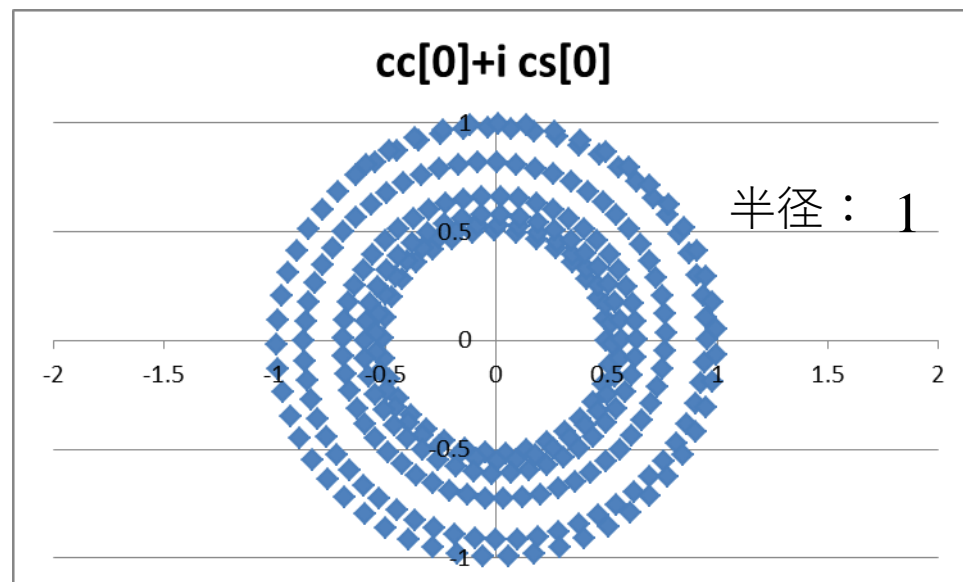
$$J_{12} = 1$$

$$h_1 = 0.3$$

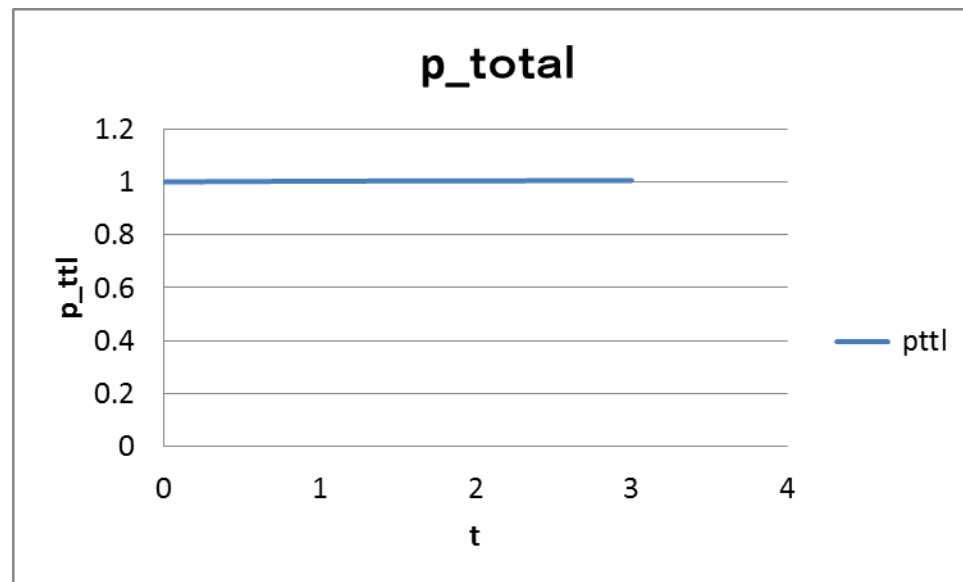
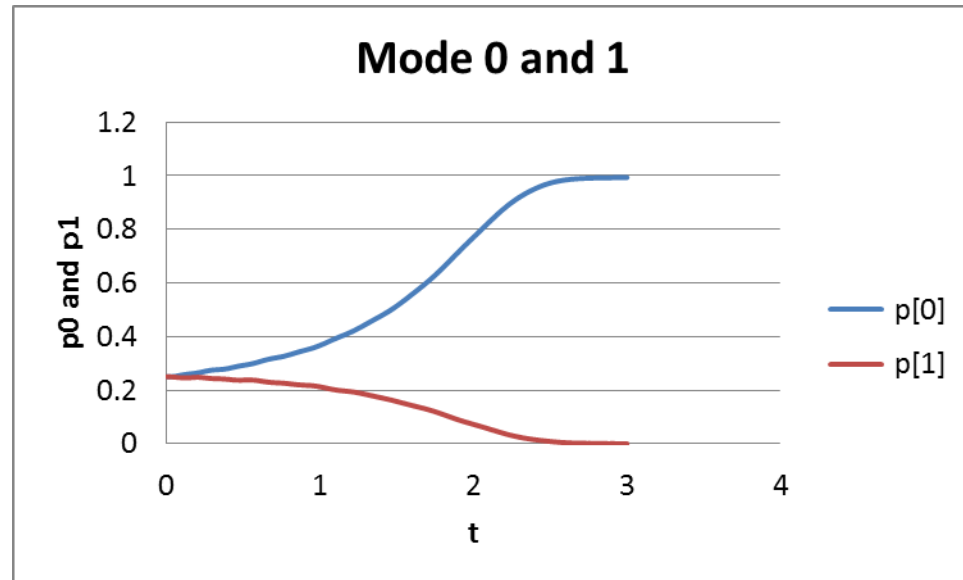
$$h_2 = 0$$

$$\hbar = 0.1$$

複素表示



確率



量子アニーリングの拡張

現在の量子アニーリングでできること

2値変数の2次関数の最小値：
$$\min_{\mathbf{x} \in [0,1]^n} \left(a + \sum_{i=0}^{n-1} b_i x_i + \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-1} c_{ij} x_i x_j \right)$$

この制約を取り除くことが必要である.

この制約が外せると，量子計算の世界が一挙に広がる．ニューラルネットワークの学習の可能性を開くことが最重要であろう．

そのために取り組むべき課題は三つあるが二，三番目の課題は開発課題である：

- (1) 10進変数の2進変数への変換
- (2) 10進連続変数の2進変数近似
- (3) 2次関数でない一般の関数の2次関数近似

2キュービットの場合

$$p = \sum_{\rho=0}^1 2^{\rho} q_{\rho}, \quad p^2 = \sum_{\rho=0}^1 2^{\rho} q_{\rho} \sum_{\sigma=0}^1 2^{\sigma} q_{\sigma} = \sum_{\rho=0}^1 \sum_{\sigma=0}^1 2^{\rho+\sigma} q_{\rho} q_{\sigma}$$

$$f(p) = (p-a)^2 = a^2 - 2ap + p^2 = a^2 - 2a \sum_{\rho=0}^1 2^{\rho} q_{\rho} + \sum_{\rho=0}^1 \sum_{\sigma=0}^1 2^{\rho+\sigma} q_{\rho} q_{\sigma}$$

$$p = \sum_{\rho=0}^1 2^{\rho} q_{\rho} = q_0 + 2q_1, \quad p^2 = q_0^2 + 4q_1^2 + 4q_0q_1 = q_0 + 4q_1 + 4q_0q_1$$

$$f(p) = (p-a)^2 = a^2 - 2a(q_0 + 2q_1) + (q_0 + 4q_1 + 4q_0q_1) = a^2 - (2a-1)q_0 - (4a-4)q_1 + 4q_0q_1$$

$$p = 0 = (0,0), \quad E_{11} = f(0) = f(0,0) = a^2$$

$$p = 1 = (1,0), \quad E_{01} = f(1) = f(1,0) = 1 - 2a + a^2$$

$$p = 2 = (0,1), \quad E_{10} = f(2) = f(0,1) = 4 - 4a + a^2$$

$$p = 3 = (1,1), \quad E_{00} = f(3) = f(1,1) = 9 - 6a + a^2$$

a=1.7

p=(q0,q1)	E
0=(0,0)	2.89
1=(1,0)	0.49
2=(0,1)	0.09
3=(1,1)	1.69

量子アニーリング

$H_{QA}(t) = A(t)\Gamma H_A(t) + B(t)H_B(t)$

$A(t) = 1 - \frac{t}{\tau} \quad B(t) = \frac{t}{\tau}$

$H_{QA}(0) = H_A \quad H_{QA}(\tau) = H_B$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \frac{dc_0}{dt} \\ \frac{dc_1}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dc_{2N-1}}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cdots & 0 & \cdots & E_{2N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{2N-1} \end{pmatrix}$$

$$H_A = \Gamma_A \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$H_B = \begin{pmatrix} 2.89 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.09 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.49 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1.69 \end{pmatrix}$$

初期条件: $|\psi_{t=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^2}} (1 \quad 1 \quad 1 \quad 1)^T$

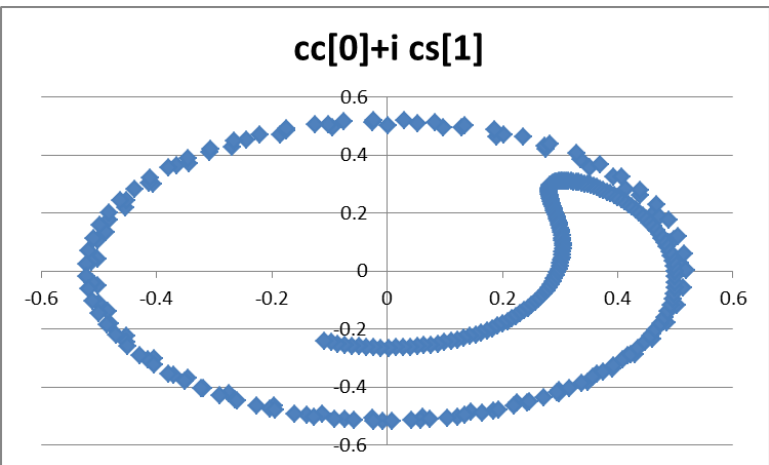
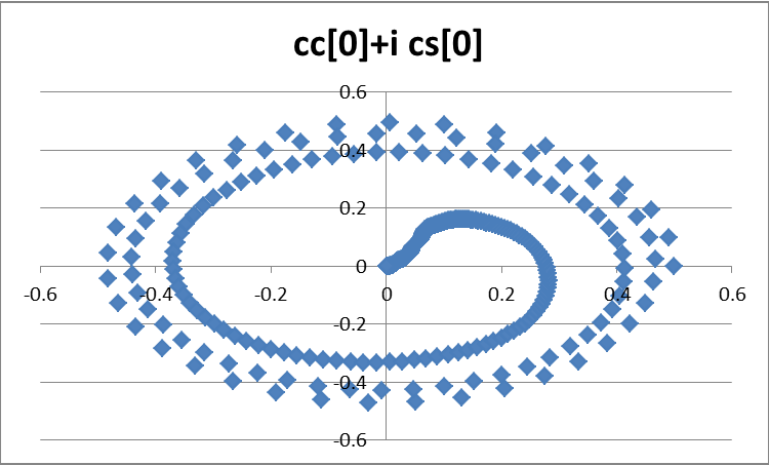
a=1.7

p=(q0,q1)	E
0=(0,0)	2.89
1=(1,0)	0.49
2=(0,1)	0.09
3=(1,1)	1.69

$$\begin{pmatrix} dc_0/dt \\ dc_1/dt \\ dc_2/dt \\ dc_3/dt \end{pmatrix} = -\frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} 2.89 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0.09 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & 0.49 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 1.69 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

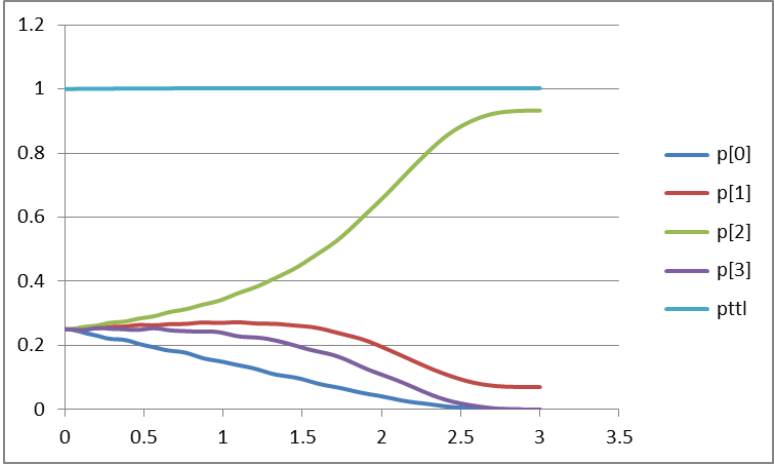
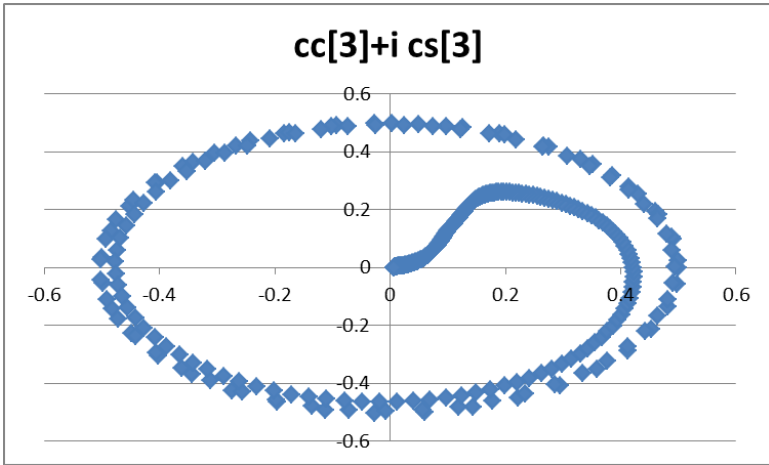
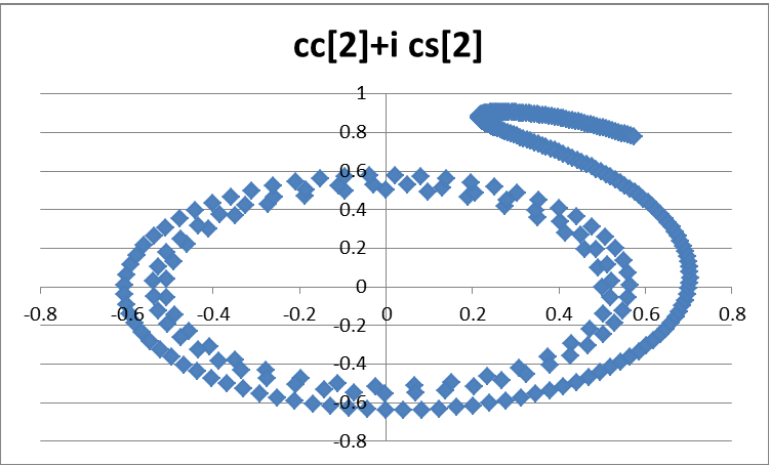
$$\begin{pmatrix} dc_{0c}/dt \\ dc_{1c}/dt \\ dc_{2c}/dt \\ dc_{3c}/dt \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 2.89 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0.09 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & 0.49 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 1.69 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{0s} \\ c_{1s} \\ c_{2s} \\ c_{3s} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} dc_{0s}/dt \\ dc_{1s}/dt \\ dc_{2s}/dt \\ dc_{3s}/dt \end{pmatrix} = -\frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 2.89 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 0 \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0.09 & 0 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ -\Gamma(1-t/\tau) & 0 & 0.49 & -\Gamma(1-t/\tau) \\ 0 & -\Gamma(1-t/\tau) & -\Gamma(1-t/\tau) & 1.69 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{0c} \\ c_{1c} \\ c_{2c} \\ c_{3c} \end{pmatrix}$$

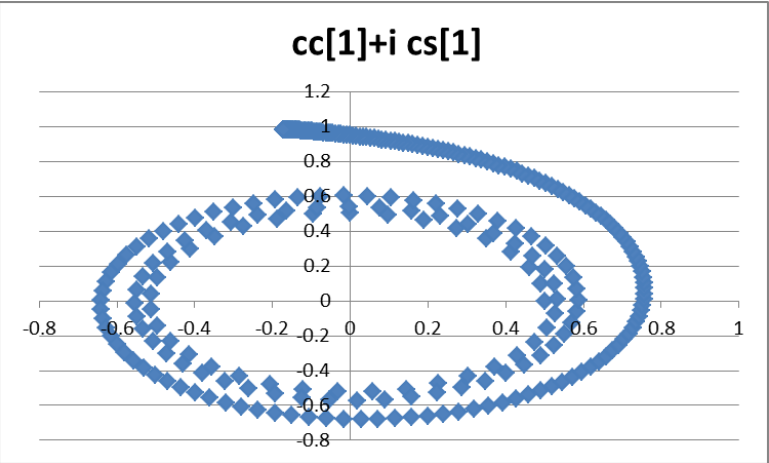
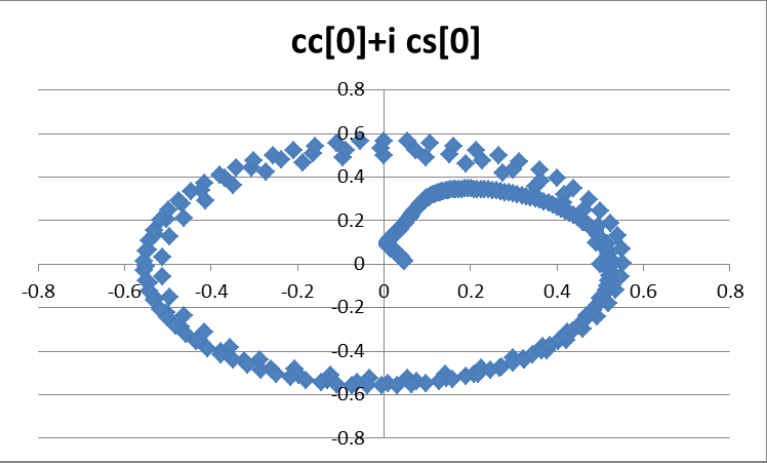


$p=(q_0,q_1)$	E
$0=(0,0)$	2.89
$1=(1,0)$	0.49
$2=(0,1)$	0.09
$3=(1,1)$	1.69

$$a=1.7$$

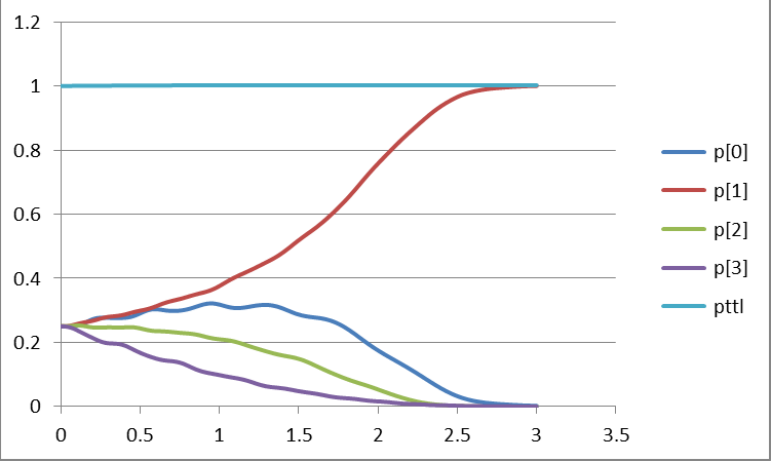
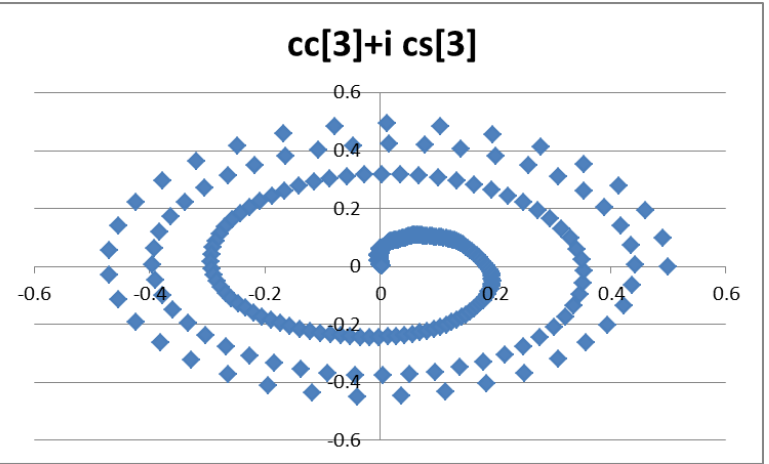
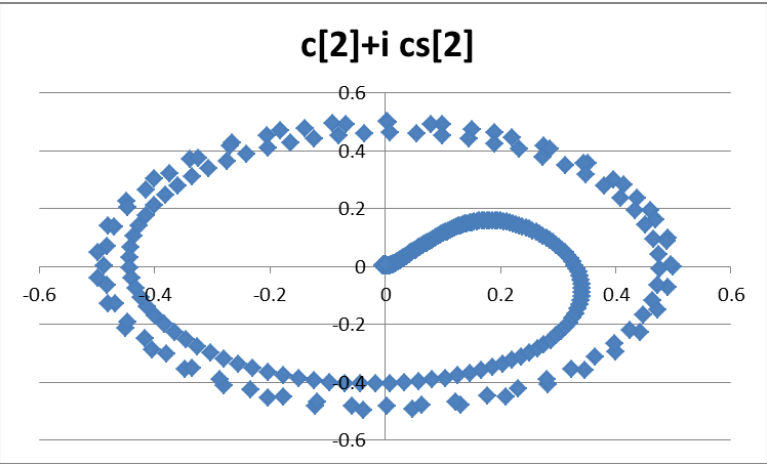


$$a=1.7$$



$p=(q_0,q_1)$	E
$0=(0,0)$	1.00
$1=(1,0)$	0.00
$2=(0,1)$	1.00
$3=(1,1)$	4.00

$a=1.0$



$a=1.0$

3キュービットの場合

$$p = \sum_{\rho=0}^2 2^{\rho} q_{\rho} = q_0 + 2q_1 + 4q_2,$$

$$p^2 = q_0^2 + 4q_1^2 + 16q_2^2 + 4q_0q_1 + 16q_1q_2 + 8q_2q_0 = q_0 + 4q_1 + 16q_2 + 4q_0q_1 + 16q_1q_2 + 8q_2q_0$$

$$\begin{aligned} f(p) &= (p-a)^2 = a^2 - 2a(q_0 + 2q_1 + 4q_2) + (q_0 + 4q_1 + 16q_2 + 4q_0q_1 + 16q_1q_2 + 8q_2q_0) \\ &= a^2 - (2a-1)q_0 - (4a-4)q_1 - (8a-16)q_2 + 4q_0q_1 + 16q_1q_2 + 8q_2q_0 \end{aligned}$$

$$E_{000} = E_0 = f(0,0,0) = a^2,$$

$$E_{100} = E_1 = f(1,0,0) = 1 - 2a + a^2$$

$$E_{010} = E_2 = f(0,1,0) = 4 - 4a + a^2,$$

$$E_{110} = E_3 = f(1,1,0) = 9 - 6a + a^2$$

$$E_{001} = E_4 = f(0,0,1) = 16 - 8a + a^2,$$

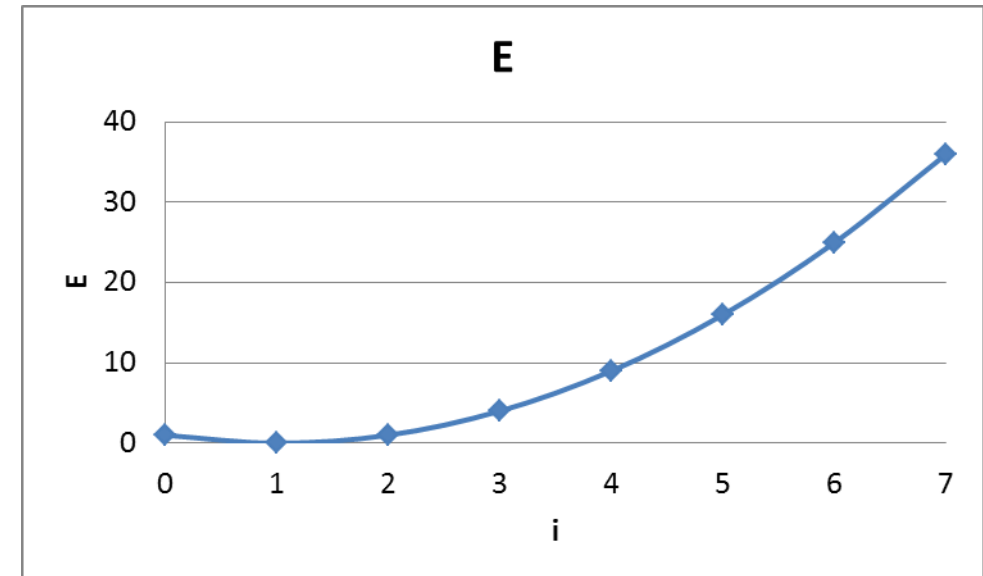
$$E_{101} = E_5 = f(1,0,1) = 25 - 10a + a^2$$

$$E_{011} = E_6 = f(0,1,1) = 36 - 12a + a^2,$$

$$E_{111} = E_7 = f(1,1,1) = 49 - 14a + a^2$$

$a=3.7$

p		$P=(q_0,q_1,q_2)$	E
0	E000	$0=(0,0,0)$	1.0
1	E100	$1=(1,0,0)$	0.0
2	E010	$2=(0,1,0)$	1.0
3	E110	$3=(1,1,0)$	4.0
4	E001	$4=(0,0,1)$	9.0
5	E101	$5=(1,0,1)$	16.0
6	E011	$6=(0,1,1)$	25.0
7	E111	$7=(1,1,1)$	36.0



$$i\hbar \begin{pmatrix} \frac{dc_0}{dt} \\ \frac{dc_1}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dc_{2N-1}}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \cdots & 0 & \cdots & E_{2N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{2N-1} \end{pmatrix}$$

量子アニーリング

$$H_{QA}(t) = A(t)\Gamma H_A(t) + B(t)H_B(t)$$

$$A(t) = 1 - \frac{t}{\tau} \quad B(t) = \frac{t}{\tau}$$

$$H_{QA}(0) = H_A \quad H_{QA}(\tau) = H_B$$

$$H_A(t) = \Gamma \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad H_B(t) = \begin{pmatrix} E_{000} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{100} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{010} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{110} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{001} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{101} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{011} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{111} \end{pmatrix}$$

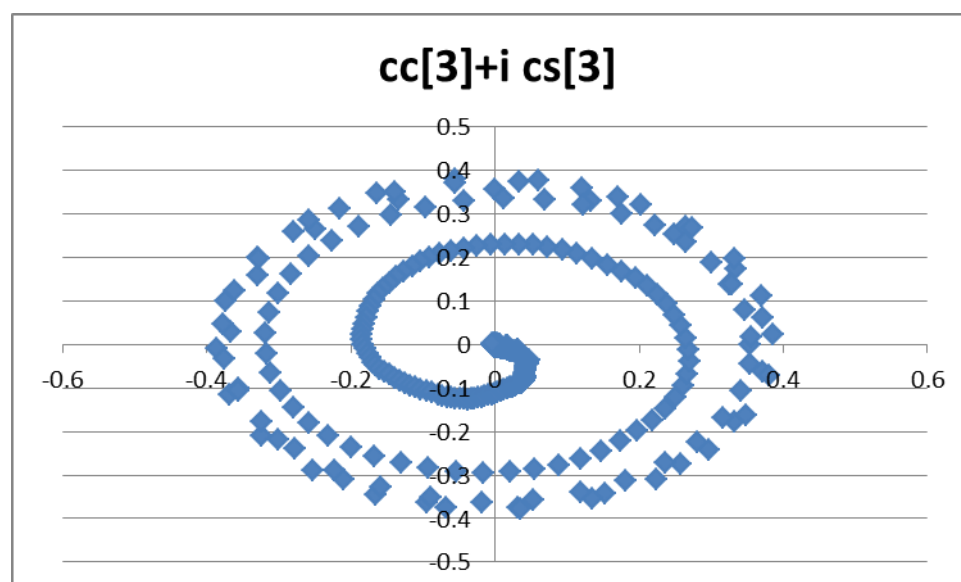
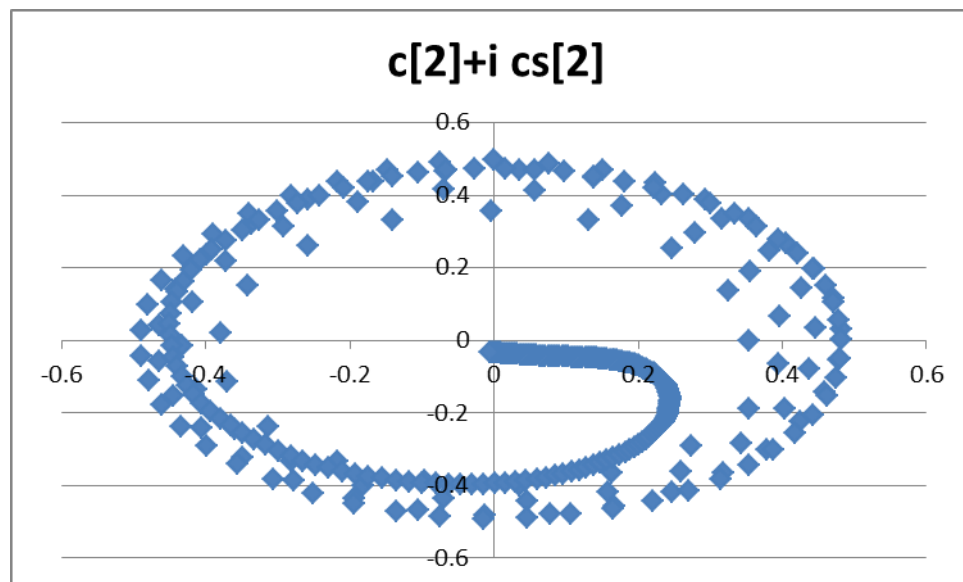
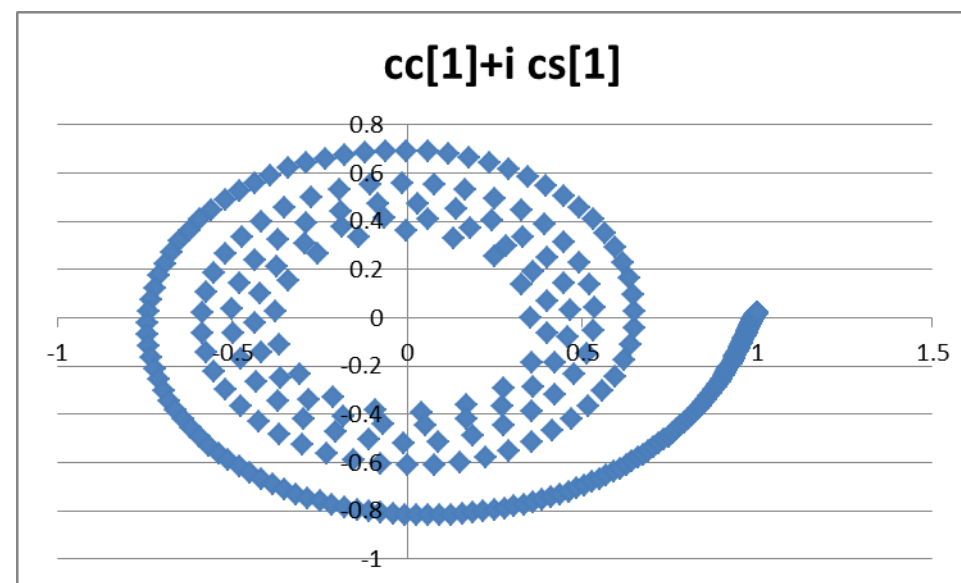
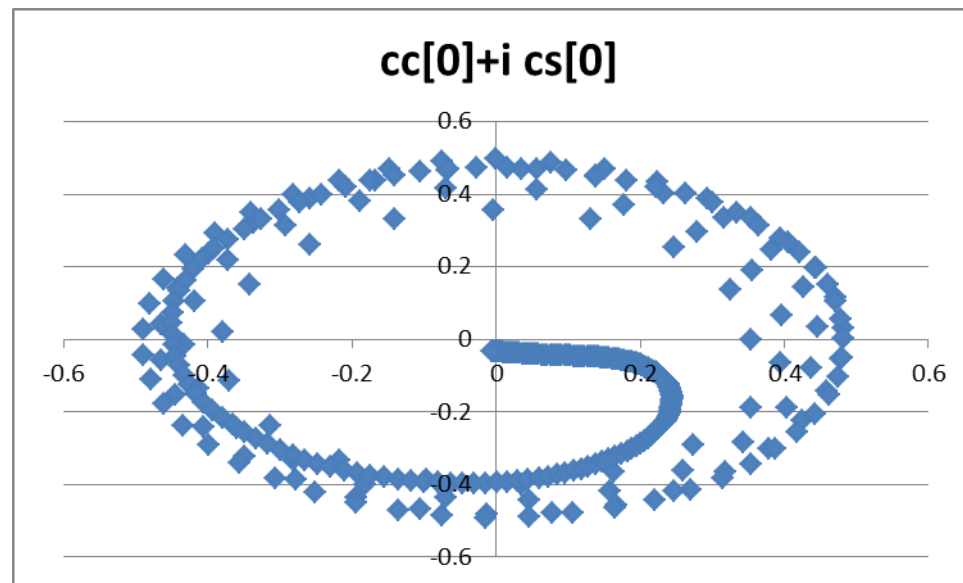
$$\text{初期条件: } |\psi_{t=0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^3}} (1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1)^T$$

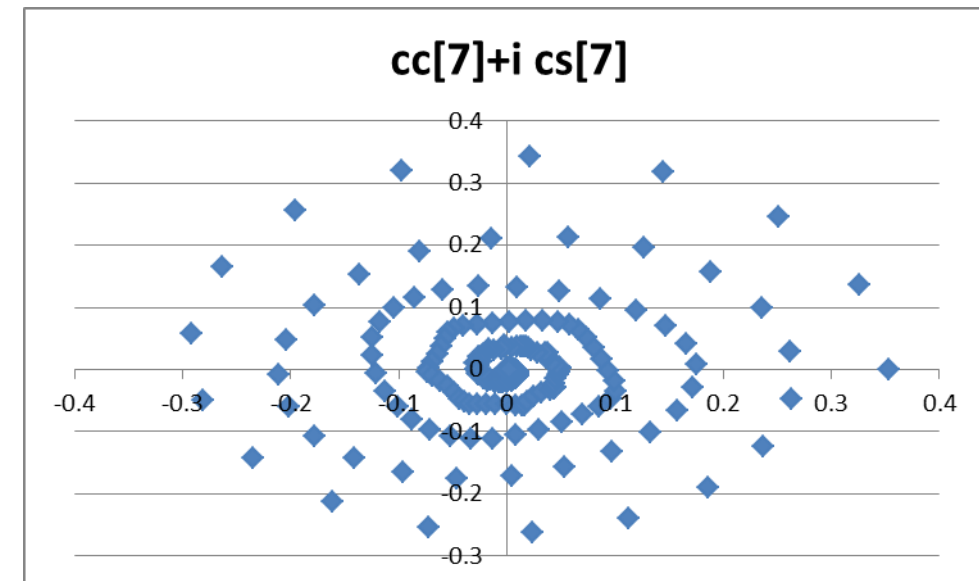
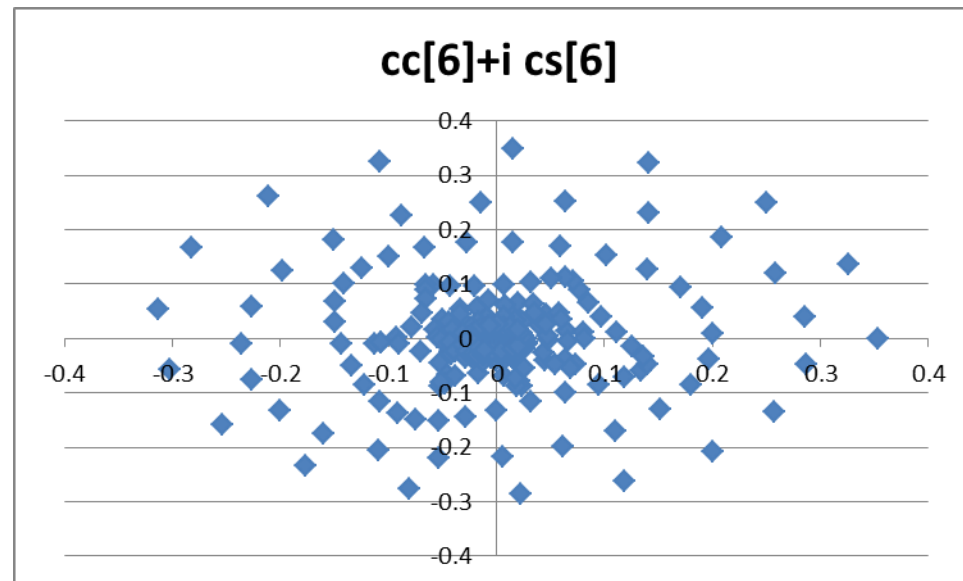
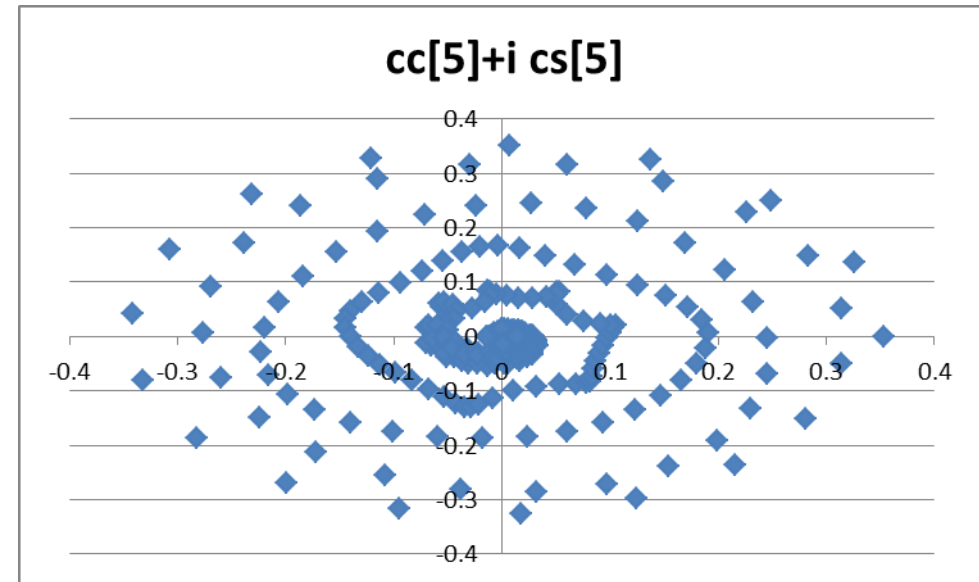
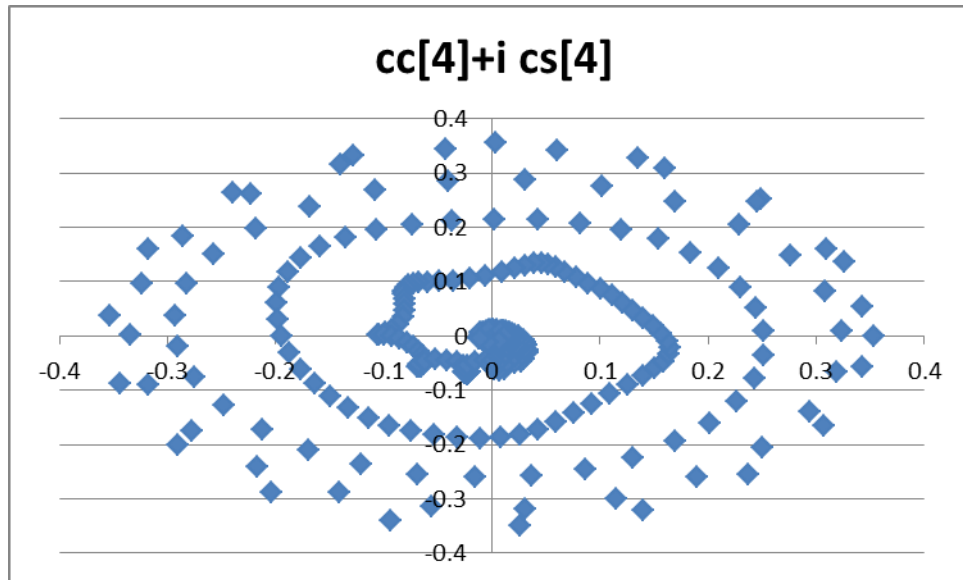
うまく行かなかった例

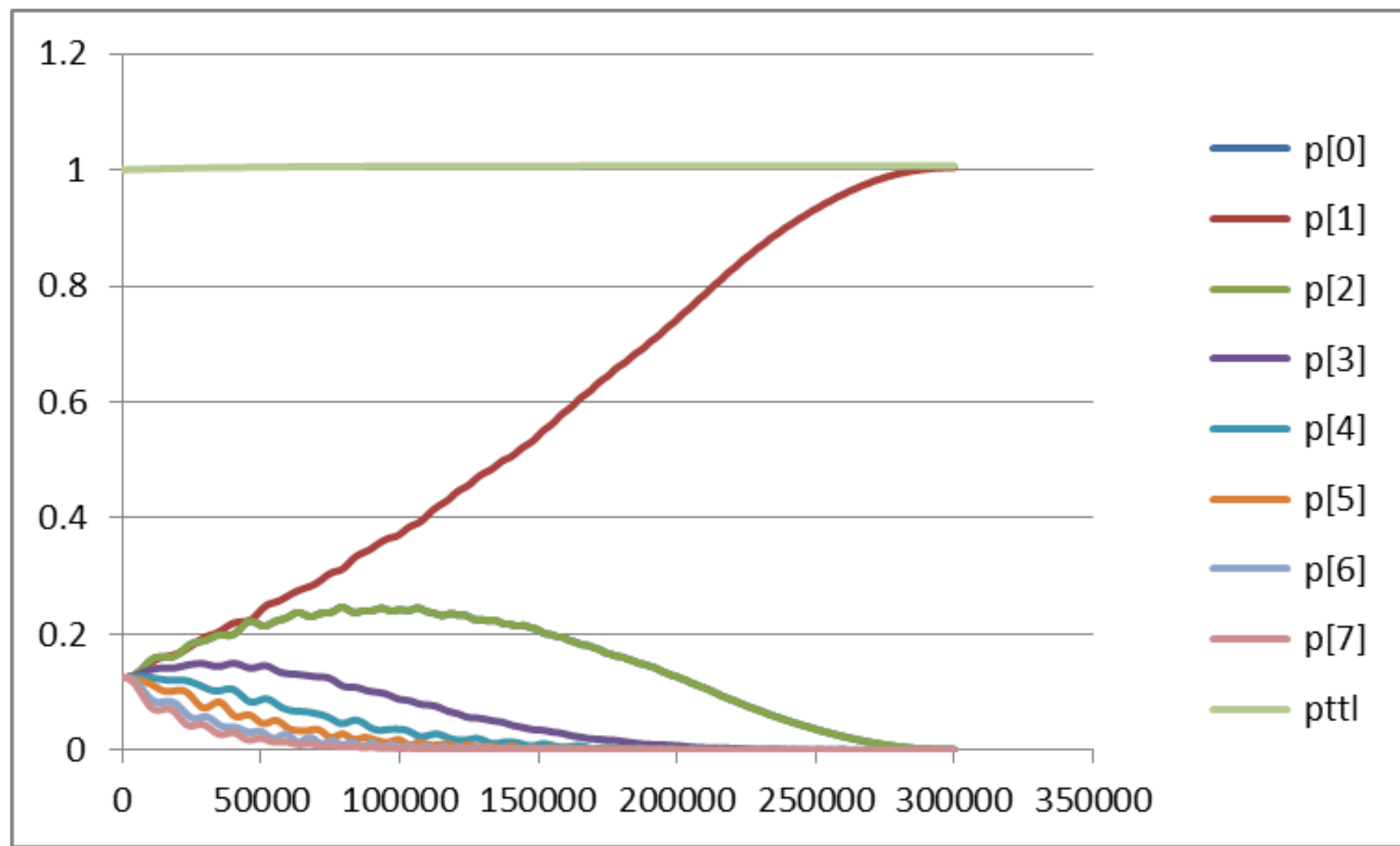
$$H_A = \Gamma_A \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0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

乱数の場合もダメだった

$$H_B = \begin{pmatrix} E_{000} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{100} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_{010} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{110} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{001} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{101} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{011} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{111} \end{pmatrix}$$







確 率

第6章 量子ゲート問題

2023/08/28

測位技術振興会 (SAPT) 知能・情報・エネルギー分科会
一色 浩

量子力学の公理

(1) 重ね合わせの原理

状態 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ がそれぞれ互いに排他的(独立)で完全な状態(固有状態)とする
と

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle, \quad c_0, c_1: \text{複素数}, \quad |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$$

も実現可能な状態である.

(2) 状態の変化(遷移)はユニタリ変換で記述される.

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle, \quad U \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c'_0 \\ c'_1 \end{pmatrix}, \quad U^\dagger \text{を} U \text{の転置共役行列として} UU^\dagger = I$$

(3) 波束の収束

$|\psi\rangle$ を観測すると, 「波束の収束」と呼ぶ不連続な遷移が起きる.

$$\text{確率} |c_0|^2 \text{で } |\psi\rangle \rightarrow 0 \quad \text{または} \quad \text{確率} |c_1|^2 \text{で } |\psi\rangle \rightarrow 1$$

表記法： $|0\rangle \otimes |1\rangle = |01\rangle$

$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ とする. このとき

$$|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle \otimes \dots \otimes |\psi\rangle$$

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) \otimes \dots \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle + \dots + |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes \dots \otimes |1\rangle)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|00\dots 0\rangle + |00\dots 01\rangle + |00\dots 10\rangle + |00\dots 11\rangle + \dots + |11\dots 1\rangle)$$

これを観測したら、何が出て来る？

量子ビットの表現および演算

- 量子ビットの表現： $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ or $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$: 2次元の複素列ベクトル
- 量子ビットの操作は以下の演算と等価である.

$$|\psi_1\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \rightarrow |\psi_2\rangle = c'_0|0\rangle + c'_1|1\rangle \quad \text{or} \quad (c_0, c_1) \rightarrow (c'_0, c'_1)$$

$$\text{ここで } |c_0|^2 + |c_1|^2 = |c'_0|^2 + |c'_1|^2 = 1$$

$$\text{アダマール・ゲート: } |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}: H^\dagger = H, HH^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

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

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

・内積：二つの量子ビットを $|\psi_1\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$, $|\psi_2\rangle = c_2|0\rangle + c_3|1\rangle$ として、内積を $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$

と書き、次のように定義する： $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = c_0^*c_2 + c_1^*c_3 = (c_0 \ c_1)^* \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$

なお、 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ は、行ベクトル $\langle\psi_1| = (c_0, c_1)$ と列ベクトル $|\psi_2\rangle = (c_2, c_3)^T$ の積と考え、前者をブラベクトル後者をケットベクトルと呼ぶ

内積が0の二つの量子ビットは直交しているという.

・量子ビット $|0\rangle$ と $|1\rangle$ は直交している：このような量子ビット を基底という.
 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = c_0^*c_2 + c_1^*c_3 = (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$

エンタングルメント(もつれ)

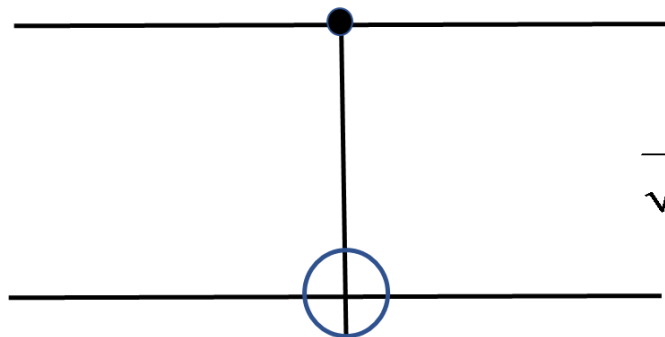
最も簡単な例：制御NOTゲートの制御ビットに $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ を標的ビット $|1\rangle$ にを入力してみる：

制御ビット

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

標的ビット

$$|1\rangle$$



独立な二つの直積の形にならない。

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$$

一方が $|0\rangle$ なら他方は $|1\rangle$ ，またはその逆. $|00\rangle$ ， $|11\rangle$ にはならない。

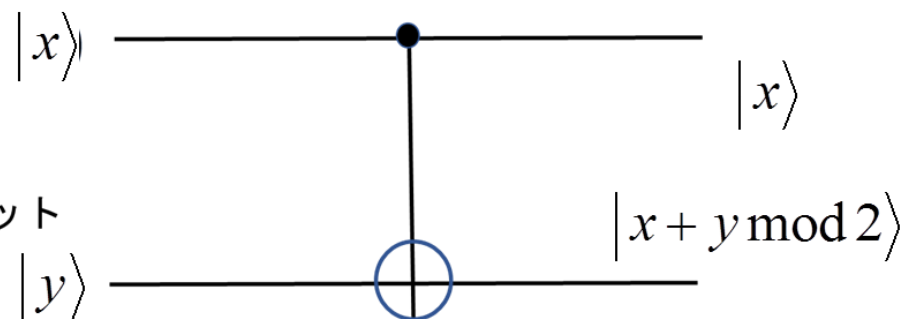
可逆性：逆方向に情報を流すと元に戻る。

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle$$

量子論理ゲート(古典コンピューターの古典論理ゲートに相当)

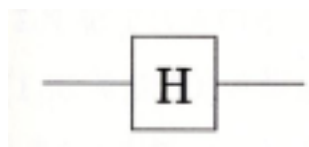
制御NOTゲート

制御ビット



制御 ビット	$ 0\rangle \rightarrow 0\rangle$	$ 0\rangle \rightarrow 0\rangle$	$ 1\rangle \rightarrow 1\rangle$	$ 1\rangle \rightarrow 1\rangle$
標的 ビット	$ 0\rangle \rightarrow 0\rangle$	$ 1\rangle \rightarrow 1\rangle$	$ 0\rangle \rightarrow 1\rangle$	$ 1\rangle \rightarrow 0\rangle$

アダマールゲート

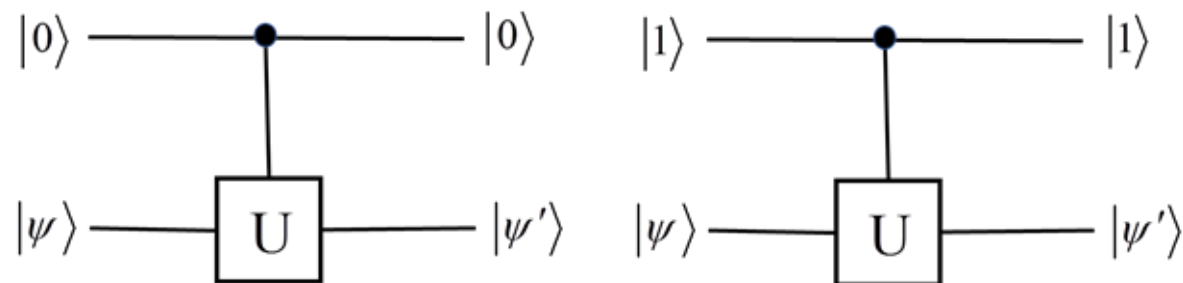


$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

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

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

制御ユニタリゲート



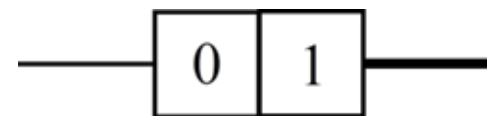
$$|\psi_1\rangle = |0\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$$

$$|\psi_1\rangle = |1\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = c_0U|0\rangle + c_1U|1\rangle$$

古典ゲート



古典情報 → 量子情報

第6章 ショアのアルゴリズム

6.1 公開鍵暗号

現在の暗号方式は公開鍵暗号方式と呼ばれる。以前の共通鍵暗号方式では、送信者と受信者の両者がただ1つの共通の鍵を用いるために、暗号の秘匿に問題があった。そこで**公開鍵暗号**が考案された。

大きな数の素因数分解はスパコンでも難しいことを利用する。

公開鍵暗号とは、図6.1のようにアリス(送信者)からボブ(受信者)への情報通信をボブが作った施錠鍵を用い、第3者に読み取られないように行う。

ボブは施錠鍵 e と暗号箱 M 、解錠鍵(秘密鍵) d をつぎのように作成し、 e と M だけ公開する。

- (a) 二つの大きな素数 p と q を適当に選択し、 $M = pq$ を計算する。
- (b) $L = (p-1)(q-1)$ を計算し、 L と互いに素で L より小さい奇数 e を適当に定める。

- (c) ed を L で割った余りが1となる d を探す。式で書くと $ed \bmod L = 1$ である。

(2) アリスはメッセージを整数で表した P から暗号文 C により計算する。ただし、 $P < M$ でなければならない。

$$C = P^e \bmod M$$

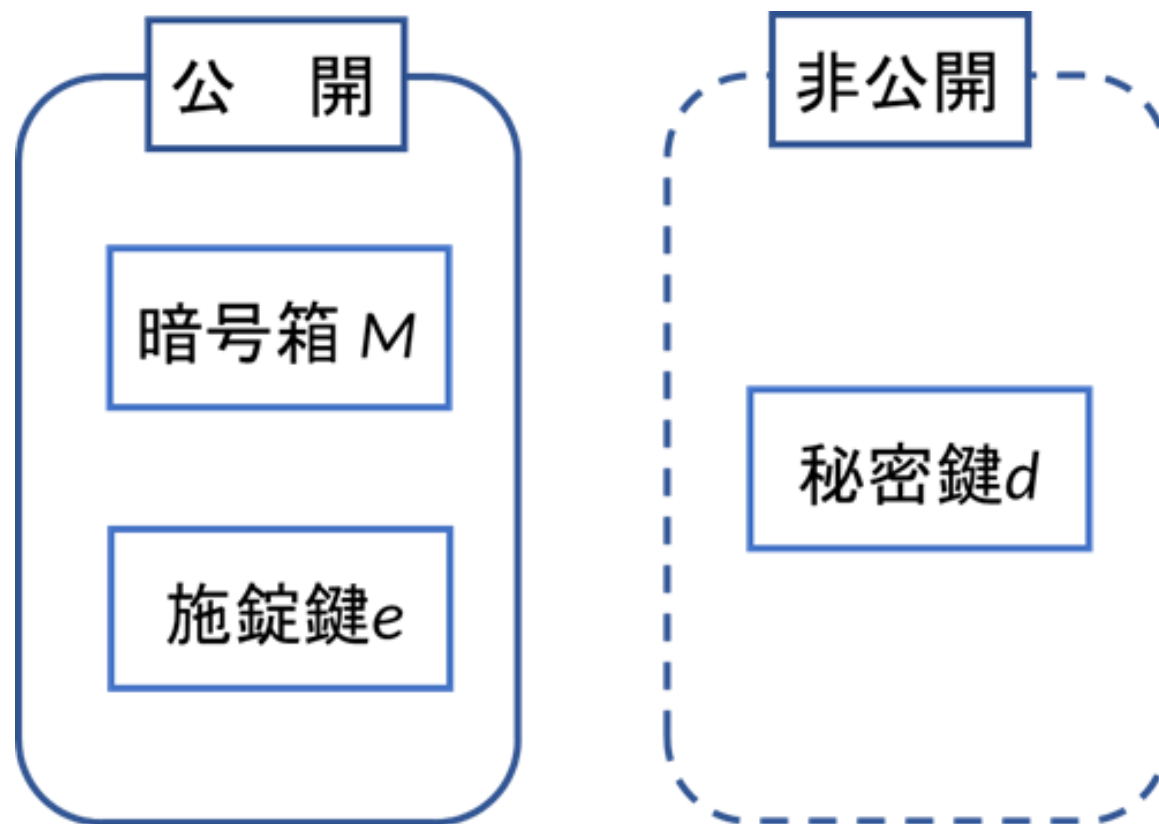


図6.1 アリスは、公開されているボブが作った施錠鍵 e と箱 M を用いて、送りたい秘密の情報を箱の中に入れ施錠してボブへ送る。ボブは自分だけが持っている秘密鍵 d を用いて解錠し、アリスからの秘密の情報を得る。

例：送りたい言葉：LOVE（出典：宮野，古澤，量子コンピュータ入門第2版，日本評論社（2018））

2進法でのASCIIコード（下付き添え字(2)と(10)は2進法と10進法を表す）

$$[L] = 1001100_{(2)} \quad [O] = 1001111_{(2)} \quad [V] = 1010110_{(2)} \quad [E] = 1000101_{(2)}$$

これより，アリスは原文を作成：

$$P = 1001100100111110101101000101_{(2)} = 16068896$$

アリスは暗号文を作成：

$$C = P^e \bmod M = 160688965^e \bmod M$$

(4) ボブは受け取った暗号文 C から元のメッセージを解読：

$$P = C^d \bmod M$$

証明には，フェルマーの小定理が必要：

「 g が素数 p の倍数でないとき
 $g^{p-1} \bmod p = 1$ が成り立つ」

$p=5$, $g=1,2,3$ として例を挙げる：

$$1^4 \bmod 5 = 1, \quad 2^4 \bmod 5 = 16 \bmod 5 = 1, \quad 3^4 \bmod 5 = 81 \bmod 5 = 1$$

復号の証明 : $C^d \bmod M = (P^e \bmod M)^d \bmod M$

$$= \left[(P^e)^d \bmod M \right] \bmod M$$

$$\text{because } (P^e)^d \bmod M = (\lambda M + \alpha)^d \bmod M = \alpha^d \bmod M$$

$$= (P^e \bmod M)^d \bmod M$$

$$= P^{ed} \bmod M$$

$$= P^{k(p-1)(q-1)+1} \bmod M$$

$$= P \cdot P^{k(p-1)(q-1)} \bmod M$$

$$= P \cdot (\gamma pq + 1) \bmod M$$

because of Fermat's little theorem

$$= (\gamma PM + P) \bmod M = P$$

because $P < M$ Q.E.D.

公開鍵暗号のまとめ

アリスからボブに送りたい文章：例えば [LOVE]

$[L] = 1001100_{(2)}$ $[O] = 1001111_{(2)}$ $[V] = 1010110_{(2)}$ $[E] = 1000101_{(2)}$

$P = 1001100100111110101101000101_{(2)} = 160688965_{(10)}$

ボブが鍵を作成：二つの素数 p と q を選択し $M = pq$ とする, $L = (p-1)(q-1)$ を計算し, L と互いに素で L より小さい奇数 e を選択.

ed を L で割ると余りが1となる数 d を探す. M と e は公開される.

アリスは P を暗号 C に変換： $C = P^e \bmod M$

ボブはアリスから送られた暗号 C を解読して P を得る：

$$P = C^d \bmod M$$

例：原文を $P=5$ とする場合

(1) ボブは施錠鍵 $e=7$ と $M=33$, 解錠鍵（秘密鍵） $d=3$ を作成し, $e=7$ と $M=33$ だけを公開する.

(a) 二つの大きな素数 $p=3$ と $q=11$ を, 素因数分解 $M=pq=33$ より計算する.
 $L=(p-1)(q-1)=20$ を計算し, $L=20$ と互いに素で $L=20$ より小さい奇数として $e=7$ を選ぶ.

(b) $ed=7d$ を $L=20$ で割ると余りが1となる数 d を探す. ここでは $d=3$ とする.

(2) アリスは原文を整数で表した $P=5$ から暗号文 C を $C = P^e \bmod M$ より計算:

$$C = P^e \bmod M = 5^7 \bmod 33 = 78125 \bmod 33 = 14 \quad \text{エクセルで計算可能}$$

(3) ボブは受け取った暗号文 C から原文 P を復号: $P = C^d \bmod M$ で計算.

$$P = C^d \bmod M = 14^3 \bmod 33 = 2744 \bmod 33 = 5 \quad \text{エクセルで計算可能}$$

もしも、 M を素因数分解できて p と q が分かってしまうと、 $L = (p-1)(q-1)$ が分かり e は公開されているので、何回かの試行で $ed \bmod L = 1$ を d について解くことが可能となり、暗号がばれてしまう。

M が大きい場合には M の素因数分解は現在の計算機的能力では膨大な時間が掛かってしまい実質的に不可能であり、暗号が解読されないことになる。

量子コンピューターを用いるショアのアルゴリズムでは、素因数分解を高速に解けることになるのでその衝撃は大きかった。

中山 茂, クラウド量子計算入門, カットシステム (2016) p.238

位数 $M = pq$ の素因数分解アルゴリズム $e^x \bmod M = 2^x \bmod 15$

(1) 最初に M よりも小さく, お互いに約数を持たない次のような整数 e を選ぶ:

$$e \in 1, 2, \dots, M-1, \quad \gcd(e, M) = 1$$

指数関数の e ではない.

$$= 2^0, 2^1, 2^2, 2^3, 2^4, 2^5, 2^6, 2^7, \dots \bmod 15$$

$$= 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128, \dots \bmod 15$$

$$= 1, 2, 4, 8, 1, 2, 4, 8, \dots \bmod 15 \quad \text{周期性あり}$$

従って $T = 4$

(2) T を整数として $M = e^T - 1$ ならば, 関数 $f(x) = e^x \bmod M$ は

$$f(x+T) = e^{T+x} \bmod M = (M+1)e^x \bmod M = (Me^x + e^x) \bmod M = e^x \bmod M = f(x)$$

満たすので $f(x)$ は周期 T を有す. この性質を使うと, 2個の素数の積である M が与えられたとき, M の素因数分解ができる. 周期 T が奇数なら (1) に戻り e を選び直し, T が偶数になるまで繰り返す.

(3) 周期性条件より $e^x \bmod M = e^{x+T} \bmod M \rightarrow e^T \bmod M = 1 \rightarrow e^T - 1 \bmod M = 0$

周期 T が偶数な $e^T - 1 = (e^{T/2} + 1)(e^{T/2} - 1) \bmod M = 0 \dots (e^T - 1 = cM)$

ユークリッドの互除法を用いて、最大公約数 $\gcd(e^{T/2} \pm 1, M)$ を求める.

(4) 求めた最大公約数が p, q であるならば、 M の素因数分解ができた.

「素因数分解アルゴリズムが位数発見アルゴリズムとなる」ことは
 $e^T \bmod M = 1$ での周期 T が位数になっているためである.

数値例1 $M=6$

$M=6$ より小で1より大の整数で M と共通の約数を持たない奇数 $e=5$ を選ぶ。
ふ。
 $f(x) = e^x \bmod M = 5^x \bmod 6$ の周期 T は

$$5^0 \bmod 6 = 1, \quad 5^1 \bmod 6 = 5, \quad 5^2 \bmod 6 = 1, \quad 5^3 \bmod 6 = 5, \quad 5^4 \bmod 6 = 1, \dots$$
$$5^3 = 125 = 120 + 5 \quad 5^4 = 625 = 624 + 1$$

なので $T=2$ (偶数) となり

$$\gcd(e^{T/2} \pm 1, M) = \gcd(5^1 \pm 1, 6) = \gcd(5 \pm 1, 6) = 6, 2$$

であるので、素因数2が見つかった。他は $M/2=6/2=3$ となる。

数値例2 $M=15$

$M=15$ より小で1より大の整数で M と共通の約数を持たない奇数 $=7$ を
選ぶ
 $f(x) = e^x \bmod M = 7^x \bmod 15$ の周期 T は

$$7^0 \bmod 15 = 1, \quad 7^1 \bmod 15 = 7, \quad 7^2 \bmod 15 = 4, \quad 7^3 \bmod 15 = 13, \quad 7^4 \bmod 15 = 1, \dots$$

$$7^3 = 343$$

$$7^4 = 2401$$

なので $T=4$ (偶数) とな
り

$$= 330 + 13$$

$$= 2400 + 1$$

$$\gcd(e^{T/2} \pm 1, M) = \gcd(7^2 \pm 1, 15) = \gcd(49 \pm 1, 15) = 5, 3$$

であるので、素因数が二つとも見つかった。

数値例3-1 $M=21$

$M=21$ より小で1より大の整数で M と共通の約数を持たない奇数は 5 を選

ぶ。
 $f(x) \bmod M = e^x \bmod M = 5^x \bmod 21$ の周期 T は

$$5^0 \bmod 21 = 1, \quad 5^1 \bmod 21 = 5, \quad 5^2 \bmod 21 = 4, \quad 5^3 \bmod 21 = 20,$$

$$5^4 \bmod 21 = 16 \quad 5^5 \bmod 21 = 17 \quad 5^6 \bmod 21 = 1, \dots$$

なので $T=6$ (偶数) とな

り

$$\gcd(e^{T/2} \pm 1, M) = \gcd(5^3 \pm 1, 21) = \gcd(125 \pm 1, 21) = 7 \dots 126$$

であるので、素因数7が見つかった。他は $M/7=21/7=3$ となる。

数値例3-2 $M=21$

$M=21$ より小で1より大の整数で M と共通の約数を持たない奇数 $e=13$ を選ぶ.

$$\begin{aligned} f(x) \bmod M &= e^x \bmod M = 13^x \bmod 21 \quad \text{の周期 } T \text{ は} \\ 13^0 \bmod 21 &= 1, \quad 13^1 \bmod 21 = 13, \quad 13^2 \bmod 21 = 7, \quad 13^3 \bmod 21 = 13, \\ 13^4 \bmod 21 &= 1, \quad \dots \end{aligned}$$

なので $T=4$ (偶数) となり

$$\gcd(e^{T/2} \pm 1, M) = \gcd(13^2 \pm 1, 21) = \gcd(169 \pm 1, 21) = 7 \dots 168$$

であるので, 素因数7が見つかった. 他は $M/7=21/7=3$ となる.

数値例3-3 $M=21$

$M=21$ より小で1より大の整数で M と共通の約数を持たない偶数 $e=4$ を選

ぶ。
 $f(x) \bmod M = e^x \bmod M = 4^x \bmod 21$ の周期 T は

$$4^0 \bmod 21 = 1, \quad 4^1 \bmod 21 = 4, \quad 4^2 \bmod 21 = 16, \quad 4^3 \bmod 21 = 1,$$

$$4^4 \bmod 21 = 4, \dots$$

なので $T=4$ (偶数) となり

$$\gcd(e^{T/2} \pm 1, M) = \gcd(4^2 \pm 1, 21) = \gcd(16 \pm 1, 21) = 3 \dots 15$$

であるので、素因数3が見つかった。他は $M/3=21/3=7$

暗号解読のためには

量子離散的フーリエ変換

位相推定問題

位数計算

ショアのアルゴリズムの手順

6.2 量子離散的フーリエ変換

6.2.1 量子離散的フーリエ変換の定義

ショアのアルゴリズムの中心部は量子離散的フーリエ変換である.

連続関数のフーリエ変換：
$$\hat{f}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

逆変換は
$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

離散フーリエ変換：

$0 \leq t < NT$ で考え, $t_j = jT, j = 0, 1, \dots, N-1$ における関数値 x_j から y_k への変換：

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{i2\pi jk/(NT)}$$

便宜的に $T=1$ とすると $y_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{i2\pi jk/N}$

成分 x_j から y_k への離散フーリエ変換を改めて書くと

$$x_j \rightarrow y_k : y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{i2\pi jk/N}$$

$$\text{状態は不変なので } \sum_{j=0}^{N-1} x_j |j\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} y_k |k\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j e^{i2\pi jk/N} |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} x_j \sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi jk/N} |k\rangle$$

この式の最左辺と最右辺より，基底 $|j\rangle$ は

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi jk/N} |k\rangle \quad (6.1)$$

という変換がなされることになる．これを量子離散的フーリエ変換と呼ぶ．

$N=2$ の場合，式(5.9)より

$$\begin{aligned} |0\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=0}^1 e^{i2\pi \cdot 0 \cdot k/2} |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_k + |1\rangle_k) \\ |1\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=0}^1 e^{i2\pi \cdot 1 \cdot k/2} |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_k - |1\rangle_k) \end{aligned} \quad (6.2)$$

これは，第4章で説明されたアダマールゲートである．2次元の量子離散的フーリエ変換はアダマールゲートに他ならない．式(6.1)により基底が変わるので観測値が変わることになる．

$N = 4$ の場合は

$$|0\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_{k=0}^3 e^{i2\pi \cdot 0 \cdot k/4} |k\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle_k + |1\rangle_k + |2\rangle_k + |3\rangle_k)$$

$$|1\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_{k=0}^3 e^{i2\pi \cdot 1 \cdot k/4} |k\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle_k + i|1\rangle_k - |2\rangle_k - i|3\rangle_k)$$

$$|2\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_{k=0}^3 e^{i2\pi \cdot 2 \cdot k/4} |k\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle_k - |1\rangle_k + |2\rangle_k - |3\rangle_k)$$

$$|3\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_{k=0}^3 e^{i2\pi \cdot 3 \cdot k/4} |k\rangle = \frac{1}{2} (|0\rangle_k - i|1\rangle_k - |2\rangle_k + i|3\rangle_k)$$

この変換はユニタリ変換である．行列を使うと見通しがいい．上式の変換を $|k\rangle$ を基底ベクトルとしたときの縦ベクトル

$$|0\rangle_k = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle_k = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle_k = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle_k = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

の変換と考えると $\Gamma = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -i & -1 & i \end{pmatrix}$

と書ける. Γ の転置共役を Γ^\dagger とすると, **ユニタリー性** :

$$\Gamma^\dagger \Gamma = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -i & -1 & i \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & i & -1 & -i \end{pmatrix} \times \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -i & -1 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

を満たすが, $\Gamma^\dagger = \Gamma$ を満たさないので, **エルミートではない**.

6.2.2 量子離散的フーリエ変換の量子回路

量子離散的フーリエ変換を量子コンピュータで行うためには、 $|j\rangle$ ($j=0,1,\dots,N$) を量子ビットで表す必要がある。

$N=2^n$ として10進数である j を2進数 $j = j_1 \cdot 2^{n-1} + j_2 \cdot 2^{n-2} + \dots + j_n \cdot 2^0$ ($j_m = 0,1$)

で表し、状態ベクトル $|j\rangle$ $|j\rangle = |j_1 j_2 \dots j_n\rangle = |j_1 \otimes j_2 \otimes \dots \otimes j_n\rangle$
を

また、1より小さい数も2進数で表す： $0.j_1 j_2 \dots j_m = \frac{j_1}{2^1} + \frac{j_2}{2^2} + \dots + \frac{j_m}{2^m}$

量子離散的フーリエ変換の表現には、基底ベクトルに対する動作（変換）を表す基底 $|j\rangle$ を量子ビットで表せばよい：

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i2\pi jk/2^n} |k\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \dots \sum_{k_n=0}^1 e^{i2\pi j(k_1 2^{n-1} + k_2 2^{n-2} + \dots + k_n 2^0)/2^n} |k_1 k_2 \dots k_n\rangle$$

次ページへ続く

$$\begin{aligned}
|j\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i2\pi jk/2^n} |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \cdots \sum_{k_n=0}^1 e^{i2\pi j(k_1 2^{n-1} + k_2 2^{n-2} + \cdots + k_n 2^0)/2^n} |k_1 k_2 \cdots k_n\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \cdots \sum_{k_n=0}^1 e^{i2\pi j\left(\frac{k_1}{2^1} + \frac{k_2}{2^2} + \cdots + \frac{k_n}{2^n}\right)} |k_1 k_2 \cdots k_n\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \cdots \sum_{k_n=0}^1 e^{i2\pi j \frac{k_1}{2^1}} e^{i2\pi j \frac{k_2}{2^2}} \cdots e^{i2\pi j \frac{k_n}{2^n}} |k_1 k_2 \cdots k_n\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \cdots \sum_{k_n=0}^1 e^{i2\pi j \frac{k_1}{2^1}} |k_1\rangle \otimes e^{i2\pi j \frac{k_2}{2^2}} |k_2\rangle \otimes \cdots \otimes e^{i2\pi j \frac{k_n}{2^n}} |k_n\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_1=0}^1 e^{i2\pi j \frac{k_1}{2^1}} |k_1\rangle \otimes \sum_{k_2=0}^1 e^{i2\pi j \frac{k_2}{2^2}} |k_2\rangle \otimes \cdots \otimes \sum_{k_n=0}^1 e^{i2\pi j \frac{k_n}{2^n}} |k_n\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(|0\rangle + e^{i2\pi \frac{j}{2^1}} |1\rangle \right) \otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi \frac{j}{2^2}} |1\rangle \right) \otimes \cdots \otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi \frac{j}{2^n}} |1\rangle \right)
\end{aligned}$$

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i2\pi jk/2^n} |k\rangle = \dots = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(|0\rangle + e^{i2\pi \frac{j}{2^1}} |1\rangle \right) \otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi \frac{j}{2^2}} |1\rangle \right) \otimes \dots \otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi \frac{j}{2^n}} |1\rangle \right)$$

$$j \text{を2進数表示} : j = j_1 \cdot 2^{n-1} + j_2 \cdot 2^{n-2} + \dots + j_{n-1} \cdot 2^1 + j_n \cdot 2^0$$

$$\frac{j}{2^1} = j_n \cdot 2^{-1} + \dots + j_1 \cdot 2^{n-2} = j_n \cdot 2^{-1} + \text{整数}$$

$$e^{i2\pi \frac{j}{2^1}} = e^{i2\pi (j_n \cdot 2^{-1} + \text{整数})} = e^{i2\pi j_n \cdot 2^{-1}} = e^{i2\pi 0.j_n}$$

$$\frac{j}{2^2} = j_n \cdot 2^{-2} + j_{n-1} \cdot 2^{-1} + \dots + j_1 \cdot 2^{n-3} = j_n \cdot 2^{-2} + j_{n-1} \cdot 2^{-1} + \text{整数}$$

$$e^{i2\pi \frac{j}{2^2}} = e^{i2\pi (j_n \cdot 2^{-2} + j_{n-1} \cdot 2^{-1} + \text{整数})} = e^{i2\pi (j_n \cdot 2^{-2} + j_{n-1} \cdot 2^{-1})} = e^{i2\pi 0.j_{n-1}j_n}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_n} |1\rangle \right) \otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_{n-1}j_n} |1\rangle \right) \otimes \dots \otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_1j_2\dots j_n} |1\rangle \right) \quad (6.3)$$

式(6.3)では、各量子ビットが重ね合わせの状態になっている。

図6.1に量子離散的フーリエ変換を実現する量子回路を示す.

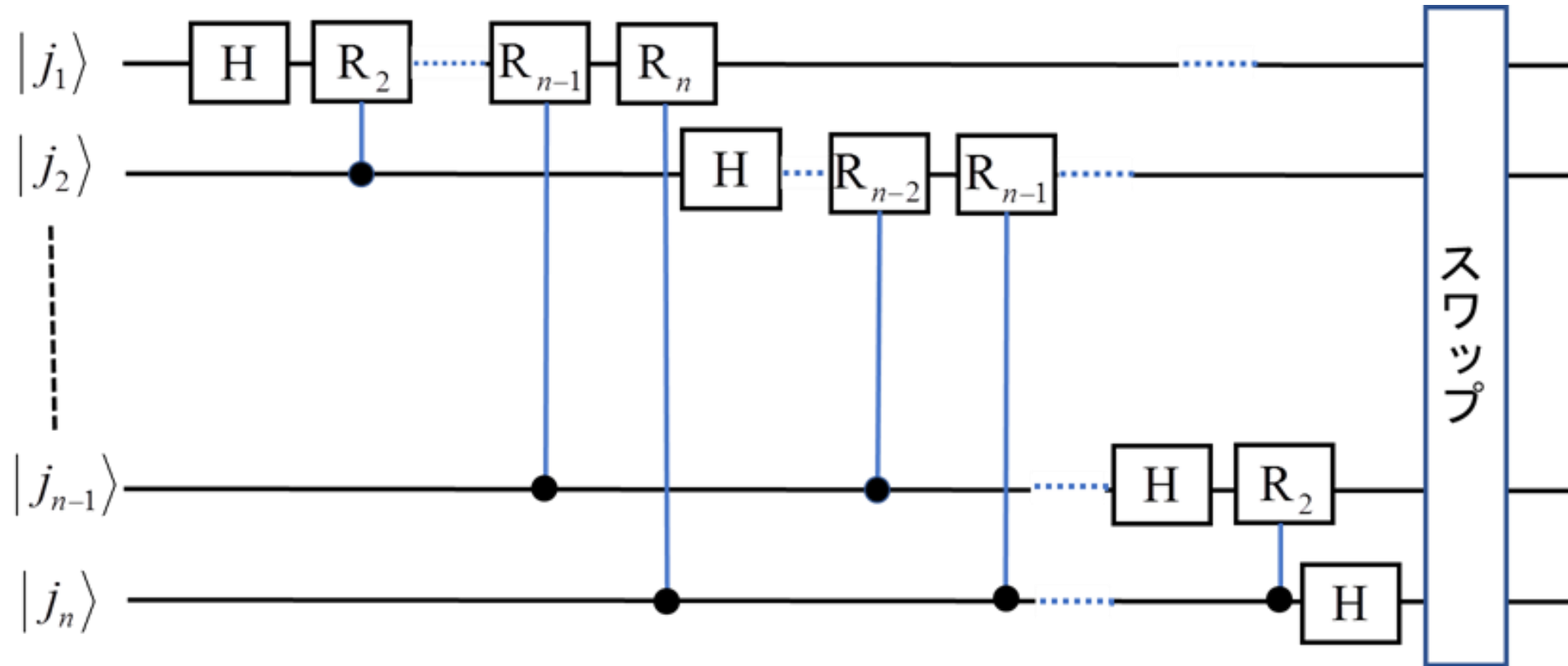
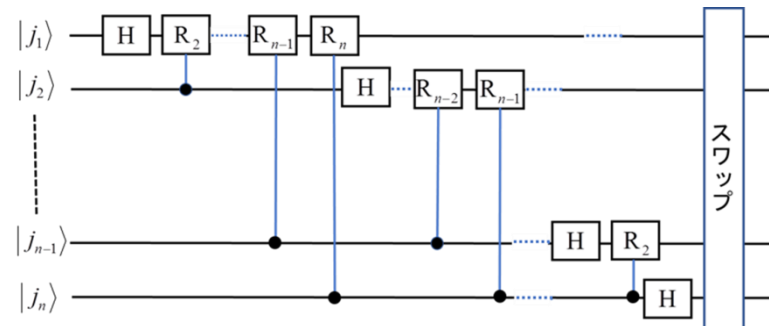


図6.1 量子離散的フーリエ変換の量子回路. スワップは量子ビットの順番を逆転させるスワップゲートである.

制御回転ゲート R_m は、制御ビットが0のときは標的ビットをそのまま通し、制御ビットが1のときには標的ビットに以下のような変換を施す：

$$|0\rangle \rightarrow |0\rangle, \quad |1\rangle \rightarrow e^{i\frac{2\pi}{2^m}} |1\rangle$$



この量子回路が量子離散的フーリエ変換を実現している。まず入力は

$$|j_1, j_2, \dots, j_n\rangle = |j_1\rangle \otimes |j_2\rangle \otimes \dots \otimes |j_n\rangle$$

第1量子ビット $|j_1\rangle$ が最初のアダマールゲート H を通過すると、全体の状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1} |1\rangle) \otimes |j_2, \dots, j_n\rangle$$

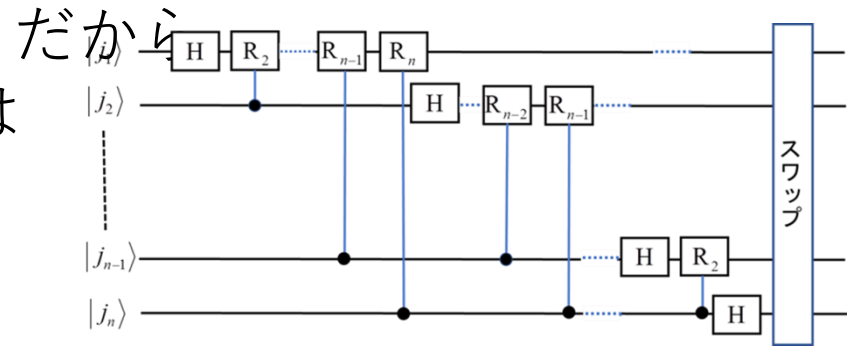
となる。このことを確認する。この式は、 $j_1 = 0$ のときなので明らかに正しい：

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes |j_2, \dots, j_n\rangle$$

$j_1 = 1$ のとき2進法の0.1は $0.1_{(2)} = 1 \cdot 2^{-1} = 1/2$ なのだから、式(6.4)は
 $e^{i2\pi 0.j_1} = e^{i2\pi 0.1_{(2)}} = e^{i\pi} = -1$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \otimes |j_2, \dots, j_n\rangle$$

となるので正しい。



第1量子ビットが制御回転ゲート R_2 を通過すると、全体の状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_1 j_2} |1\rangle) \otimes |j_2, \dots, j_n\rangle \quad (6.4)$$

に変換される．これを確認する． $j_2 = 0$ のとき R_2 変換は施されないからそのまま出力される．したがって

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_1} |1\rangle) \otimes |j_2, \dots, j_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_1 0} |1\rangle) \otimes |j_2, \dots, j_n\rangle$$

であるから全体の状態は正しく変換されてる．

$j_2 = 1$ のとき式(5.17)の変換が第1量子ビットに施される．それらは

$$|0\rangle \rightarrow |0\rangle, \quad |1\rangle \rightarrow e^{i\frac{2\pi}{2^m}} |1\rangle$$

であるから，全体の状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_1} e^{i\frac{2\pi}{2^2}} |1\rangle \right) \otimes |j_2, \dots, j_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_1} e^{i2\pi 0.01} |1\rangle \right) \otimes |j_2, \dots, j_n\rangle$$

2進法では $1/2^2 = 0.01$

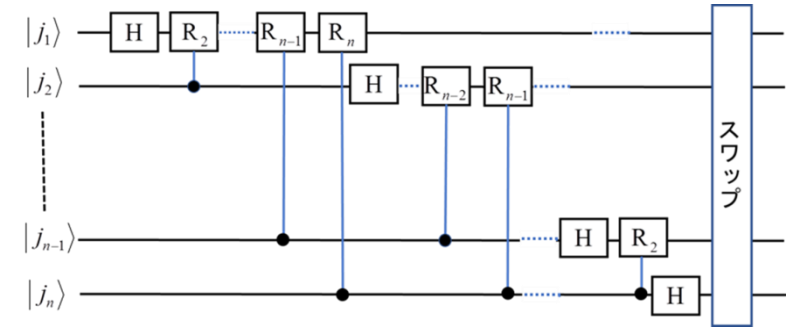
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_1 1} |1\rangle \right) \otimes |j_2, \dots, j_n\rangle \quad \text{2進法では } 0.j_1 + 0.01 = 0.j_1 1$$

となり， $j_2 = 1$ のときもこの式の変換は正しいことが分かる．

同様に，**第1ビットが R_3, \dots, R_n まで通過すると**，その出力が

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_1 j_2, \dots, j_n} |1\rangle \right) \otimes |j_2, \dots, j_n\rangle$$

最後にスワップゲートを通過するので，第1量子ビットは第 n ビットとして出力される．式(6.1)と比較すると，第 n 量子ビットの出力となっている．



第2量子ビットについて考える．まずアダマールゲートを通過する．通過後の全体の状態は，第1量子ビットのときと同様に

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1 j_2, \dots, j_n} |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_2} |1\rangle) \otimes |j_3, \dots, j_n\rangle$$

となる．さらに，第2量子ビットが R_2, \dots, R_n まで通過すると，全体の状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1 j_2, \dots, j_n} |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_2 j_3 \dots j_n} |1\rangle) \otimes |j_3, \dots, j_n\rangle$$

同様な操作を第n量子ビットまで続けると，全体の状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1 j_2, \dots, j_n} |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_2 j_3 \dots j_n} |1\rangle) \otimes \dots \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_n} |1\rangle)$$

スワップゲートを通過すると，式(6.1)の状態が生成されている．すなわち，図6.1の量子回路が量子離散的フーリエ変換を実現している．

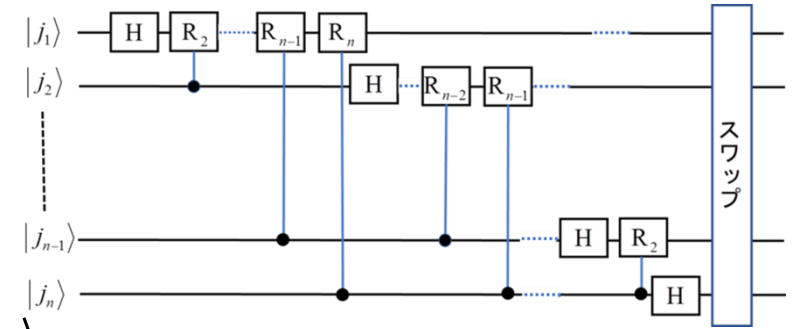


図5.2で示した量子離散的フーリエ変換器の計算速度が、式(5.8)のフーリエ変換を古典的に実現する最適アルゴリズム（Fast Fourier Transform；FFT）に比べてどの程度速いかを考える。

FFTの場合、 n ビットで表すことのできる数の論理ゲート数は、 $n2^n$ の程度であることが知られている（古澤明「量子光学と量子情報科学，数理工学社（2005））。

それに対して、図6.1で示した量子離散的フーリエ変換器では、アダマールゲートが n 個と制御回転ゲートの数が $(n-1)+(n-2)+\cdots+1=n(n-1)/2$ で合計 個 $n+n(n-1)/2=n(n+1)/2$ でオーダー n^2 である。したがって、

$n=10$ ビットの場合でも、FFTの方が約100倍ゲート数が多い。

もっと大きな数の場合、その差は歴然としている。

量子離散的フーリエ変換は、量子計算機で「あっ」という間に解けるのに通常の古典コンピューターでは時間が掛かり過ぎて事実上解けない場合の例になっている。

以下では具体例を考える．図6.1で示した量子回路を用いて， $|9\rangle$ （9の2進表記は1001）を量子離散的にフーリエ変換してみる（下図）．

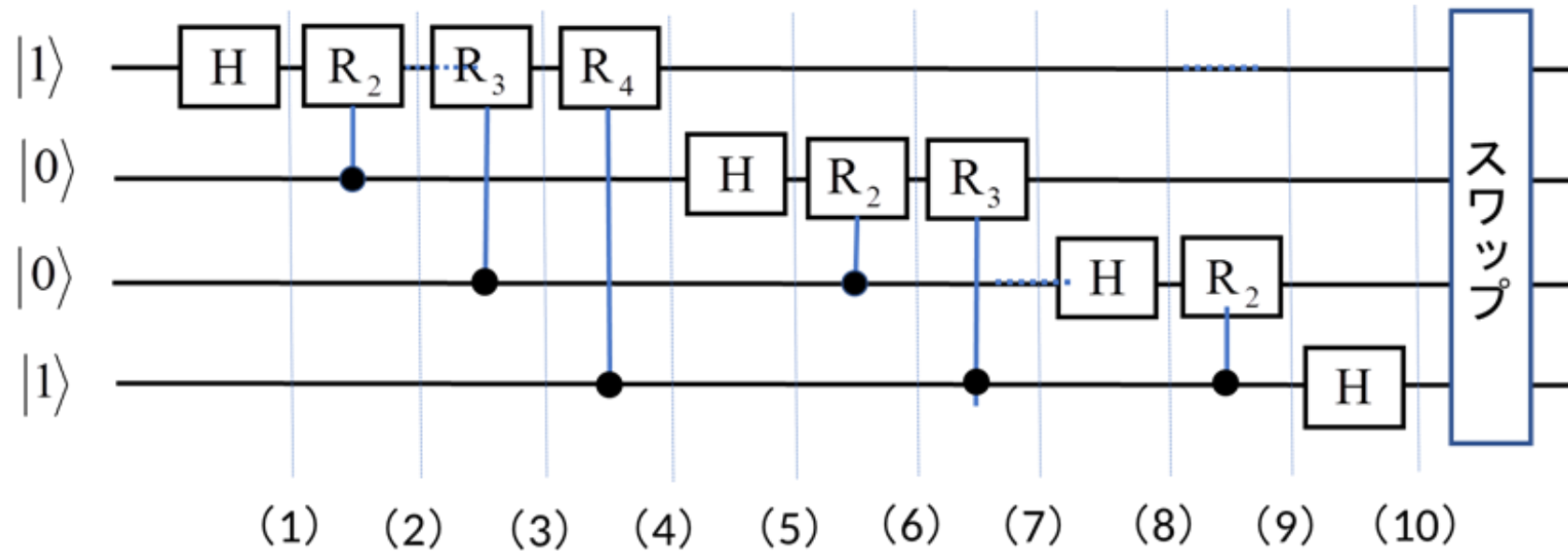


図 9（2進法の $|1001\rangle$ ）を量子離散的フーリエ変換する．括弧付きの番号は各ステップを示している．

もちろん，入力は $|9\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle$ である．第1ビットがアダマールゲートを通過後(1)の全体の状態は

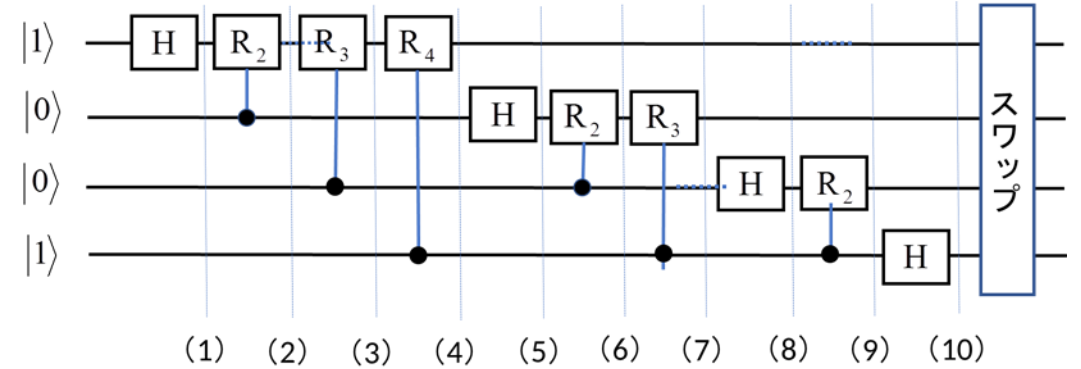
$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle$$

となる．第1量子ビットが制御ゲート R_2 を通過後(2)の全体の状態は，制御ビットが0なので，上式の状態が保たれる．(3)の状態も同様である．しかし，(4)の状態は制御ビットが1なので， R_4 ゲートの操作が施される．その結果，(4)の全体の状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle - e^{i\frac{\pi}{8}} |1\rangle \right) \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle$$

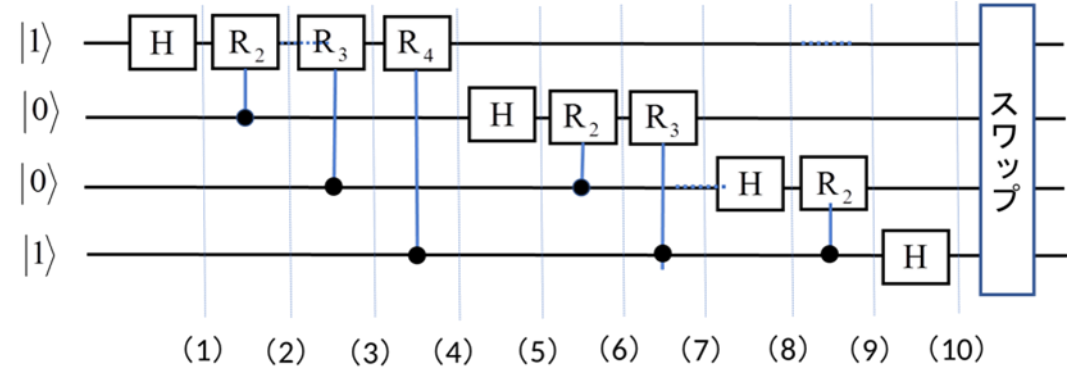
第2量子ビットがアダマールゲートを通過した(5)の状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle - e^{i\frac{\pi}{8}} |1\rangle \right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle$$



である． R_2 ゲートを通過後(6)の全体の状態は，制御ビットが0なので，(5)の状態と同じである．(7)の状態は制御ビットが1なので R_3 の変換が施される．その結果

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle - e^{i\frac{\pi}{8}} |1\rangle \right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{i\frac{\pi}{4}} |1\rangle \right) \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle$$



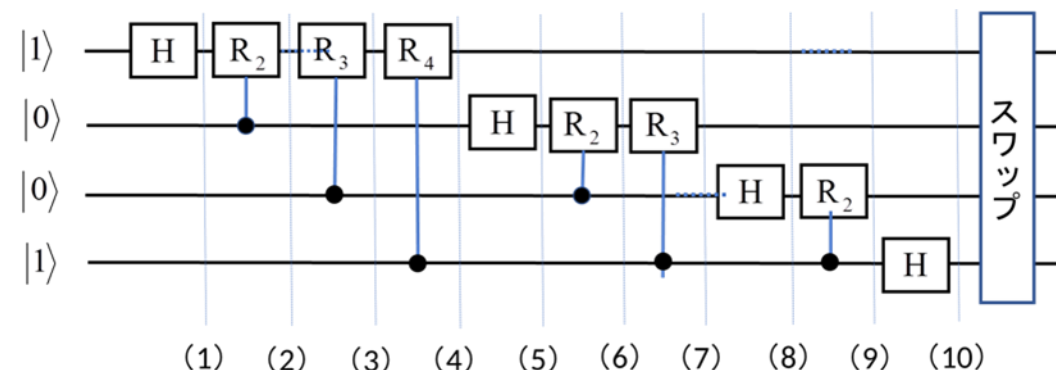
第3量子ビットがアダマールゲートを通過した(8)の状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle - e^{i\frac{\pi}{8}} |1\rangle \right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{i\frac{\pi}{4}} |1\rangle \right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle$$

となる．さらに次の R_2 ゲートを通過するとき，制御ビットである第4量子ビットは1であるので，(9)での状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle - e^{i\frac{\pi}{8}} |1\rangle \right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{i\frac{\pi}{4}} |1\rangle \right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + e^{i\frac{\pi}{2}} |1\rangle \right) \otimes |1\rangle$$

第4量子ビットがアダマールゲートを通じた(10)の状態では



$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - e^{i\frac{\pi}{8}}|1\rangle\right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{i\frac{\pi}{4}}|1\rangle\right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{i\frac{\pi}{2}}|1\rangle\right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

最後にスワップゲートを通過すると

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{i\frac{\pi}{2}}|1\rangle\right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{i\frac{\pi}{4}}|1\rangle\right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - e^{i\frac{\pi}{8}}|1\rangle\right)$$

この式は 4 桁の 2 進数 $|0000\rangle, |0001\rangle, \dots, |1111\rangle$ の16個に適当な係数を掛けたものの和である. 上式を書き直すと

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\frac{\pi}{2}}|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\frac{\pi}{4}}|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - e^{i\frac{\pi}{8}}|1\rangle) \\
&= \frac{1}{4} \left(|0000\rangle - e^{i\frac{\pi}{8}}|0001\rangle + e^{i\frac{\pi}{4}}|0010\rangle - e^{i(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{8})}|0011\rangle \right. \\
&\quad + e^{i\frac{\pi}{2}}|0100\rangle - e^{i(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{8})}|0101\rangle + e^{i(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4})}|0110\rangle - e^{i(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{8})}|0111\rangle \\
&\quad - |1000\rangle + e^{i\frac{\pi}{8}}|1001\rangle - e^{i\frac{\pi}{4}}|1010\rangle + e^{i(\frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{8})}|1011\rangle \\
&\quad \left. - e^{i\frac{\pi}{2}}|1100\rangle + e^{i(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{8})}|1101\rangle - e^{i(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4})}|1110\rangle + e^{i(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{8})}|1111\rangle \right) \\
&= \frac{1}{4} \left(|0\rangle - e^{i\frac{\pi}{8}}|1\rangle + e^{i\frac{\pi}{4}}|2\rangle - e^{i\frac{3\pi}{8}}|3\rangle + e^{i\frac{\pi}{2}}|4\rangle - e^{i\frac{5\pi}{8}}|5\rangle + e^{i\frac{3\pi}{4}}|6\rangle - e^{i\frac{7\pi}{8}}|7\rangle \right. \\
&\quad \left. - |8\rangle + e^{i\frac{\pi}{8}}|9\rangle - e^{i\frac{\pi}{4}}|10\rangle + e^{i\frac{3\pi}{8}}|11\rangle - e^{i\frac{\pi}{2}}|12\rangle + e^{i\frac{5\pi}{8}}|13\rangle - e^{i\frac{3\pi}{4}}|14\rangle + e^{i\frac{7\pi}{8}}|15\rangle \right)
\end{aligned}$$

確かに次式：

$$|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi jk/N} |k\rangle$$

において、 $|j\rangle = |9\rangle$ とした場合になっている．この式において、例えば、 $|j\rangle = |9\rangle$ $|k\rangle = |14\rangle$ のとき

$$\left(e^{i2\pi jk/16} \right)_{j=8, k=13} = e^{i2\pi 9 \times 14/16} = e^{i\pi 252/16} = e^{i\pi(15.75)} = e^{i15\pi} e^{i\frac{3\pi}{4}} = -e^{i\frac{3\pi}{4}}$$

となり、 $|j\rangle = |9\rangle$ $|k\rangle = |15\rangle$ のとき

$$\left(e^{i2\pi jk/16} \right)_{j=8, k=13} = e^{i2\pi 9 \times 15/16} = e^{i\pi 270/16} = e^{i\pi(16.875)} = e^{i16\pi} e^{i\frac{7\pi}{8}} = e^{i\frac{7\pi}{8}}$$

となるので、正しくフーリエ変換されていることが分かる．

6.3 位相推定問題

量子離散的フーリエ変換の応用として、位相推定問題を考える。位相推定問題とは以下のような問題である。

$$\left[U \text{ をユニタリ演算子として } U|u\rangle = e^{i2\pi\phi} |u\rangle \right. \quad (6.5)$$

という $e^{i2\pi\phi}$ を固有値と $|u\rangle$ を固有ベクトルとする固有値問題で定義される ϕ 位相 を推定する

ここで ϕ は $0 \leq \phi < 1$ とし、2進数表示で $\phi = 0.\phi_1\phi_2, \dots, \phi_n$ であるとする。転置共役行列がそれ自身の逆であるようなものをユニタリ行列という。

$$U^\dagger U = I$$

一つ目のグループは第1量子ビットから第 n 量子ビットまでの n 個の量子ビットで、最終的には答えとなる ϕ を出力するので、

「解答レジスタ」と呼ぶ。

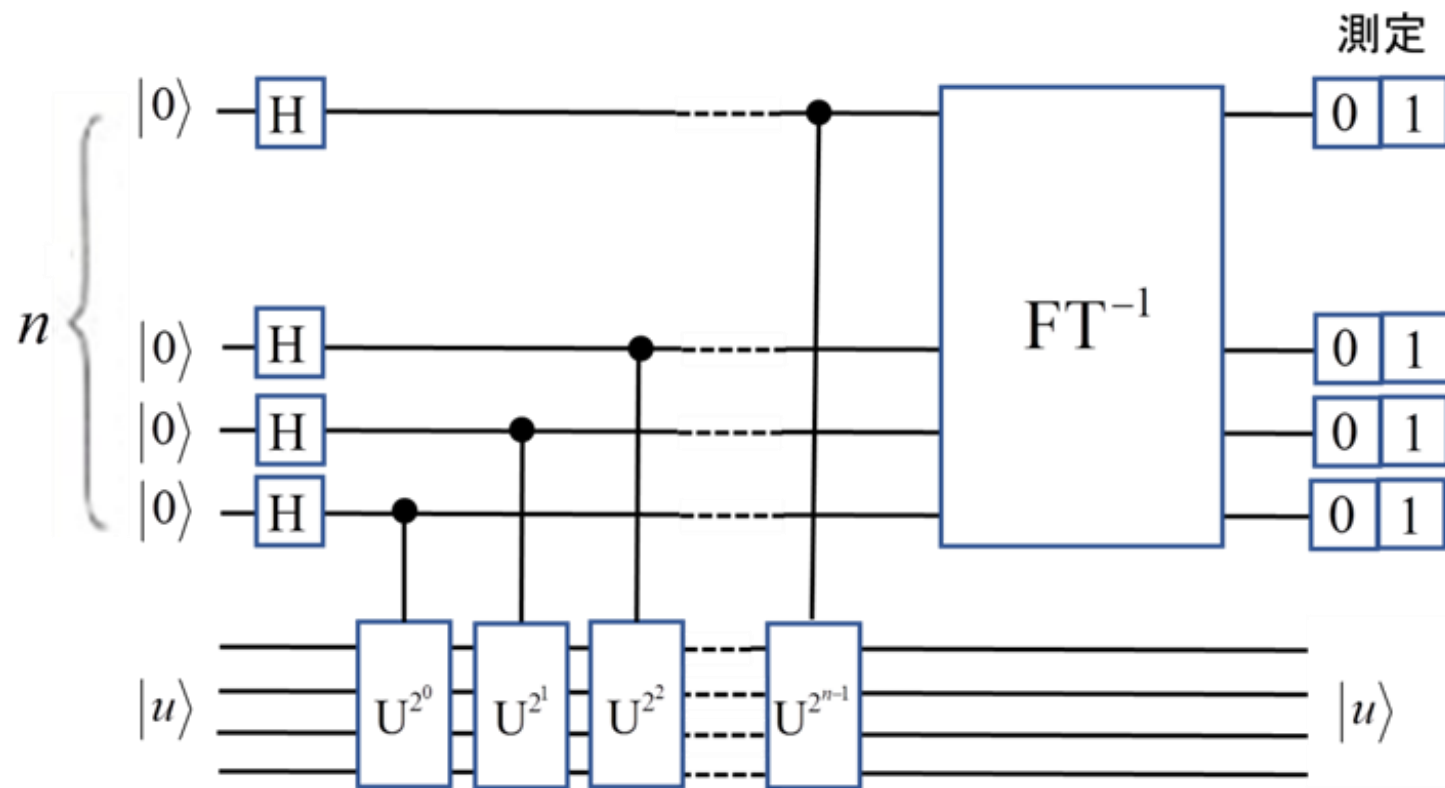
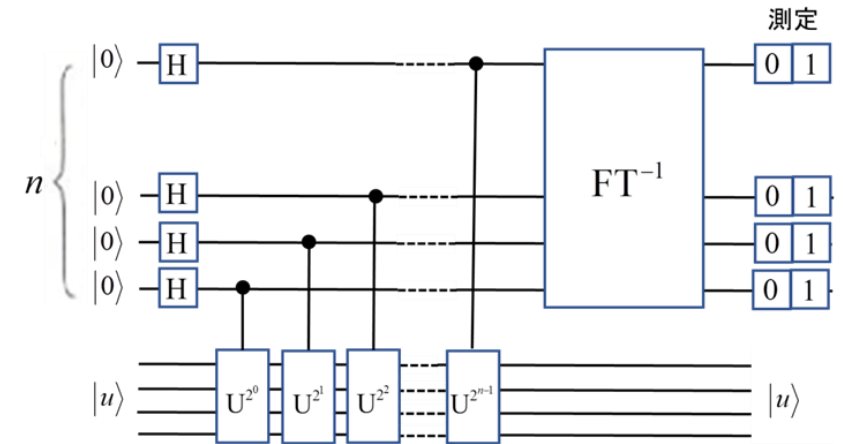


図6.2 位相推定問題を解く量子回路. FT^{-1} は逆量子離散的フーリエ変換, 測定は0か1であるかを明らかにする測定である.

もう一つのグループは、問題の一部である u を表現するので、「問題レジスタ」と呼ぶ。未知であるはずの u が使用されているが、このことについては、6.4節で説明する。

解答レジスタの量子ビットがアダマールゲートを通後直後の全体の状態:

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \otimes \dots \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \otimes |u\rangle$$



解答レジスタの第1ビットの制御
 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$
 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |u\rangle$
 ゲート通過前の状態

と問題レジスタの $|u\rangle$ の

がゲート通過で

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

$$\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |u\rangle + |1\rangle \otimes U^{2^0} |u\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |u\rangle + |1\rangle e^{i2\pi\phi} \otimes |u\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle e^{i2\pi\phi}) \otimes |u\rangle$$

となり, 不思議にも $|u\rangle$ はゲート通過で変化しない.

第 k ビットの場合にははゲート通過で、ひとまず次式のようになる：

$$|u\rangle \rightarrow U^{2^k} |u\rangle = \left(e^{i2\pi\phi}\right)^{2^k} |u\rangle = e^{i2\pi 2^k \phi} |u\rangle$$

ここで、式(5.39)を用いている．したがって、解答レジスタの第 k ビットと問題レジスタ \mathcal{D}^{2^k} 通過後の状態をまとめて書くと

$$|0\rangle \otimes |u\rangle + |1\rangle \otimes e^{i2\pi 2^k \phi} |u\rangle = |0\rangle \otimes |u\rangle + e^{i2\pi 2^k \phi} |1\rangle \otimes |u\rangle = \left(|0\rangle + e^{i2\pi 2^k \phi} |1\rangle\right) \otimes |u\rangle$$

となり、解答レジスタの第 k レジスタが $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ から $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 2^k \phi} |1\rangle)$

に変化するという摩訶不思議なことが起こった．これは驚くべきであろう．

故に、制御ゲートを各量子ビットが通過した後の全体の状態は

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(|0\rangle + e^{i2\pi 2^{n-1} \phi} |1\rangle\right) \otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi 2^{n-2} \phi} |1\rangle\right) \otimes \cdots \otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi 2^0 \phi} |1\rangle\right) \otimes |u\rangle$$

「制御ビットは変化しない」というルールに反しているが論理的な矛盾はない．

話を位相推定問題に戻そう．図の制御ゲートをすべての量子ビットが通過した後の全体の状態は前式である．ところで，前式の ϕ は2進法表示 $\phi \in 0.\phi_1\phi_2\cdots\phi_n$

であり

$$e^{2\pi i 2^{n-1} \phi} = e^{i 2\pi 2^{n-1} (0.\phi_1\phi_2\cdots\phi_n)} = e^{i 2\pi (\phi_1\phi_2\cdots\phi_{n-1} + 0.\phi_n)} = e^{i 2\pi 0.\phi_n}, \quad e^{2\pi i 2^{n-2} \phi} = e^{i 2\pi 0.\phi_{n-1}\phi_n}, \quad \dots, \quad e^{2\pi i 2^0 \phi} = e^{i 2\pi 0.\phi_1\phi_2\cdots\phi_n}$$

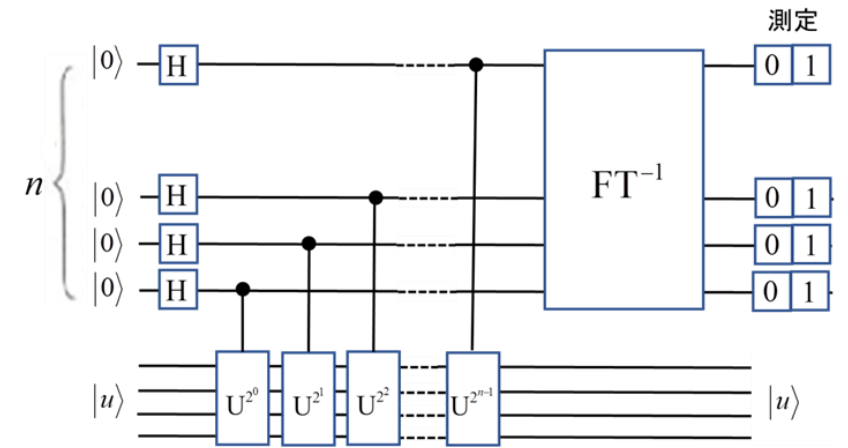
となるので，前式を書き直すと

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \left(|0\rangle + e^{i 2\pi 0.\phi_n} |1\rangle \right) \otimes \left(|0\rangle + e^{i 2\pi 0.\phi_{n-1}\phi_n} |1\rangle \right) \otimes \cdots \otimes \left(|0\rangle + e^{i 2\pi 0.\phi_1\phi_2\cdots\phi_n} |1\rangle \right) \otimes |u\rangle$$

上式から明らかなように，このときの解答レジスタの状態は，式(6.1)で示した量子離散的フーリエ変換の出力状態になっている

$(|\phi_1\phi_2\cdots\phi_n\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\phi_n\rangle)$ をフーリエ変換した結果になっている

したがって，図5.4のように量子レジスタを逆量子離散的フーリエゲートに通すと，その出力は $|\phi_1\phi_2\cdots\phi_n\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\phi_n\rangle$ になる．



これを測定し、出た答えを 2^n で割れば、最終的に得たかった答えとなる。

この計算のステップ数は量子離散的フーリエ変換と同じオーダーであるから、古典的アルゴリズムに比べて、ステップ数は極端に小さくなり、古典コンピュータにくらべて、超高速で計算できる。

今後の応用のため、あえて10進数表記で、このアルゴリズムを書き直して見る。まず、入力状態 $|0\rangle \otimes |u\rangle$ (ただし、0は10進数) は、アダマールゲートにより、解答レジスタの部分が $|0\rangle$ から $|1\rangle$ までの重ね合わせになっている。すなわち

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \otimes \cdots \otimes (|0\rangle + |1\rangle) \otimes |u\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_{n-1}=0}^1 \sum_{k_{n-2}=0}^1 \cdots \sum_{k_0=0}^1 |k_{n-1}\rangle \otimes |k_{n-2}\rangle \otimes \cdots \otimes |k_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_{n-1}=0}^1 \sum_{k_{n-2}=0}^1 \cdots \sum_{k_0=0}^1 |k_{n-1}k_{n-2} \cdots k_0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|00 \cdots 00\rangle + |00 \cdots 01\rangle + \cdots + |11 \cdots 11\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|0\rangle + |1\rangle + \cdots + |2^n - 1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \quad (6.6) \end{aligned}$$

次に、**全体の状態が制御ゲート**を通ると、状態は

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_{n-1}=0}^1 \sum_{k_{n-2}=0}^1 \cdots \sum_{k_0=0}^1 |k_{n-1}\rangle \otimes |k_{n-2}\rangle \otimes \cdots \otimes |k_0\rangle \right) \otimes |u\rangle \\
 & \rightarrow \left(\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_{n-1}=0}^1 \sum_{k_{n-2}=0}^1 \cdots \sum_{k_0=0}^1 |k_{n-1}\rangle \otimes |k_{n-2}\rangle \otimes \cdots \otimes |k_0\rangle \right) \otimes U^{k_{n-1} \times 2^{n-1}} U^{k_{n-2} \times 2^{n-2}} \cdots U^{k_0 \times 2^0} |u\rangle \\
 & = \left(\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k_{n-1}=0}^1 \sum_{k_{n-2}=0}^1 \cdots \sum_{k_0=0}^1 |k_{n-1} k_{n-2} \cdots k_0\rangle \right) \otimes U^{k_{n-1} \times 2^{n-1} + k_{n-2} \times 2^{n-2} + \cdots + k_0 \times 2^0} |u\rangle \\
 & = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \otimes U^k |u\rangle
 \end{aligned} \tag{6.7}$$

ただし、これは単に図6.2の制御 U^{2^k} ゲートの部分を10進法表記に書き直ただけである。

式(6.6)は以下のように変形できる：

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \otimes U^k |u\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n} |k\rangle \otimes e^{i2\pi k\phi} |u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n} e^{i2\pi k\tilde{\phi}/2^n} |k\rangle \otimes |u\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n} e^{i2\pi \tilde{\phi} k/2^n} |k\rangle \otimes |u\rangle = \boxed{\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^N e^{i2\pi \tilde{\phi} k/N} |k\rangle} \otimes |u\rangle \end{aligned} \quad (6.8)$$

ここで $\phi = 0.\phi_1\phi_2\cdots\phi_n$, $\tilde{\phi} = 2^n\phi = \phi_1\phi_2\cdots\phi_n$, $N = 2^n$ が用いられた.

故に, 2進表記のときと同じように, $\otimes|u\rangle$ 以外の部分 $\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi \tilde{\phi} k/N} |k\rangle$

は, 式(6.1)で定義される $|\tilde{\phi}\rangle$ の量子離散的フーリエ変換になっている. 故に, 2進表記のときと同じように逆量子フーリエ変換ゲートを通せば, 解答レジスタに $|\tilde{\phi}\rangle$ が現われ, $N = 2^n$ で割れば, 位相推定問題の答えになる. 逆量子フーリエ変換の具体例は6.5節で述べる.

実は式(6.8)は量子コンピューターにおける最も重要なことを含んでいる。
それは、式(6.8)の1番目と2番目の等号である。

前述したように制御 U^k ゲートの演算 U^k は $|u\rangle$ に作用する。しかし、作用後は演算子 はただの数 $e^{i2\pi k\phi}$ になってしまう。こうなれば、2番目の等号のように、前に持ってくることができる。

そうすると、演算 U^k が作用したにも関わらず $|u\rangle$ はそのまま何をしなかったように見える。一方、本来変化するはずのない、制御ビット $|k\rangle$ に係数 $e^{i2\pi k\phi}$ が現われる。これらは、量子コンピューターの本質であるエンタングルメントの効果である。

つまり、エンタングルしている片方に操作を施すと、空間的に離れているもう片方に影響が及ぶのである。数学的には、演算子から数への変化、さらには係数は移動できるので、量子エンタングルメントの効果が発現する。

5.4 位数計算

位数計算は次節で述べるように、ショアのアルゴリズムで素因数分解するために重要である。位数計算の量子回路では、位相推定問題を解く量子回路が応用されている。この節では、この位数計算の量子回路を考えてみる。

位数とは以下のように定義される。

「互いに素の x と M ($x < M$) が与えられたとき

$$x^r \bmod M = 1 \tag{6.9}$$

となる最小の自然数 r を位数という。」

$$5^0 \bmod 6 = 1, \quad 5^1 \bmod 6 = 5, \quad 5^2 \bmod 6 = 1, \quad 5^3 \bmod 6 = 5, \\ 5^4 \bmod 6 = 1, \dots$$

通常のコンピュータで r を計算するのは難しいとされている.

$$\text{量子コンピュータでは} \quad U|y\rangle \equiv |xy \bmod M\rangle \quad (6.10)$$

を満たす U と, この固有状態ベクトル $|u_s\rangle$ と固有値 $e^{i2\pi\frac{s}{r}}$ ($s = 0, 1, \dots, r-1$)

$$U|u_s\rangle = e^{i2\pi\frac{s}{r}}|u_s\rangle$$

に対して, 位相推定問題を解くことになる.

$$\text{初めに上の } |u_s\rangle \text{ が } |u_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{j=0}^{r-1} e^{-i2\pi j\frac{s}{r}} |x^j \bmod M\rangle \quad (6.11)$$

としてみよう. この時 $U|u_s\rangle = e^{i2\pi\frac{s}{r}}|u_s\rangle$ が言えることを示そう. そこで,

$$U|x^j \bmod M\rangle = |x^{j+1} \bmod M\rangle$$

を示す.

$x^j \bmod M = q$ (q は自然数) とすると, $x^j = pM + q$ (p は自然数) と書けるので式(6.10)に $y = x^j \bmod M$ を代入すると

$$U|x^j \bmod M\rangle = |x(x^j \bmod M) \bmod M\rangle = |xq \bmod M\rangle$$

$$\text{また } |x^{j+1} \bmod M\rangle = |x \cdot x^j \bmod M\rangle = |x(pM + q) \bmod M\rangle = |xq \bmod M\rangle$$

この2式を比べることにより, 上で仮定した式が成立する.

これを用いて, $U|u_s\rangle$ を計算する:

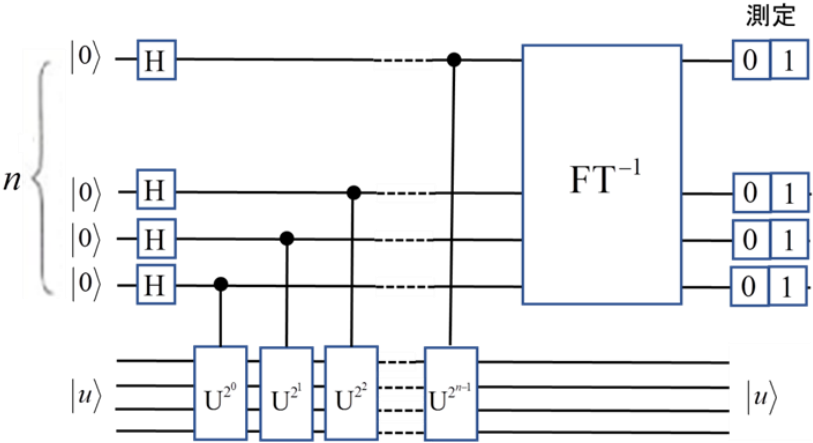
$$\begin{aligned} U|u_s\rangle &= U \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{j=0}^{r-1} e^{-i2\pi j \frac{s}{r}} |x^j \bmod M\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{j=0}^{r-1} e^{-i2\pi j \frac{s}{r}} U|x^j \bmod M\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{j=0}^{r-1} e^{-i2\pi j \frac{s}{r}} |x^{j+1} \bmod M\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{r}} \left(e^{-i2\pi 0 \frac{s}{r}} |x^1 \bmod M\rangle + e^{-i2\pi 1 \frac{s}{r}} |x^2 \bmod M\rangle + \cdots + e^{-i2\pi (r-2) \frac{s}{r}} |x^{r-1} \bmod M\rangle \right. \\
&\quad \left. + e^{-i2\pi (r-1) \frac{s}{r}} |x^r \bmod M\rangle \right) \\
&= e^{i2\pi \frac{s}{r}} \frac{1}{\sqrt{r}} \left(e^{-i2\pi 1 \frac{s}{r}} |x^1 \bmod M\rangle + e^{-i2\pi 2 \frac{s}{r}} |x^2 \bmod M\rangle + \cdots + e^{-i2\pi (r-1) \frac{s}{r}} |x^{r-1} \bmod M\rangle \right. \\
&\quad \left. + e^{-i2\pi r \frac{s}{r}} |x^0 \bmod M\rangle \right) \\
&= e^{i2\pi \frac{s}{r}} \frac{1}{\sqrt{r}} \left(e^{-i2\pi 0 \frac{s}{r}} |x^0 \bmod M\rangle + e^{-i2\pi 1 \frac{s}{r}} |x^1 \bmod M\rangle + e^{-i2\pi 2 \frac{s}{r}} |x^2 \bmod M\rangle + \cdots \right. \\
&\quad \left. + e^{-i2\pi (r-1) \frac{s}{r}} |x^{r-1} \bmod M\rangle \right) \\
&= e^{i2\pi \frac{s}{r}} |u_s\rangle
\end{aligned}$$

ここで $|x^r \bmod M\rangle = |1\rangle = |1 \bmod M\rangle = |x^0 \bmod M\rangle$, $e^{-i2\pi r \frac{s}{r}} = e^{-i2\pi s} = 1 = e^{-i2\pi 0 \frac{s}{r}}$ を用いた.

位相推定問題を解く量子回路(右図)を用いれば、位数計算は簡単にできてしまうように見える。但し、**図の量子回路を動かすには、 $|u\rangle$ が分かっているなければならない。** そのためには位数計算ができていなければならない。次の事実を使えば、この難局を乗り越えることができる。その事実とは、右の式である（証明は後出）。

$|u\rangle$ を用意することはできないが、 $|1\rangle$ ならいつでも用意できるので、 $|u\rangle$ の代わりに $|1\rangle$ を問題レジスタの入力とする。



図

$$\frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} |u\rangle = |1\rangle$$

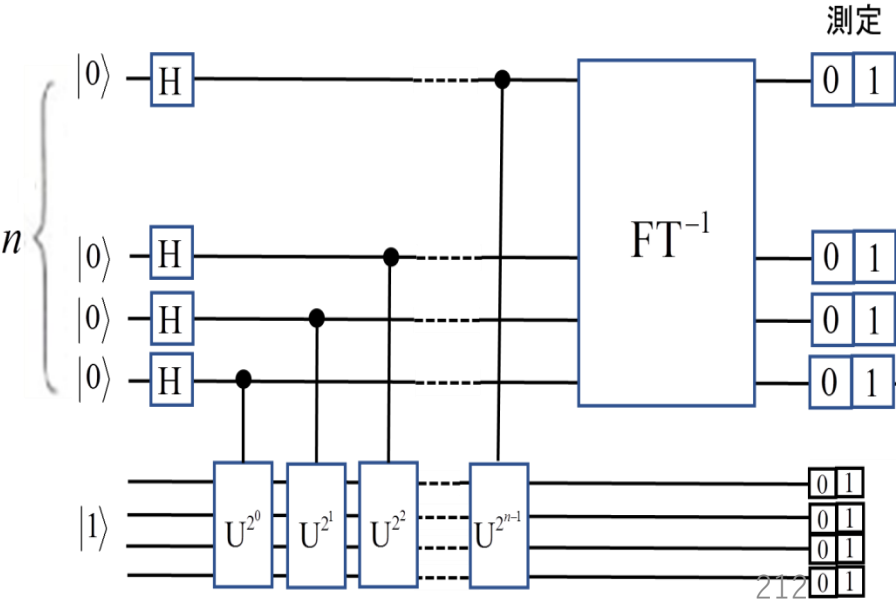


図6.3

まず, $\frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} |u_s\rangle = |1\rangle$ を確かめる.

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} |u_s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{j=0}^{r-1} e^{-i2\pi j \frac{s}{r}} |x^j \bmod M\rangle = \frac{1}{r} \sum_{j=0}^{r-1} \left(\sum_{s=0}^{r-1} e^{-i2\pi j \frac{s}{r}} \right) |x^j \bmod M\rangle \\
 &= \frac{1}{r} \sum_{j=0}^{r-1} \left(\frac{1 - e^{-i2\pi j}}{1 - e^{-i2\pi \frac{j}{r}}} \right) |x^j \bmod M\rangle = \frac{1}{r} \lim_{j \rightarrow 0} \left(\frac{1 - e^{-i2\pi j}}{1 - e^{-i2\pi \frac{j}{r}}} \right) |x^0 \bmod M\rangle \quad \text{寄与は } j=0 \text{ のみ} \\
 &= \frac{1}{r} r |1 \bmod M\rangle = 1
 \end{aligned}$$

ここで右式を用いた.

$$\frac{1}{r} \lim_{j \rightarrow 0} \left(\frac{1 - e^{-i2\pi j}}{1 - e^{-i2\pi \frac{j}{r}}} \right) = \frac{1}{r} \lim_{j \rightarrow 0} \left(\frac{i2\pi j}{i2\pi \frac{j}{r}} \right) = 1$$

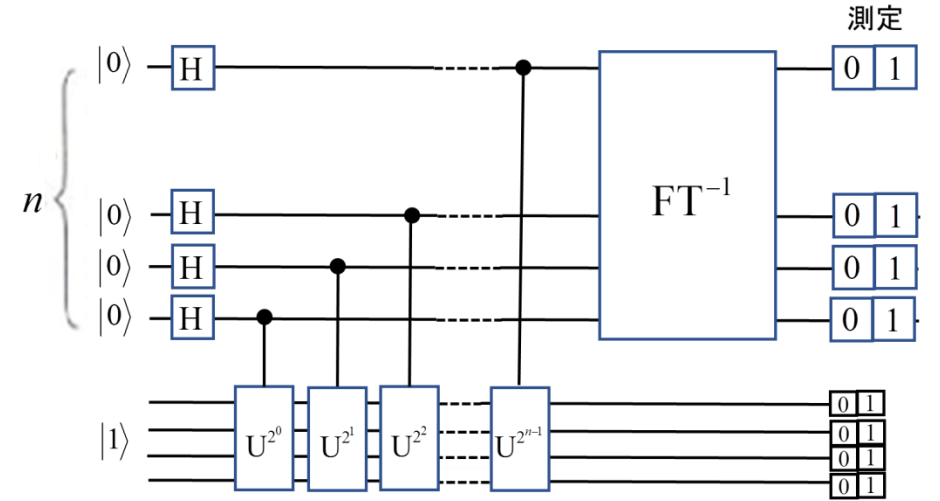
図6.3の量子回路を動かして見よう．

これには，10進法表示の式(6.2)を使うのが便利である．制御 $U^{2^0}, \dots, U^{2^{n-1}}$ ゲートを全体の状態を通ると，状態は式(6.7)により

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \otimes U^k |1\rangle \quad (6.12)$$

変形すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \otimes U^k |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \otimes U^k \left[\frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} |u_s\rangle \right] = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \otimes U^k |u_s\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \otimes e^{i2\pi k \frac{s}{r}} |u_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i2\pi k \frac{s}{r}} |k\rangle \otimes |u_s\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} e^{i2\pi k \frac{\tilde{s}}{r} / 2^n} |k\rangle \otimes |u_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi k \frac{\tilde{s}}{r} / N} |k\rangle \otimes |u_s\rangle \end{aligned}$$



上式より解答レジスタは、0から $r-1$ までの r 通りの s を持つ状態の重ね合わせになっていることが分かる。ここで、測定すると、重ね合わせの状態から(測定)の基底状態へ「波束収縮」という量子力学の性質を利用するために、解答レジスタを測定する。この測定により重ね合わせだった解答レジスタは一つの状態になる。

また、この波束の収束を用いると、問題レジスタを測定することにより、計算を簡単にすることもできる。

問題レジスタは $|u_s\rangle$ の重ね合わせ状態になっており、その $|u_s\rangle$ 自身も式(6.11)から $|x^j \bmod M\rangle$ の重ね合わせになっている。このことから、問題レジスタを測定すると、観測された $|x_j \bmod M\rangle$ に波束が収束し、残りの波速は0となる。これにより、場合の数が減り、計算が簡単になる(詳しくは次節で述べる)。

このようにしていくと最終的に、解答レジスタの状態は \tilde{s}/r を量子離散的にフーリエ変換したものになるから、最後にこれを逆量子離散的フーリエ変換すると \tilde{s}/r が求まり、さらに $N=2^n$ で割れば s/r が求まる。具体例は次節で。

次の節での見通しを良くするため，もう少し説明を加える． 式(6.10)：

$$U|y\rangle \equiv |xy \bmod M\rangle$$

とすると $U^k|1\rangle = |q^k \bmod M\rangle = |x^k \bmod M\rangle$ が成立：

$$\because U|y\rangle \equiv |xy \bmod M\rangle, \quad \text{Let } x = pM + q$$

$U^k|1\rangle = |q^k \bmod M\rangle$ の証明

数学的帰納法： $y = 1 \rightarrow U|1\rangle \equiv |x \bmod M\rangle = |q\rangle \rightarrow U^2|1\rangle = U|q\rangle = |xq \bmod M\rangle = |q^2 \bmod M\rangle$

if $U^k|1\rangle = |q^k \bmod M\rangle \rightarrow U^{k+1}|1\rangle = U|q^k \bmod M\rangle = |xq^k \bmod M\rangle = |q^{k+1} \bmod M\rangle$ *q.e.d.*

$U^k|1\rangle = |x^k \bmod M\rangle$ の証明

一方 $x^k = (pM + q)^k \rightarrow x^k \bmod M = q^k \bmod M \rightarrow U^k|1\rangle = |q^k \bmod M\rangle = |x^k \bmod M\rangle$ *q.e.d.*

したがって，式(6.12)の別の形として

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \otimes U^k|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} |k\rangle \otimes |x^k \bmod M\rangle \quad (6.13)$$

この式から、制御 U^{2^k} ゲートの行っていることは、実際には x を0から N までの数でしらみつぶしに、もっと言うと全部を重ね合わせの形で x を M で割った余りを計算していることになる。制御 $U^{2^0} \dots U^{2^{n-1}}$ ゲート通過後、問題レジスターを測定し、解答レジスターを逆量子離散的フーリエ変換すると、求める位数 r が $x^r \bmod M = 1$ を満たす。

$$x^r = pM + 1 \text{ なので } x^{2r} \bmod M = (pM + 1)x^r \bmod M = (pMx^r \bmod M) + (x^r \bmod M) = x^r \bmod M = 1$$

$$x^{nr} \bmod M = 1 \text{ ならば } x^{(n+1)r} \bmod M = (p'M + 1)x^r \bmod M = x^r \bmod M = 1$$

である。故に、解答レジスターには r の周期で係数の絶対値の2乗(存在確率)がゼロより大きな $|k\rangle$ が現われ、それから最終的に r を求めることになる。

ショアのアルゴリズムでは、素因数分解したい M についての組 (x, r) を見つけ出すことになるが、このとき x の選択が拙くて、限られた量子ビット数 n 、つまり $|N-1\rangle$

までの中では r の周期が長すぎて、係数の絶対値の2乗がどれも十分には大きくならない場合がある。このような場合は、 x を選び直すことになる。

量子エンタングルメントの効果としては，処理のゲートを極端に減らすことと，波束を収束させ計算する場合の数を減らしていることが挙げられる．

6.5 ショアのアルゴリズムの実際

与えられた数 N を素因数分解するアルゴリズムとは、以下のようなものである。

(1) 1から $N-1$ の間で任意に x を選ぶ。もし x と N の最大公約数($\gcd(x, N)$)が 1

より大きいならば $\gcd(x, N)$ を出力する。他の素因数は N/x である。

(2) $x, N (x < N)$ の位数 r を計算する ($x^r \bmod N = 1$)。 $\gcd(x^{r/2} - 1, N)$

(3) もし r が偶数であり $x^{r/2} \bmod N \neq 1$ ならば, $\gcd(x^{r/2} + 1, N)$ と
を計算する。もしこれらのうち一つが N の素因数ならば, それを出力する。
だめなら(1)に戻る。

特に、最大公約数を計算するアルゴリズムはユークリッドの互除法として有名である。

したがって、ショアのアルゴリズムの「肝」は(2)の位数計算を量子コンピュータで行い高速化することである。

具体例を考える．最も簡単な例として、 $M = 15$ の場合を量子コンピューターで素因数分解してみよう． $x = 7$ を選ぶことにすると、(1)は当てはまらないので位数計算(2)へ進む．

$$7^0 \bmod 15 = 1, \quad 7^1 \bmod 15 = 7, \quad 7^2 \bmod 15 = 4, \quad 7^3 \bmod 15 = 13, \quad 7^4 \bmod 15 = 1, \quad \dots$$

$r=4$ $7^4 \bmod 15 = 1, \quad 7^2 \pm 1 = (50, 48), \quad \gcd(50, 15) = 5, \quad \gcd(48, 15) = 3, \quad 5 \times 3 = 15$
で

まず、解答レジスターに $|0\rangle$ ，問題レジスター $|1\rangle$ を入力する．アダマールゲートを通過すると、 $\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \otimes |1\rangle$ 式(6.6)により全体の状態は

$2^n \geq M$ なので, $M=15$ の場合だから $n=4$ とする. 制御 U^k ゲートを通過させると, 式(6.13)は

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \otimes U^k |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} |k\rangle \otimes |x^k \bmod M\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} |k\rangle \otimes |7^k \bmod 15\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{4}} (|0\rangle \otimes |7^0 \bmod 15\rangle + |1\rangle \otimes |7^1 \bmod 15\rangle + |2\rangle \otimes |7^2 \bmod 15\rangle + \dots \\
&\quad + |15\rangle \otimes |7^{15} \bmod 15\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{4}} (|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |7\rangle + |2\rangle \otimes |4\rangle + |3\rangle \otimes |13\rangle + |4\rangle \otimes |1\rangle + |5\rangle \otimes |7\rangle + |6\rangle \otimes |4\rangle + \dots \\
&\quad + |7\rangle \otimes |13\rangle + \dots + |15\rangle \otimes |13\rangle)
\end{aligned}$$

最後の部分を見ると, 周期が4で $r=4$ であることが分かる.

次に問題レジスタを測定する。可能性としては $x^k \bmod 15 = 7^k \bmod 15 = 1, 4, 7, 13$ を測定結果として得る場合の4通りがある。これらは等しい確率で起きるが、どの場合でも高い確率で最終的な答え、つまり素因数分解の結果に行き着くことが知られている、ここでは、例として、測定結果が $7^k \bmod 15 = 4$ だった場合を考えよう。このとき2ビット目が4であるときの1ビット目は、 $k = 2, 5, 10, 14$ であり、解答レジスタの状態は以下のようなになる。

$$\frac{1}{2}(|2\rangle + |6\rangle + |10\rangle + |14\rangle)$$

全体に掛かる係数が $1/4$ から $1/2$ に変化したのは、問題レジスタを測定することによって、4に確定した状態に変化して（波束が収束して）、場合の数が16の $1/4$ の4に減ったためである。

最後に、解答レジスタを逆離散的フーリエ変換する。 $n = 4$ の場合の逆量子離散的フーリエ変換の量子回路は図のようになる。

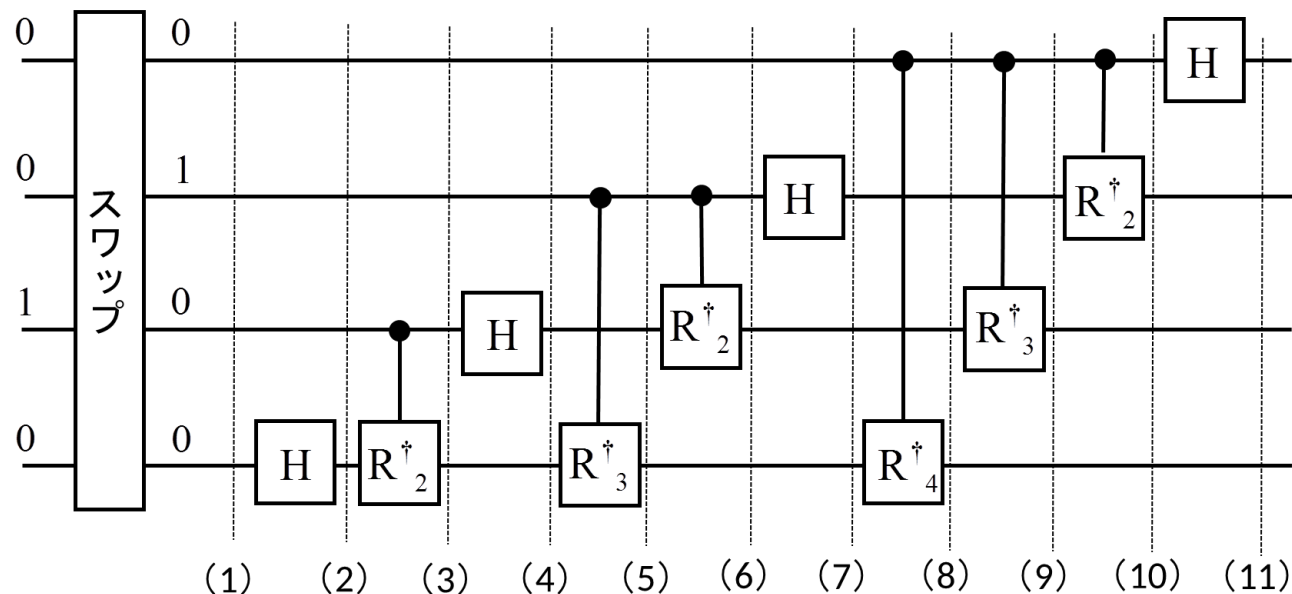


図6.4 $n = 4$ の場合の逆量子離散的フーリエ変換の量子回路. 括弧付きの番号は各ステップを示している.

ここで，制御 R_m^\dagger ゲートは，制御ビットが1のときのみの変換が起こり，0の場合は素通りである：

$$|0\rangle \rightarrow |0\rangle$$

$$|1\rangle \rightarrow e^{-i\frac{2\pi}{2^m}} |1\rangle$$

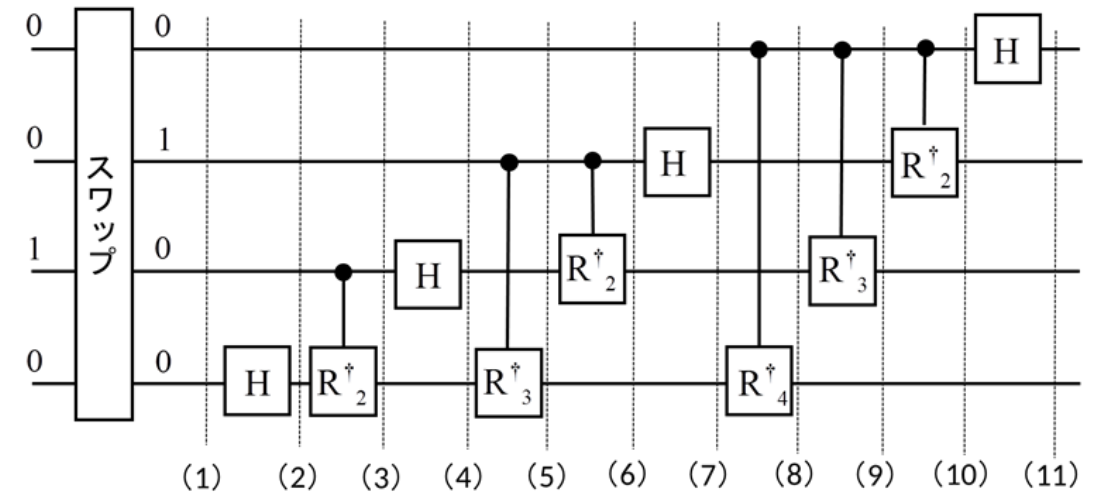
この量子回路に $\frac{1}{2}(|2\rangle + |6\rangle + |10\rangle + |14\rangle)$ を入力するのであるが，量子計算機はすべて線形計算なので， $|2\rangle, |6\rangle, |10\rangle, |14\rangle$ を別々に図6.4の量子回路に入力し，それらの出力を後で足しても良い．ここでは $|2\rangle = |0010\rangle$ の場合を実際にやってみる．

まず，2は2進数で表記すると0010であるから，この量子回路への入力は

$$|0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes |0\rangle$$

スワップゲートを通過した状態(1)は

$$|0\rangle \otimes |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle$$



次のアダマールゲートを通過した状態(2)は $|0\rangle \otimes |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$

第3量子ビットが制御 R_2^\dagger を通過した状態(3)は，第3量子ビットが0なので制御ビットである第4ビットの状態の如何に関わらずそのままである．第3量子ビットが次のアダマールゲートを通過した状態(4)は

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

第4量子ビットが R_3^\dagger ゲートを通過した状態(5)は $e^{-i\frac{2\pi}{2^3}} = (1-i)/\sqrt{2}$

であることを用いると

$$|0\rangle \otimes |1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}}|1\rangle\right)$$

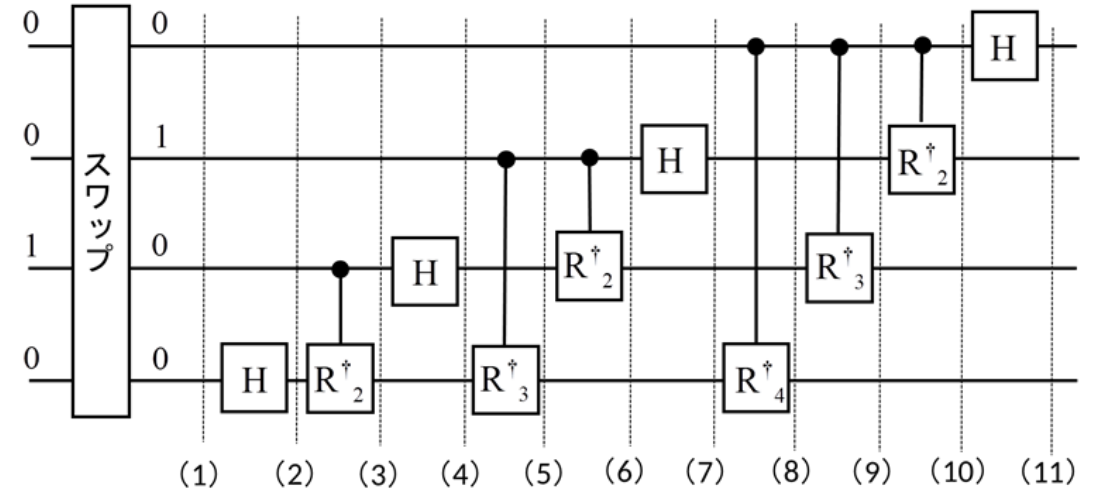
同様に次の R_2^\dagger ゲートを通過した状態(6)は $e^{-i\frac{2\pi}{2^2}} = -i$

であることを用いると

$$|0\rangle \otimes |1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}}|1\rangle\right)$$

さらに、第2量子ビットがアダマールゲートを通過した状態(7)は

$$|0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}}|1\rangle\right)$$



第1量子ビットは0なので，制御 ビットの状態によらずそのままとなり \mathbf{R}_2^\dagger 制御ゲート通過後の状態(10)まではそのままの状態であり続ける．したがって出力される状態は

$$\begin{aligned}
 |2\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}}|1\rangle\right) \\
 &= \frac{1}{4}\left(|0000\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}}|0001\rangle - i|0010\rangle - i\frac{1-i}{\sqrt{2}}|0011\rangle \right. \\
 &\quad - |0100\rangle - \frac{1-i}{\sqrt{2}}|0101\rangle + i|0110\rangle + i\frac{1-i}{\sqrt{2}}|0111\rangle \\
 &\quad + |1000\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}}|1001\rangle - i|1010\rangle - i\frac{1-i}{\sqrt{2}}|1011\rangle \\
 &\quad \left. - |1100\rangle - \frac{1-i}{\sqrt{2}}|1101\rangle + i|1110\rangle + i\frac{1-i}{\sqrt{2}}|1111\rangle\right)
 \end{aligned}$$

同様に

$$\begin{aligned}
|6\rangle \rightarrow & \frac{1}{4} \left(|0000\rangle - i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0001\rangle + i |0010\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0011\rangle \right. \\
& - |0100\rangle + i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0101\rangle - i |0110\rangle - \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0111\rangle \\
& + |1000\rangle - i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1001\rangle + i |1010\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1011\rangle \\
& \left. - |1100\rangle + i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1101\rangle - i |1110\rangle - \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1111\rangle \right) \\
|14\rangle \rightarrow & \frac{1}{4} \left(|0000\rangle + i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0001\rangle + i |0010\rangle - \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0011\rangle \right. \\
& - |0100\rangle - i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0101\rangle - i |0110\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0111\rangle \\
& + |1000\rangle + i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1001\rangle + i |1010\rangle - \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1011\rangle \\
& \left. - |1100\rangle - i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1101\rangle - i |1110\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1111\rangle \right)
\end{aligned}
\quad
\begin{aligned}
|10\rangle \rightarrow & \frac{1}{4} \left(|0000\rangle - \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0001\rangle - i |0010\rangle + i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0011\rangle \right. \\
& - |0100\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0101\rangle + i |0110\rangle - i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |0111\rangle \\
& + |1000\rangle - \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1001\rangle - i |1010\rangle + i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1011\rangle \\
& \left. - |1100\rangle + \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1101\rangle + i |1110\rangle - i \frac{1-i}{\sqrt{2}} |1111\rangle \right)
\end{aligned}$$

式(5.70)～(5.73)を加えると $|0000\rangle - |0100\rangle + |1000\rangle - |1100\rangle$, は同符号
 で足し合うが, 他のものは消し合ってしまうので,
 $\frac{1}{2}(|2\rangle + |6\rangle + |10\rangle + |14\rangle)$
 の状態を逆量子フーリエ変換した結果は

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4} (4|0000\rangle - 4|0100\rangle + 4|1000\rangle - 4|1100\rangle) = \frac{1}{2} (|0\rangle - |4\rangle + |8\rangle - |12\rangle)$$

位数計算問題を解くためには, 解答レジスターを測定する. 測定の結果として
 得られる値は, 0, 4, 8, 12の場合の4通りである. 位数を得るには, 2^4 これらを
 で割る必要があるが, その結果 $0, 1/4, 2/4, 3/4$ の4通りの場合がある.

位数 r は4以下の偶数と考えられるが, $r = 2$ は $7^2 \bmod 15 \neq 1$ だから位数でない.

したがって, このような位数計算を量子コンピューターを用いて行くと, 答
 として得られる最小の自然数は4である. 4を得た場合 $7^4 \bmod 15 = 1$ であ
 るから位数を得たことになり, 最終ステップである(3)に進む.

$r = 4$ は明らかに(3)の条件を満たすから

$$\gcd(7^{\frac{4}{2}} - 1, 15) = \gcd(48, 15) = 3, \quad \gcd(7^{\frac{4}{2}} + 1, 15) = \gcd(50, 15) = 5$$

であるので、正解が得られた.

第7章 量子計算機的方式調査

2023/05/07

測位技術振興会 (SAPT) 知能・情報・エネルギー分科会

毛利篤史

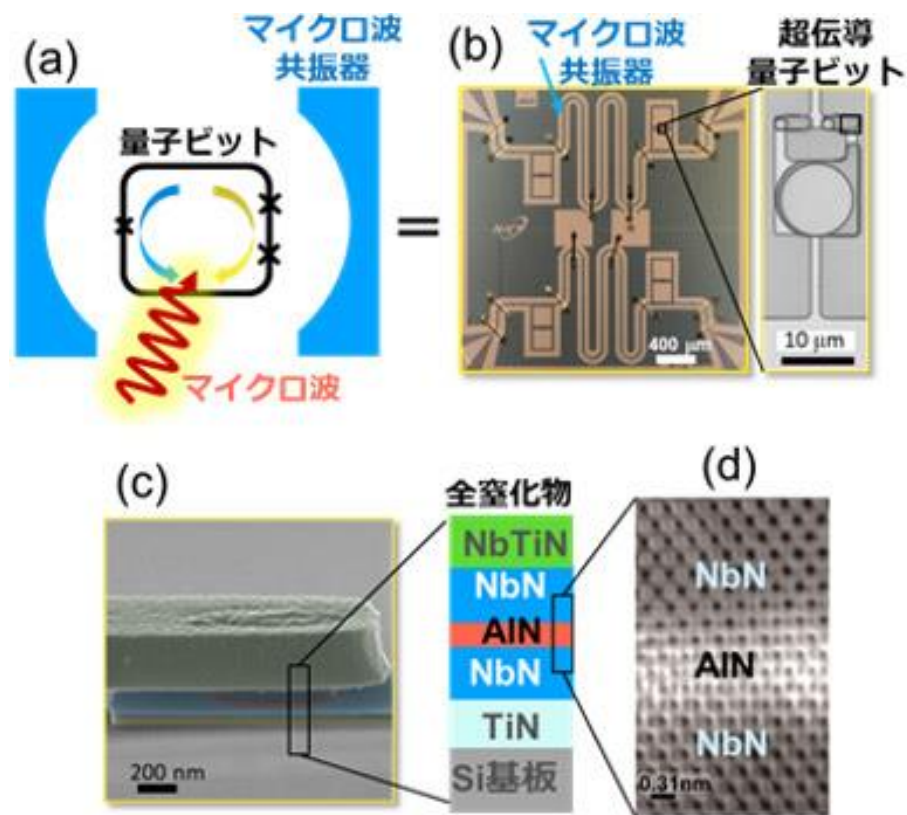
量子計算機5方式

	超電導	光	イオントラップ ^o	シリコン	冷却原子
会社	Google, IBM 中国 科学技術大学	東京大学+NTT 米国サイクオンタム 中国 科学技術大学	米国IONQ(イオンキュー)社 米国Honeywell(ハネウェル)社	米国Intel 米国IBM 産総研、理研	米国Atom Computing 仏国Pasqal
方式概要	超伝導材料を用いた電子回路上でジョセフソン接合というトンネル接合素子を用いて量子ビットを実現する方式	電磁波の一種で量子力学の法則に従う光の粒子（光子）を使って量子情報を表現し操作する方式	物質を構成する原子や分子をイオン化させた状態(イオン化粒子)にして電場や磁場中で制止させ、このイオン化粒子を計算単位のビットとして計算に応用する方式	量子ビットとして使う電子をシリコンチップ上の量子ドットに閉じ込めることで電子のスピンを制御する方式	光ピンセットを用いてミクロン間隔で整列させた冷却原子をベースにレーザー光で原子を冷却・捕捉する方式
長短概要	超伝導体は電気抵抗がゼロになる物質でクーパー対という電子のペアが量子ビットとして機能する。超伝導回路はマイクロ波を用いて高速で高精度な操作が可能であるが低温環境が必要で冷却コストが高いという欠点がある。	光子は電磁場の量子で偏光や位相などの性質を利用して情報を表現する。光方式は量子ビット間の相互作用が強く大規模化が容易であるが、量子ビットの操作や測定が困難で高精度な光源や検出器が必要である。	イオンは荷電粒子で電磁場を用いて自由空間内に閉じ込めて保持する。イオントラップ方式はレーザーを用いて長時間のコヒーレンスと高い操作精度が実現可能であるが、量子ビット数の増加に伴うトラップ電圧やレーザー制御の複雑化が課題である。	既存の半導体製造技術を応用可能であり多数の素子をチップに集積化可能であるが、量子ビットの制御が難しいことや温度やノイズに敏感である。	容易に大規模化が可能な点や高コヒーレンスな点(量子の波としての純度が高い点)において画期的な潜在能力があるが、極低温環境が必要なことやレーザー光の安定性が課題である。

超電導方式量子計算機

超伝導材料を用いた電子回路上でジョセフソン接合というトンネル接合素子を用いて量子ビットを実現する方式

外部から印加した電圧や磁場によってジョセフソン効果(弱く結合した2つの超伝導体の間の超伝導電子対のトンネル効果)によって流れる超伝導電流を制御。この量子ビット(トランズモン)は非線形インダクタであるジョセフソン接合とキャパシタの単純な並列共振回路で構成。この量子状態はマイクロ波パルスを用いて操作可能。



◆量子ビット操作

インダクタが非線形なトランズモンの離散準位のうちの最低二準位を量子ビットとして使用し、この準位間隔に共鳴するマイクロ波パルスを照射することにより操作する。

◆量子ビット読み出し

量子ビットと分散的に結合した共振器の共振周波数が量子ビットの状態に依存することを利用して読み出す。非常に低雑音なジョセフソンパラメトリック増幅器が必要。

<長所>

- ・マイクロ波(周波数が数GHzの電磁波)は超伝導回路の共振周波数と一致するため、マイクロ波照射により量子重ね合わせやもつれ現象を発生させ高速な量子演算を実現可能。
- ・超伝導回路は低温環境動作のため外部ノイズや熱の影響を受けにくく量子コヒーレンス(量子ビットが重ね合わせ状態を保つ時間)が長いいため高精度な量子演算が可能。
- ・超伝導回路は半導体技術と互換性があり既存の製造設備や工程を利用して小型化し多数の量子ビット集積が可能。

<短所>

絶対零度に近い低温環境が必要。そのために希釈冷凍機という特殊な装置を使用し量子ビットを10ミリケルビン程度に冷却。希釈冷凍機は高価で大きく消費電力も大きいため、冷却コストは非常に高い。また量子ビット数の増加に伴って冷却する範囲も広くなるため冷却コストはさらに高くなる。

光量子方式量子計算機

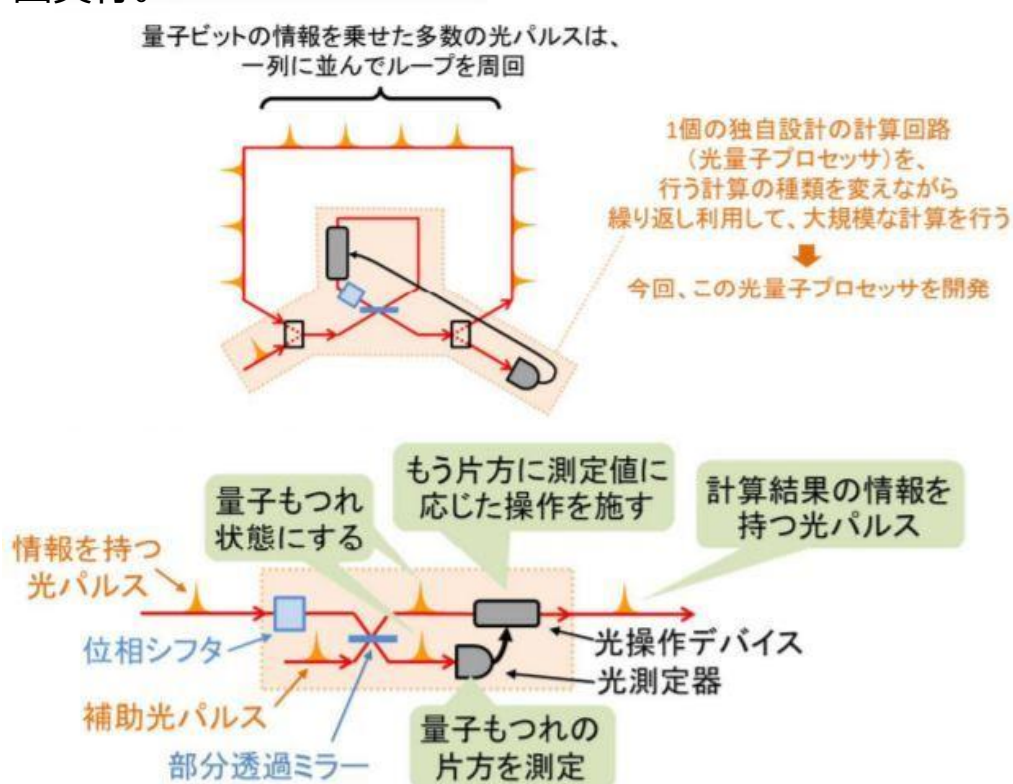
電磁波の一種で量子力学の法則に従う光の粒子（光子）を使って量子情報を表現し操作する方式

(1)光ファイバ結合型量子光源方式

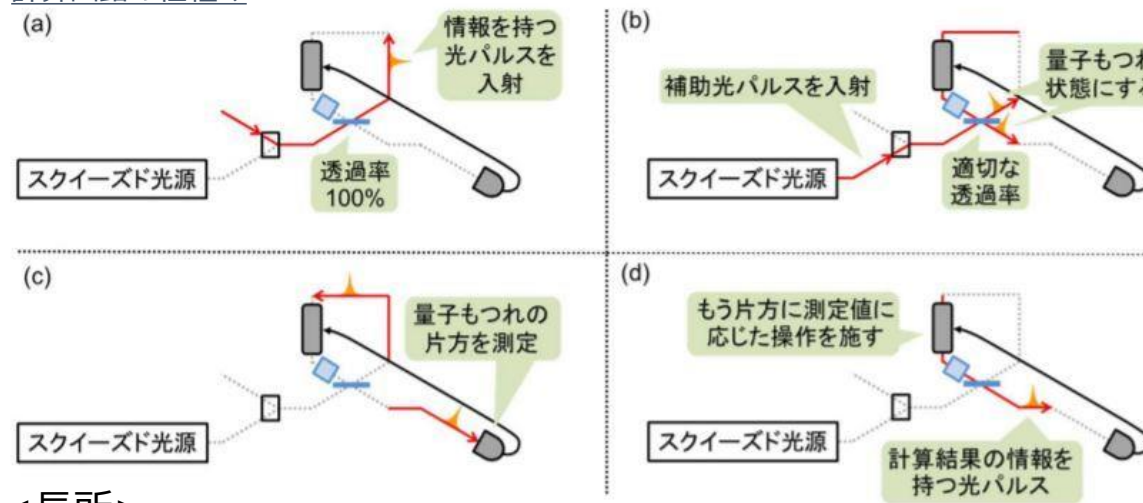
東京大学の研究チームが光ファイバを使って多数の量子光源を効率的に結合することで大規模な光量子計算機を実現。ラックサイズで2万5000個の量子ビット（光パルス）を実現。

(2)1ループ方式

NTTと東京大学が光量子プロセッサを開発。光回路にループ構造を持たせて、量子テレポーテーション回路の無限回繰り返して大規模な量子演算を実行。①2光パルス間の量子もつれ合成、②片方の光パルスの測定、③もう片方の光パルスへの操作の一連の手順で四則計算などの単純な計算を1回実行。



計算回路の仕組み



<長所>

- ・量子ビット間の相互作用が強く大規模化が容易
- ・常温・大気中で動作が可能
- ・光を使った量子通信との相性の良さ
- ・高クロックによる高速な計算処理が可能

<短所>

光子は相互作用が弱く、他の物質とほとんど影響し合わないため、光子同士のエンタングルメントや論理演算を実現するには高度な技術が必要である。また光子の測定には検出器が必要であるが検出器は高価で大きく消費電力も大きいので大規模化には課題がある。

イオントラップ方式量子計算機

物質を構成する原子や分子をイオン化させた状態(**イオン化粒子**)にして電場や磁場中で制止させ、このイオン化粒子を計算単位のビットとして計算に応用する方式

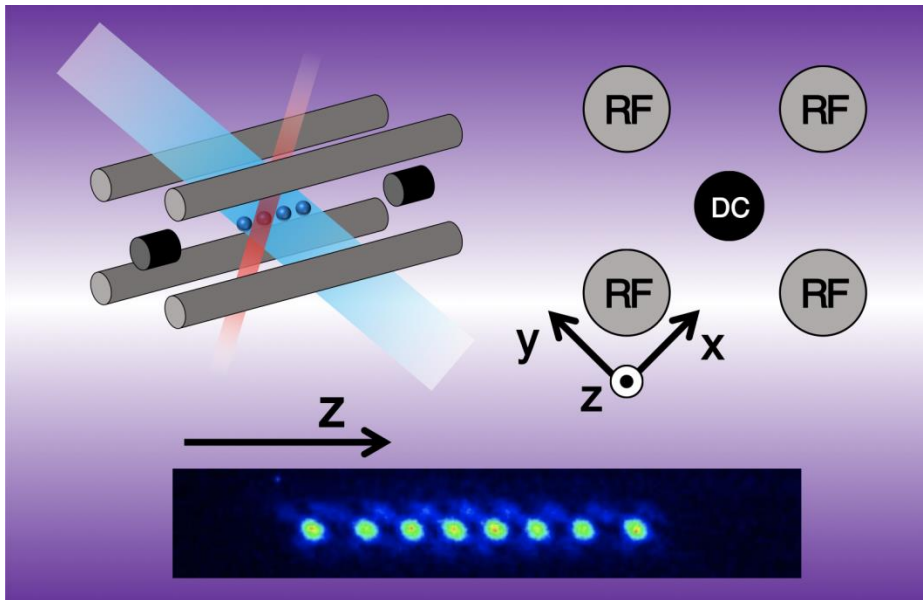
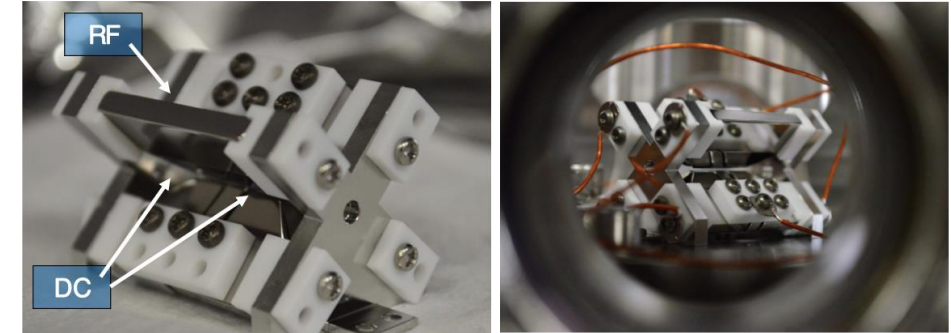
イオン化粒子を空間中に制止(捕獲)する方法

(1) ペニングトラップ(Penning trap)方式

静磁場と静電場によってイオンを捕獲する方式。真空にした装置内にイオン化させやすい希ガスなどの元素を注入しイオン化させ、外部電極からの電場と磁場によりイオン化粒子の振る舞いを限定させ捕獲する方法。強力な電場と磁場をかけることが必要のために装置が大型。

(2) パウルトラップ(Paul trap)方式 (高周波イオントラップ)

静電場と高速で周期的に変動する高周波電場(またはRF(Radio Frequency)電場)によりイオン化粒子を捕獲する方法。線形四重極ロッド(電極)に電圧を加えることで空間ポテンシャルが生成され、中心の最もポテンシャルが低い場所にイオン化粒子を捕獲。イオン化粒子が高周波加熱されるため安定性に欠けるが装置を小型化可能。



<長所>

- ・良く定義されたスケーラブルな量子ビットが存在
- ・量子ビットの初期化が可能
- ・量子ビットのデコヒーレンス時間がゲート操作時間よりも十分長い
- ・universal quantum gate setが実現可能
- ・量子ビットの量子状態の読み出しが可能
- ・構造的に比較的小型化が可能

<短所>

トラップ電圧(イオンを横一列に並べるために必要な電圧)は並べるイオン数増でトラップ電圧も増大しトラップの安定性が低下する。そのため一つのトラップに数百～数千のイオンを並べて制御するのは非常に難しく現在の技術では実現できない。

レーザー制御(イオン状態操作のために必要なレーザーの周波数や強度を調整は)量子ビット数増でレーザー制御も複雑化し誤り率が上昇する。そのため高精度なレーザー制御システムや誤り訂正技術が必要である。

シリコン方式量子計算機

量子ビットとして使う電子をシリコンチップ上の量子ドットに閉じ込めることで電子のスピンを制御する方式

シリコン上に10nm程度の領域（量子ドット）を形成し閉じ込めた電子で磁場により電子スピンの2準位系をつくり、マイクロ波を使って電子状態を操作（重ね合わせ）して演算する仕組み。産総研は、2021年に半導体製造技術を活用してFinFET構造を採用したシリコン量子ビットを日本で初めて作製。理研は2022年に3電子による量子誤り訂正技術を開発。

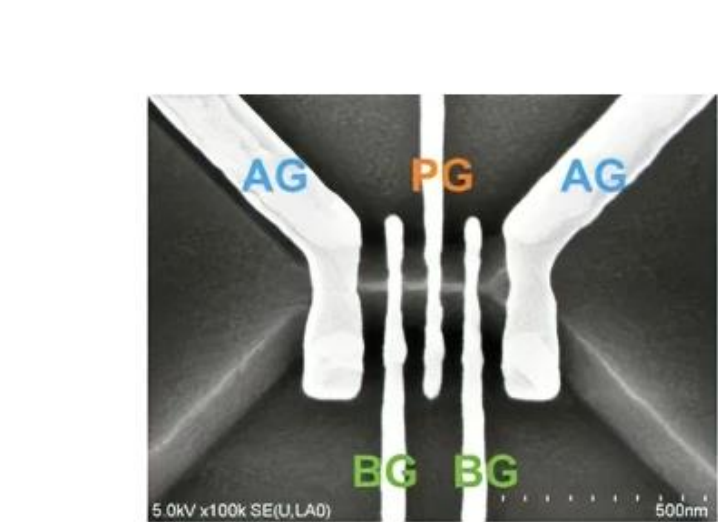


図1 産総研が試作したシリコン量子ビットの基本構造

<長所>

- ・シリコンチップ上の半導体微細化技術により量子ドットのサイズや位置を微細に制御することで多数の量子ビットを集積可能。
- ・シリコンは不純物や欠陥が少なく電子のスピンが外部ノイズに影響されにくいいためコヒーレンス時間が長い。例えば、シリコン中のホウ素原子に束縛された正孔ではコヒーレンス時間が数千秒に達する。

<短所>

- ・シリコン上に形成した量子ドットに閉じ込めた電子のスピン(電子の持つ微小な磁気モーメントで上向きと下向きの二つの状態を取る)の向きをレーザー光や電磁波などで変えたり、測定したりするには高度な技術が必要。
- ・量子ビットは温度やノイズに敏感であり、シリコン基板を構成する原子が閉じ込めた電子に影響を与えないように制止させておく必要がある。すなわち基板を極低温に冷凍するための冷凍機が必要となり全体的な構造が複雑となる。また外部ノイズや誤差も量子ビットの状態に影響を与える。

	シリコン	超電導	イオントラップ
量子ビット サイズ	100nm	10μm	1～10μm
最大集積度	100万ビット	数千ビット	数千ビット
動作温度	10 K以下	10 mK以下	10～300 K
集積数 (ビット)	3 (理研)	127 (米IBM)	20 (米Quantinuum)

表2 シリコン方式と主要方式の性能の比較

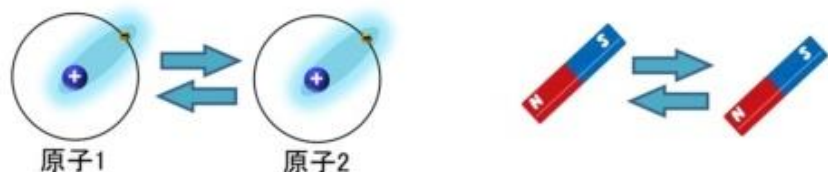
冷却原子方式量子計算機

光ピンセットを用いてミクロン間隔で整列させた冷却原子をベースにレーザー光で原子を冷却・捕捉する方式

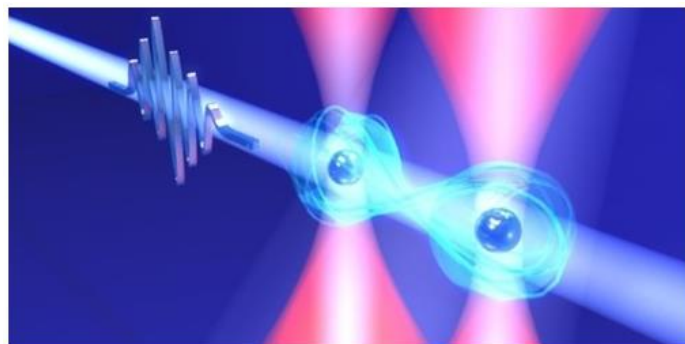
世界最速の2量子ビットゲート（基本演算要素）操作を実現。極低温に冷却した2つの原子を μm レベルに近づけ、特殊なレーザーを当てて操作。10ピコ秒（1000億分の1秒）だけ光る超高速レーザー



電子(-)と原子核(+)が離れる = 電気の偏り
→ 離れた原子同士が影響を及ぼし合う（相互作用）



冷却原子型量子コンピューターの動作の仕組み



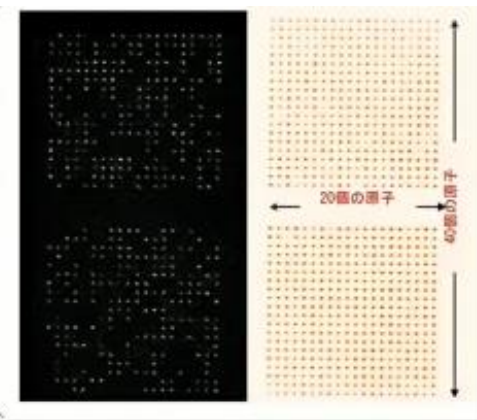
2量子ビットゲートの概念図

<長所>

- ・量子ビットの品質が均一
- ・コヒーレンス時間が長い
- ・光ピンセットによって大規模化し易い
- ・量子ビットを全結合させられる

<短所>

- ・原子を極低温に冷却するためには高価で消費電力が大きい冷凍機が必要。
- ・レーザー光の周波数や強度が揺らぐと量子ビットの操作や測定に誤差が生じる可能性があり、レーザー光の安定性を高めるため高精度な制御装置やフィードバックシステムが必要である。



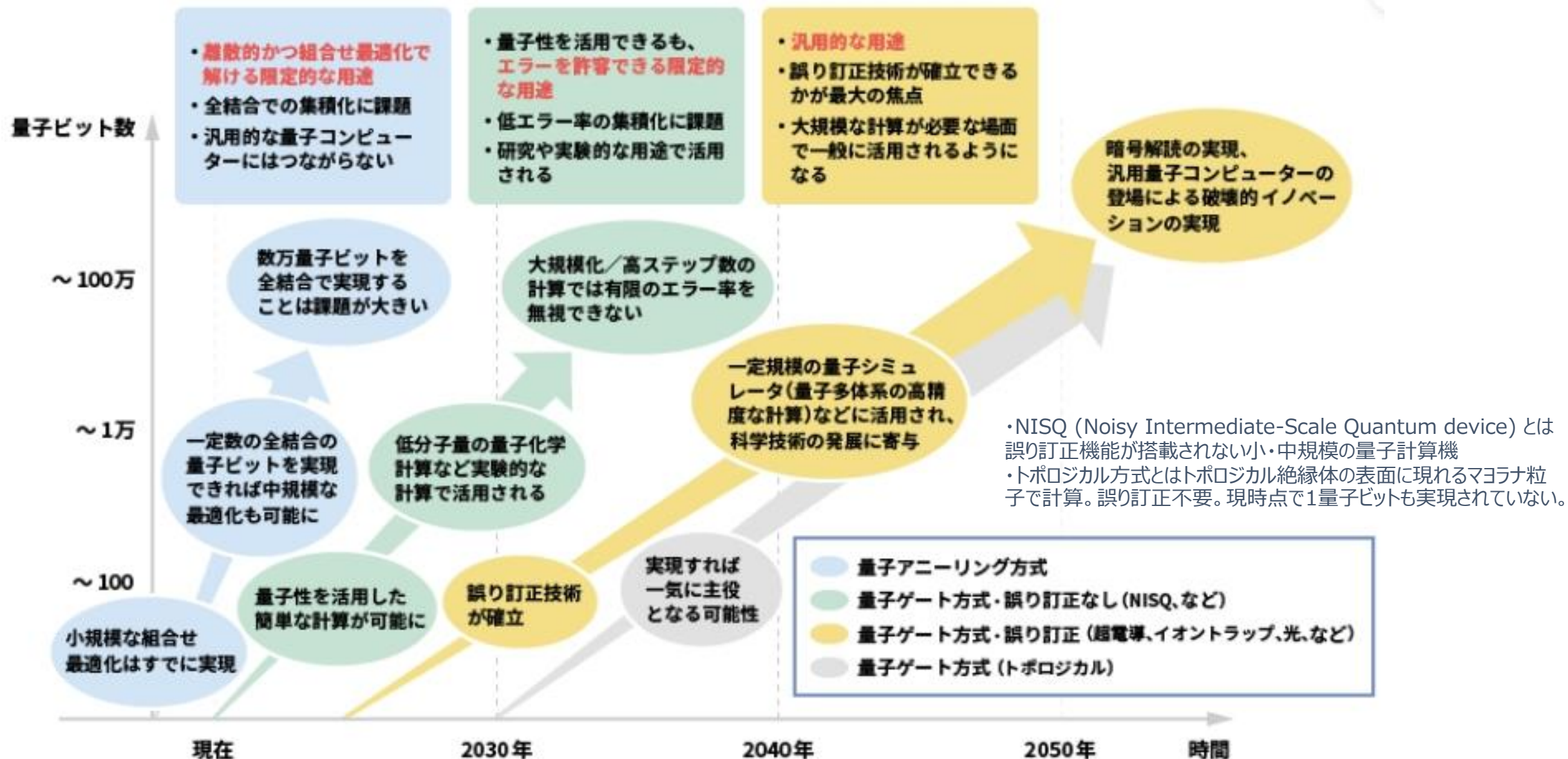
分子科学研究所：800原子 世界最大レベル！

今回構築した冷却原子型量子コンピューター（左）と配列した800個の原子（右）

量子計算機5方式の量子性

	超電導	光	イオントラップ ^o	シリコン	冷却原子
量子重ね合わせ	非線形インダクタであるジョセフソン接合とキャパシタの並列共振回路で構成される素子(トランスモン)で量子重ね合わせが実現されている。トランスモンは離散的なエネルギー準位を持ち、そのうち最低の二つの準位を量子ビットとして操作が可能。	光の異なる偏光状態(振動方向)を共存させることにより量子重ね合わせを実現している。例えば、45度偏光は水平偏光と垂直偏光の等しい重ね合わせである。	イオンの量子状態によって量子重ね合わせが実現される。イオンの量子状態は量子重ね合わせの状態を持つことが可能。	電磁場やマイクロ波などを用いて量子ビットのスピンを操作して重ね合わせの状態を実現。	冷却原子方式の量子計算機はほぼ絶対零度に冷却した原子を用いた量子ビットで構成されておりレーザー光の強度や周波数を変えることで原子のエネルギー準位を制御し量子重ね合わせ状態を実現。最大で256量子ビットを実現しているだけで量子重ね合わせ状態を維持することはまだ困難。
量子もつれ	超電導量子素子(トランスモン)はマイクロ波パルスを用いて他のトランスモンとの間に量子もつれを生成することが可能。量子もつれは、2つの量子ビットの状態が相互依存することによって実現される。	2つ以上の光量子ビットを使用して、2つ以上の量子状態を組み合わせて量子もつれを形成可能。光量子ビットの量子もつれは光の偏光状態が相互依存することによって実現される。	複数のイオンを捕獲しイオン間のクーロン相互作用を使用してイオンの量子状態を相互依存させ量子もつれを形成可能。イオンの量子状態はレーザー光を使用して制御される。	"量子ドット間のトンネル障壁の大きさに依存するスピンの相互作用、すなわち交換結合の電氣的制御によって量子もつれを実現。量子もつれはゲート電圧によって調整される。この方法を用いると3つ以上の量子ビットをもつれさせることが可能。"	冷却原子方式の量子計算機はほぼ絶対零度に冷却した原子を用いた量子ビットで構成されており、レーザー光の強度や周波数を変えることで原子のエネルギー準位を制御し2個以上の量子ビットの間に量子もつれ状態を作り出すことが可能。
全結合	超電導方式では磁束量子ビット同士の相互作用によって量子もつれや重ね合わせを実現。超電導量子ビットが互いに磁束量子ビットとして相互作用するため超電導方式では量子ビット数が増えると全結合が作りにくくなる。量子ビット数が増えると磁束量子ビット同士の相互作用の影響が複雑になり全結合を実現することが困難。特に超電導量子ビットは、周囲の熱や雑音に非常に敏感であるため超伝導状態を維持するためには非常に低温が必要であり、超伝導素子の製造や配線が非常に困難である。	光方式は量子ビット数が増えても全結合が作りやすい方式である。光方式では量子ビットが光子で表現され光のスーパーポジショニングを利用して量子ビット同士を相互作用させるため、量子ビット同士を直接的に結合させることが可能であり量子ビット数が増えても全結合が比較的容易に実現される。ただし、光子の相互作用が弱いため量子ビット同士を強く結合させることは困難であり、量子ビット間の相互作用を実現するためのゲートの数が増えることが課題である。	イオンの内部状態によって表現イオントラップ方式では、量子ビット数が増えるとイオンの数が増えイオン同士の相互作用が複雑になるため全結合を実現することが困難となる。また、イオントラップ方式では、イオンを個別に制御する必要があるため、量子ビット数が増えると個別の制御が非常に困難となる。さらに、イオントラップ方式では、イオンをレーザーで冷却するために極低温の環境が必要であり、超電導方式と同様の制約となり量子ビット数を増やすことが困難となる。	シリコン方式では量子ビット数が増加した時に全結合状態を作ることは可能だが、量子ビット数が多くなると交換結合の制御や誤り訂正の実装が困難となる。現在のシリコン方式の量子計算機は最大で64量子ビットを実現しているだけで全結合状態を作ることはまだ報告されていない。	レーザー光で冷却した原子を量子ビットとして利用する冷却原子方式では量子ビット同士の接合が全結合構造となっており任意の2量子ビット間で量子もつれ状態を作ることが可能だが、量子ビットゲートの高速化やノイズの低減が課題である。量子ビット数が増加した時に全結合状態を作ることは理論的には可能だがレーザー光の制御や原子の配置などが複雑となる課題がある。現在の冷却原子方式では数十から数百程度の量子ビットを搭載している。

量子コンピューターの実現方式別の将来展望



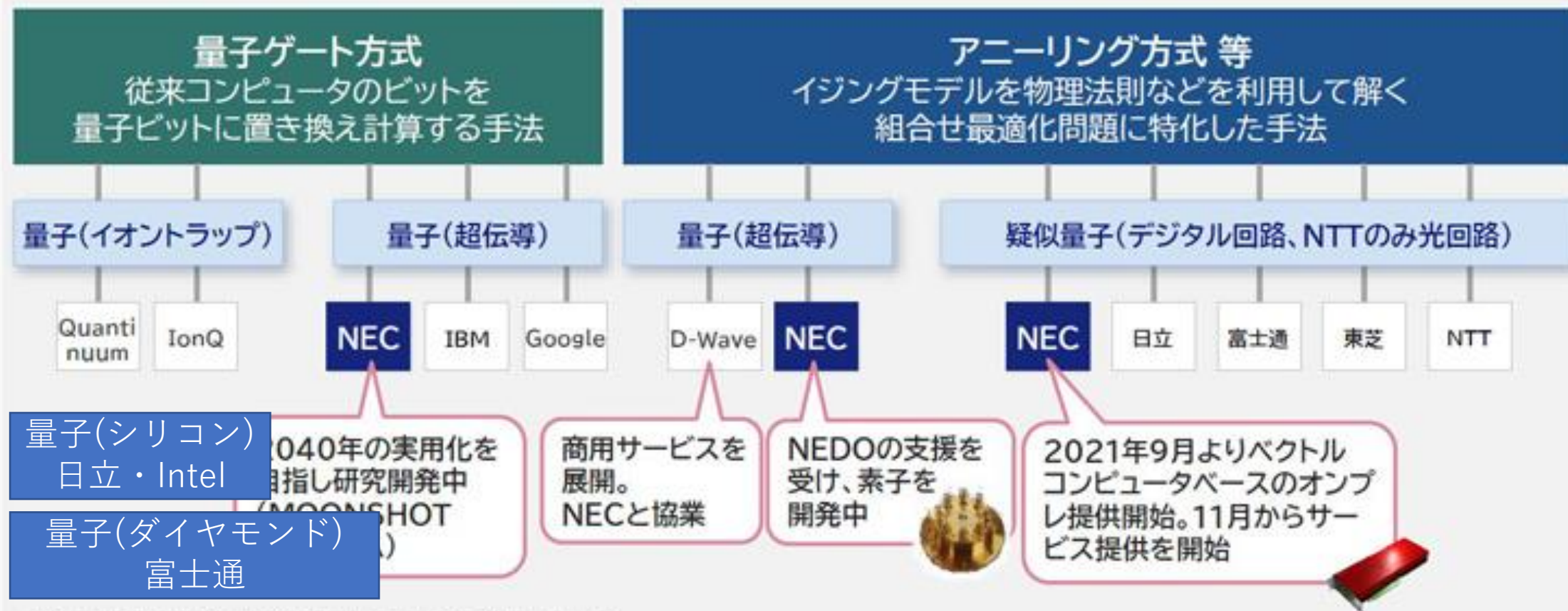
第8章 疑似量子アニーリング に関する調査 (イジングマシン)

2023/04/29

測位技術振興会 (SAPT) 知能・情報・エネルギー分科会
板東幹雄

量子コンピューティング技術の分類

量子コンピューティング (量子の振る舞いを取り入れたものを含む広義)



※NEC調べ(範囲の都合上、必ずしも全ての研究機関を網羅しているわけではありません)

イジングマシンとは

出典：<https://nedo-quantum.aist.go.jp/ising-machine.html>

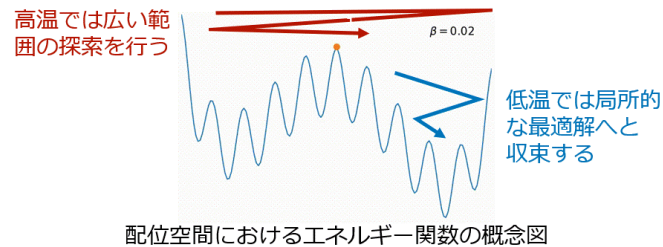
イジングマシンは、組合せ最適化問題を近似的に解くことに特化したコンピュータであり、アニーリングマシンとも呼ばれる。

SA (Simulated Annealing)

古典シミュレーテッドアニーリングの原理

シミュレーテッドアニーリング法

系に熱揺らぎを導入することでスピン配位空間の探索を行う手法

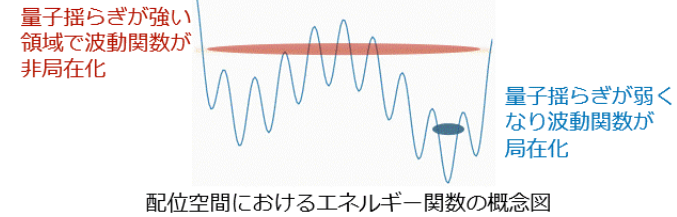


QA (Quantum Annealing)

量子アニーリングの原理

量子アニーリング：系に量子揺らぎを導入することでスピン配位空間の探索を行う手法

横磁場を用いた量子アニーリング (Kadowaki & Nishimori 1998)



課題 1
超電導回路を用いるため冷凍機が必要

課題 2
量子ビット数が少なく、実用レベルの問題を扱えない

量子アニーリングの課題解決のために生まれた疑似量子アニーリング

古典コンピュータや半導体CMOS集積回路上でシミュレーテッドアニーリングを実行し、組合せ最適化問題の近似解を求めるハードウェア。

必ず最適解を導けるわけではないが、ある程度のレベルで近似解を得ることができる手法

各社から発表されている疑似量子アニーリング

- スピン数：組み合わせ最適化問題をイジングモデルに定式化する際の制約。多いほど大規模な問題を扱える。
- Bit階調：ハイパーパラメータの調整解像度。高いほど高精度に解を出せる。
- 結合方式
- 全結合：全ての変数間に繋がりがあある。好適な問題例：ポートフォリオ最適化、シフト最適化
 - 疎結合：一部の変数間にのみ、繋がりがあある。さらなる規模の拡張が容易。好適な問題例：交通渋滞削減

	D-Wave社	NTT社	東芝社	NEC社	富士通社	日立	FIXSTARS
URL	https://dwavejapan.com/	https://journal.ntt.co.jp/article/10945	https://www.global.toshiba/jp/products-solutions/ai-iot/sbm.html	https://jpn.nec.com/quantum_annealing/index.html	https://www.fujitsu.com/jp/digitalannealer/	https://www.hitachi.co.jp/products/it/finance/solutions/application/common/CMOS-annealing_cloud/index.html	https://amplify.fixstars.com/ja/
名称	Hybrid Solver Service	Coherent Ising Machine	Simulated Bifurcation	Vector Annealing	Digital Annealer	CMOS Annealing	Amplify AE
対象	QPU(超伝導量子干渉計とCPU・GPU)	レーザ・FPGA	GPU	汎用ベクトルプロセッサ	GPU	GPU	GPU
スピン数(ビット数)	100万	10万	100万～	30万	10万(10台接続可能)	10万	10万～
結合方式	疎結合		全結合	全結合	全結合	全結合	全結合
Bit階調	アナログ(5?)	不明	32	不明	64	3	64

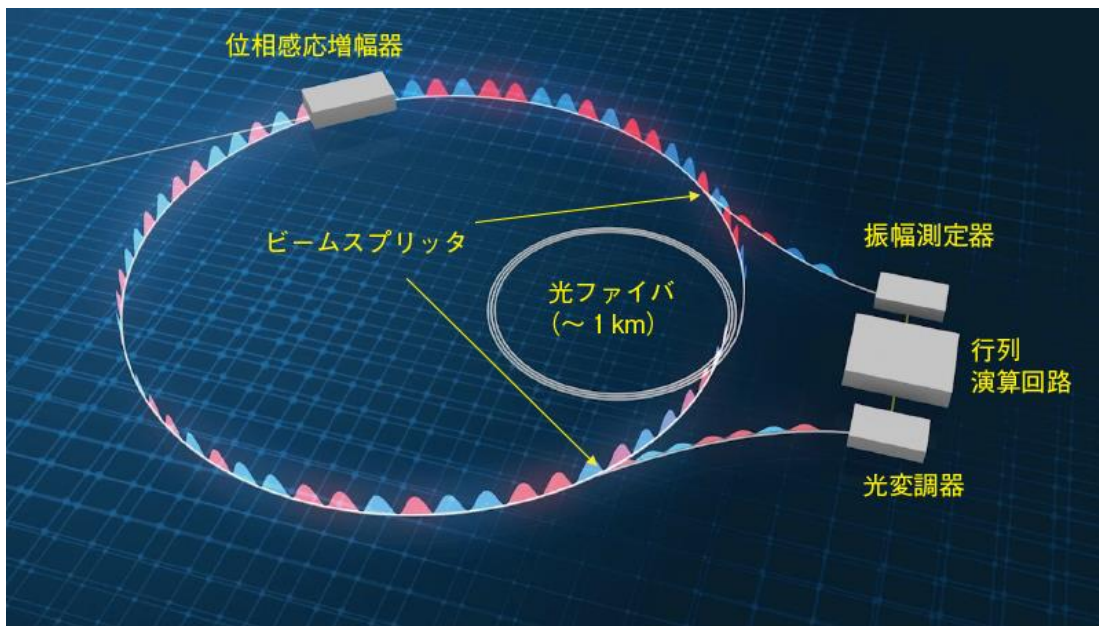
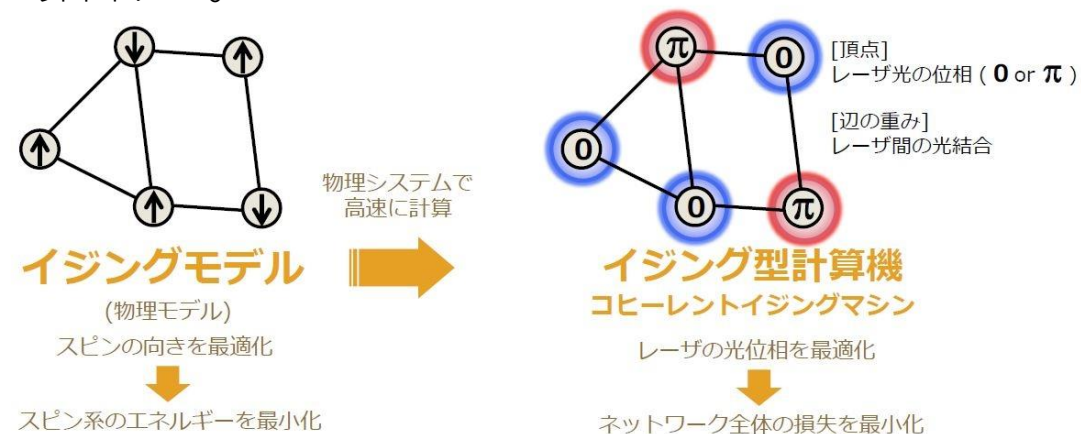


図1 測定・フィードバックを用いたコヒーレントイジングマシン

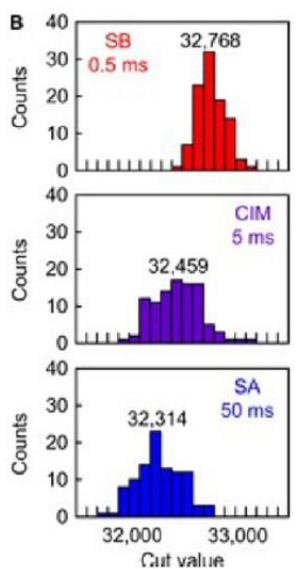
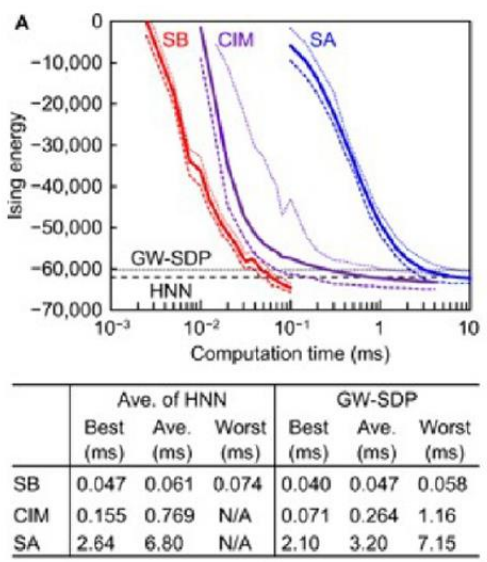
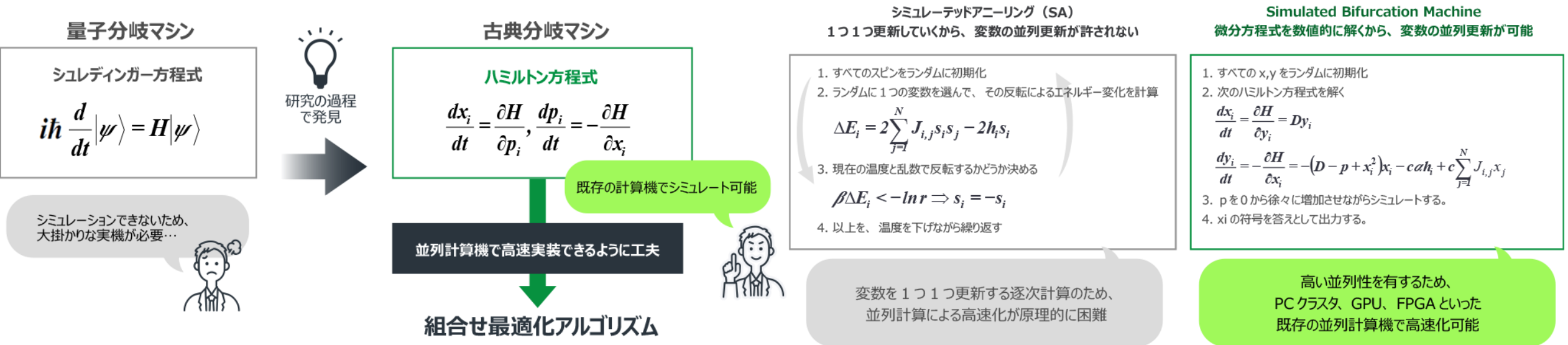
流す光のうち、 $0 \cdot \pi$ の位相成分を効率よく増幅する位相感応増幅器（PSA）を光ファイバーの輪のなかに配置。PSAを200ピコ秒の間隔でオン・オフし、パルスを約12万個生成する。これらの光パルスは5kmの光ファイバーを数十から1000周する間に相互に作用し合い、全体が最も安定する位相の組み合わせで安定する。この組み合わせが、問題の答えとなる。

ある条件下では振幅の量子揺らぎが増幅（直交する成分は圧縮）されたいわゆるスクイーズド状態にあり、スピンの対応する2つの状態が部分的に量子重ね合わせになるため、最適解の探索に量子効果が働くものと期待されている（効果不明）。その一方、装置が巨大となることが課題。

位相感応増幅器は非線形光学媒質にポンプ光を入力することで、光パラメトリック増幅過程によりポンプ光位相に対して0または π 位相の成分の光がもっとも効率良く増幅される光増幅器。そのため、発振しきい値より上ではDOPOの位相は0または π のいずれかのみとなる。行列演算回路には、あらかじめ解きたいイジング問題に対応するスピン間結合情報（ $N \times N$ 行列）を格納しておき、測定結果（要素数 N のベクトル）と結合行列の行列演算をすることで、次の周回における各パルスへのフィードバック情報を算出する。



SAとは異なり、確定的なハミルトン方程式を解くために疑似乱数を利用しない。そのため、SBは並列化しやすいというだけでなく、疑似乱数なしでSAと同レベルの高精度な解を得ることができることが特徴。



SBは計算時間が短いだけでなく、他の方法より最適解となる可能性が高い。

実装方法

1. 実問題
例：ポートフォリオ最適化
資産間の相関
正あるいは負の高い連動性を持つ資産の組を見つけたい。

2. 組合せ最適化問題
モデル化
望ましい性質を持つ行列を見つける問題としてモデル化。

3. イジングモデル
式をつくる
望ましい性質を持つ行列を表現する組合せのとき最小となる式をつくる。
$$\sum \sum |C_{ij}| (i'-j')^2 x_{i'} x_{j'} + A \sum (1 - \sum x_{ii'})^2 + A \sum (1 - \sum x_{jj'})^2$$

以下の式を最小にするような「順序の並べ替え」の情報を与える $x_{11}, x_{12}, \dots, x_{33}$ (それぞれ、0か1) の組み合わせを求める
 x_{ii} は「順序の並べ替え」の方法一つ一つに対応し、対応するとき1、それ以外は0

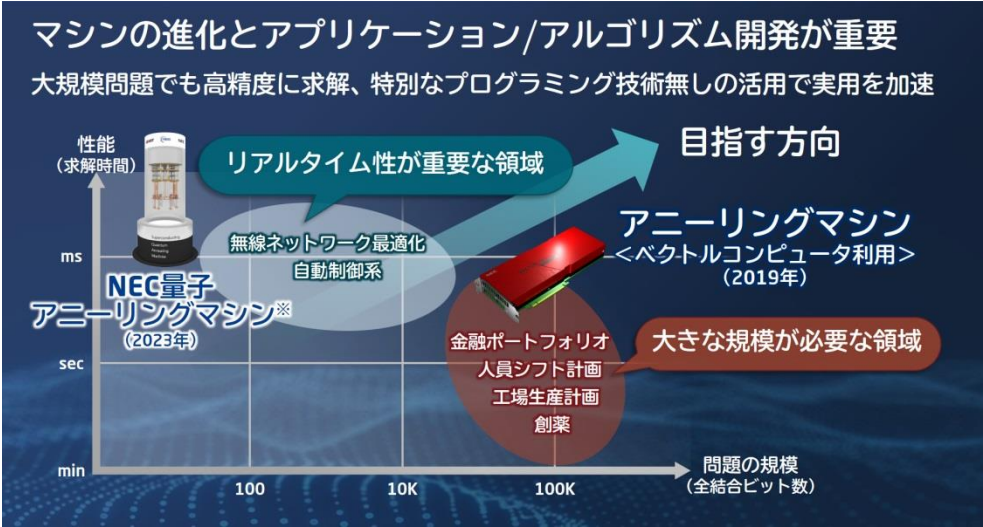
4. SBM
計算
最適解を得る。
イジングマシン
$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i$$

順序を並べ替えてできるいろいろな行列の「良さ」を計算

NEC社 Vector Annealing

https://jpn.nec.com/quantum_annealing/effort/index.html
https://jpn.nec.com/press/202208/20220829_01.html

量子回路によって成り立つ量子アニーリングマシンの開発だけでなく、一般的なコンピュータのデジタル回路を用いながらソフトウェア処理によって量子アニーリングをシミュレーションするタイプのSAマシンを開発。
量子アニーリング処理に適した独自開発のアルゴリズムを組み込んだソフトウェアを、大容量メモリで行列計算を行うベクトル型スーパーコンピュータ「SX-Aurora TSUBASA」上で動作させ提供するクラウド型の疑似量子アニーリングをサービス展開。



品名		標準価格(税抜)		備考
NEC Vector Annealingサービス 2.0 スタンダードプラン(通常)		250,000円/月～		最大10万ビット/ジョブ。 ベストエフォート型。
NEC Vector Annealingサービス 2.0 スタンダードプラン(マルチ)		350,000円/月～		最大30万ビット/ジョブ。2契約以上必須。 ベストエフォート型。
NEC Vector Annealingサービス 2.0 プロフェッショナルプラン(通常)		1,250,000円/月～		最大10万ビット/ジョブ。 専有型。
NEC Vector Annealingサービス 2.0 プロフェッショナルプラン(マルチ)		1,350,000円/月～		最大30万ビット/ジョブ。2契約以上必須。 専有型。

品名		種類	標準価格(税抜)	備考
NEC Vector Annealingソフトウェア 2.0	VAベース	PP	2,000,000円	1ライセンス/サーバ・VE (1VE使用可)
		PPSP	300,000円/年	サポート費用。手配時は契約PP数と同数必須
	VEオプション	PP	500,000円	同一サーバへ1VE追加毎に1ライセンス必要
		PPSP	80,000円/年	サポート費用。手配時は契約PP数と同数必須

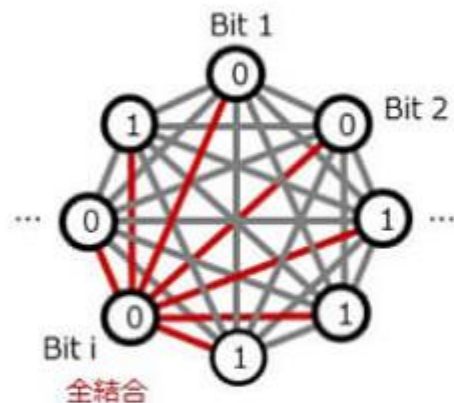


大きさも一般的なPC

従来のデジタル技術を用いるデジタルアニーラは、近接したビット同士しか結合できないという量子ビットの制約がなく、大量のビットとビットが相互に結合し、「全結合」の状態となるため、ビット間に瞬時に情報がやりとりされ、大きく複雑な問題でも素早く計算して解くことが可能。

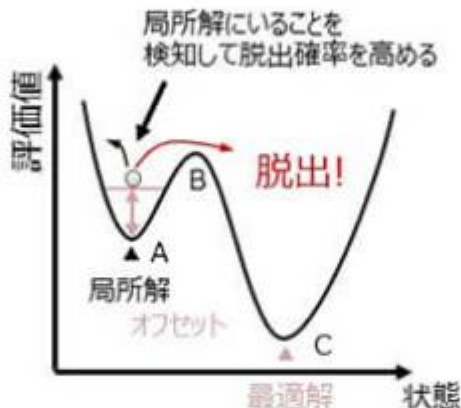
デジタルアニーラの特長

大規模・高精度により
多様な問題に適用可能



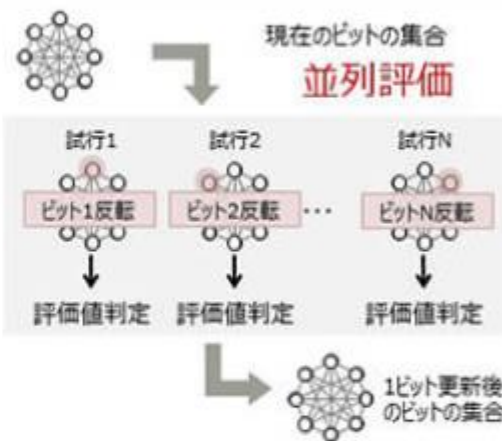
- 8192bit規模の問題に対応
- ビット間結合精度（相互作用）64bit階調
- ビット間全結合による使いやすさ

独自技術による
プロセス高速化



オフセット値を与えることで局所解からの脱出を促し最適解を導く。

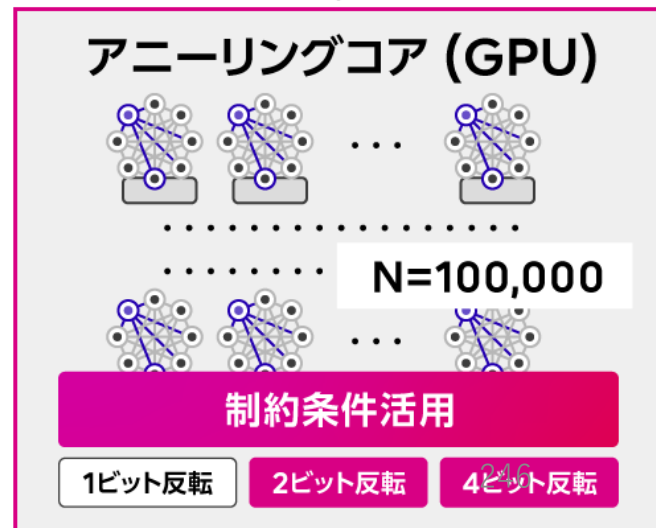
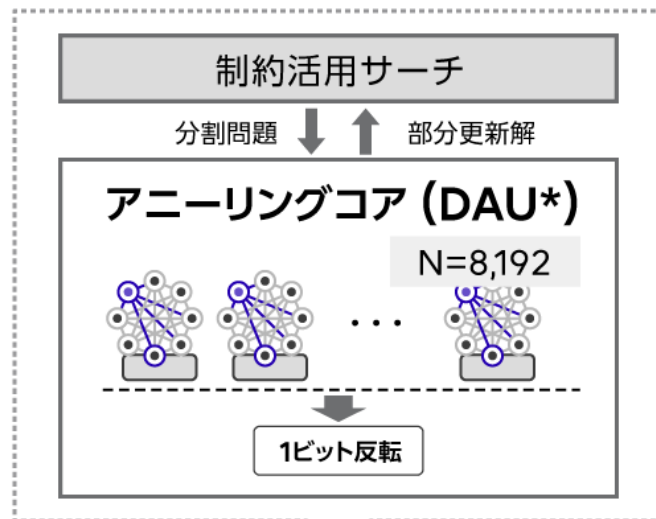
並列評価による
計算速度向上



状態遷移の際にどの1bitを更新するかを判断するために全ビットについてそれぞれを反転したときの評価値を並列で計算。最も適切なものを選び出すため、遷移できずに留まることが少なくなる。

Copyright 2018 FUJITSU LIMITED

*Digital Annealing Unit



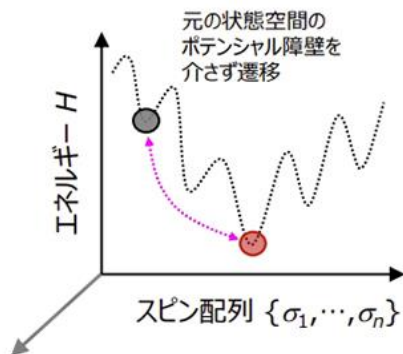
「CMOSアニーリング」はアニーリング用のチップやハードウェアが搭載されたコンピュータで、その上で動作させるソリューションとセットにしたサービスとして実現。「組合せ最適化問題」に対して高速に最適解を出すアニーリング技術を常温環境で利用可能。

CMOSアニーリングの特徴

大規模な組合せ最適化問題を高速に解く技術

量子アニーリング

- 量子効果による状態遷移を利用し最適解を求める技術
- 絶対零度付近で動作
- 大規模な計算が困難 (現状2000スピンまで)



CMOSアニーリング

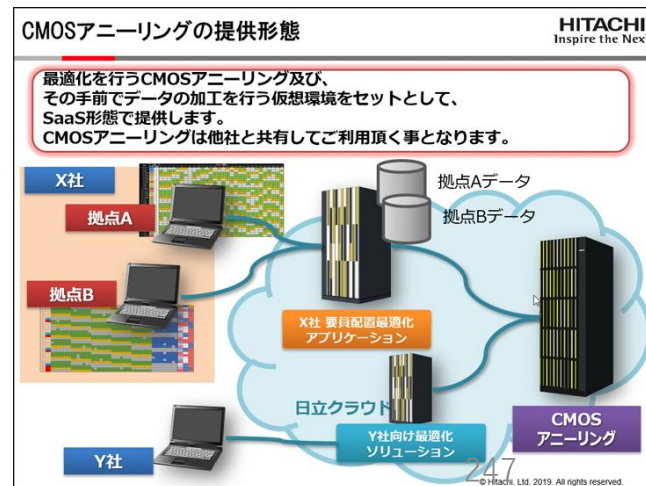
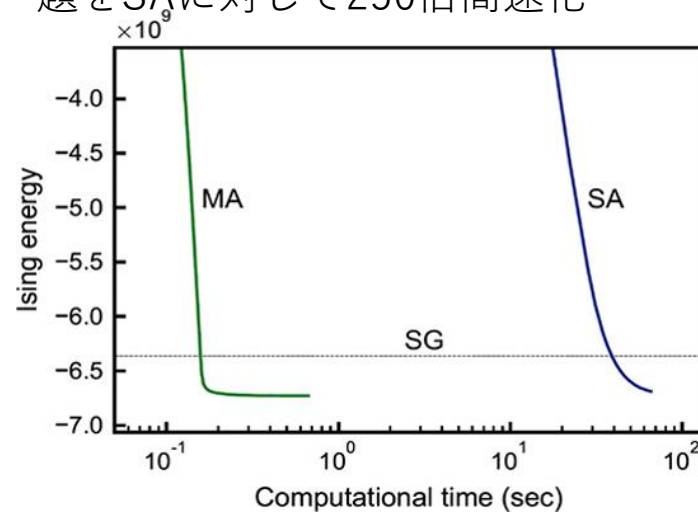
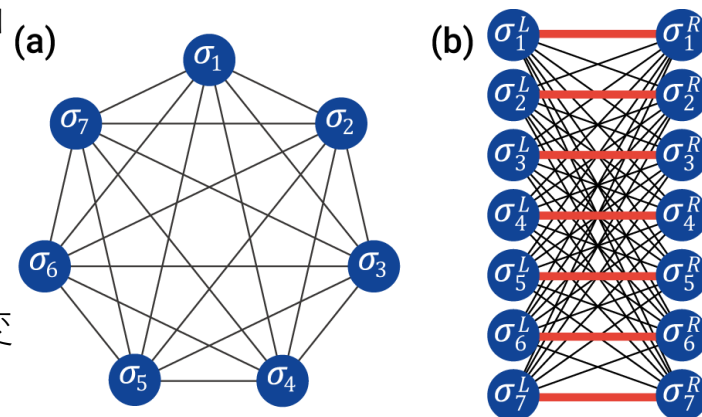
- 半導体上で量子アニーリングを模した仕組みで最適解を求める
- 常温で動作
- 大規模な最適化計算が可能! (10万スピン)

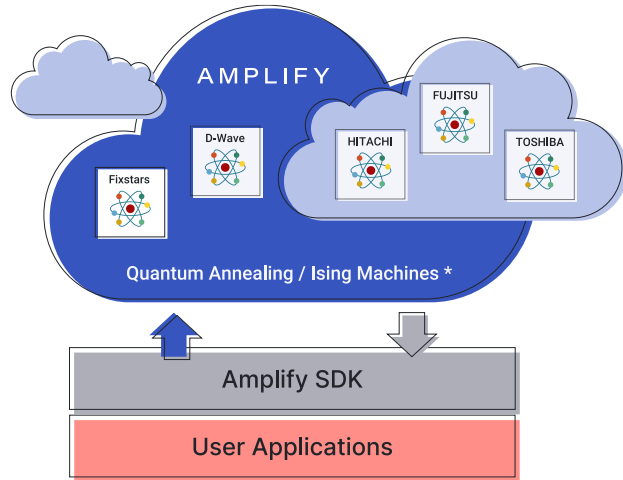


Momentum Annealing (MA)

従来のSAはマルコフ連鎖モンテカルロ法に基づくため、繋がりを持つ変数どうしを同時に更新不可であり、全結合問題を解く場合は、一度に一つの変数しか更新できない。(左図)

MAでは、変数間の繋がりを完全二部グラフ状にすることで、(b)の左側の変数は互いに繋がりを持たないため同時に更新することが可能。並列計算によって計算時間を短縮。10万スピン全結合イジングモデルの基底状態探索問題をSAに対して250倍高速化





通常のプログラミング

1. 課題を定式化

解きたい課題をイジングマシンで実行可能な数式で表現する

2. 論理モデルへ変換

目的関数と制約条件をイジングモデルまたはQUBOに変換

3. 物理モデルへ変換

マシン仕様や制限に従った物理モデルに再変換

4. 各マシン・ソルバーの入力形式に変換

マシンのAPI仕様に従い物理モデルをデータに変換

5. マシン・ソルバーを実行

特定マシンのみで実行可能

Fixstars Amplifyを用いたプログラミング

1. 課題を定式化

解きたい課題を数式で表現してコード化

Amplify SDKが自動で各マシン・ソルバーに合った形式へ変換。実行結果はユーザにとって結果の解釈が容易な形式で返却されます。

2. マシン・ソルバーを実行

複数マシンの中から選択可能

●

●

FIXSTARSが運営するアニーリングマシンお試しサイト



NEDO（国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構）が実施する「組合せ最適化処理に向けた革新的アニーリングマシンの研究開発」の成果を使用して「量子計算およびイジング計算システムの統合型研究開発」のプロジェクトによる運営でお試し可能：
<https://annealing-cloud.com/ja/index.html>

編著者 一色 浩（1～6章）

工学博士。数理解析研究所(大阪) 代表。

1965年 東京大学工学部卒業

1972年 東京大学大学院博士課程終了

韓国ソウル大学講師

1973年 日立造船株式会社 技術研究所を経て

2001年 大阪に数理解析研究所を設立

2007-2011年 韓国蔚山大学碩座教授

2016年 測位技術振興会顧問。現在に至る。

著者 毛利 篤史（7章）

博士(工学)。三菱電機(株)。

1989年 大阪府立大学大学院工学研究科修士課程修了

1989年 三菱電機(株)LSI研究所に入社

2002年 三菱電機(株)三田製作所へ異動

2017年 立命館大学大学院理工学研究科博士課程修了

2018年 測位技術振興会理事。現在に至る。

著者 板東 幹雄（8章）

博士(工学)。(株)日立製作所。

2004年 京都大学大学院情報学研究科修士課程修了

2004年 (株)日立製作所日立研究所(当時)に入社

2018年 測位技術振興会理事

2019年 大阪大学大学院工学研究科博士課程修了

現在に至る。

END OF FILE