

量物班の記事が宇宙語！そんな人のための記事



これは量子コンピュータの基礎となる測定やゲート操作の説明を目的に、その理解の手助けとなるブラケット記法などから始めて量子もつれのさわりまでを解説する記事になります。他の方の記事では説明が省かれている一般の方には馴染みがなさそうな記号や術語も一から解説する補助教材としての意味もあります。

1 量子状態

量子力学の世界では物理的な状態、たとえば位置やエネルギーなどの情報を全て含んだ状態ベクトル^{*1}というものを用意し、これに変化を加えて測定や状態の時間発展^{*2}を考えます。その状態ベクトルは複素ベクトル空間^{*3}という集合に属しています。この集合の元を以下で示す特殊な記号を用いて、それをケットベクトルと呼ぶことにします。

$|\psi\rangle$: ケットベクトル

ここで ψ は 🐼 でも 🐦 でも何でもよく、ただ異なる状態ベクトルとの区別がつきやすいように置いただけと思ってください。ただし、後に出てくるようにここに物理的な状態そのものを示す値や文字を書くこともあります。

次にこの複素ベクトル空間から複素数^{*4}への線型な写像^{*5}全体の集合を考えるとそれもまたベクトル空間になり、これを双対空間と呼びます。もともとの複素ベクトル空間を U と置くとこれは U^* という記号で書けて、その元を次の記号で表します。

$\langle\phi|$: ブラベクトル

ここでも ϕ に意味は無く 🐼 や 🐦 に自由に置き換えることができます。

これを用いて元の複素ベクトル空間での内積を

$$\langle|\phi\rangle, |\psi\rangle\rangle \equiv \langle\phi|\psi\rangle$$

と定義します。これはつまり $|\phi\rangle$ で一意的に決まる写像 $\langle\phi|$ が $|\psi\rangle$ に作用して複素数 $\langle\phi|\psi\rangle$ に写した、という事です。この意味で各ケットベクトルはその双対空間内のブラベクトルに 1 対 1 の対応を持たせることができ、その対応関係を次のように定義します。

$$c_i |i\rangle + c_j |j\rangle \longleftrightarrow c_i^* \langle i| + c_j^* \langle j| \tag{1}$$

$|i\rangle, |j\rangle$ にそれぞれ適当な複素数 c_i, c_j を掛けて和を取ったもの (以下、線型結合という言葉を使います) もまた元になる事はベクトル空間という事から保証されていて、それに対応するブラベクトルは中のラベルはそのままに定数倍の部分が複素共役を取ったものになっている、ということです。

^{*1} これがベクトル空間という集合に含まれる事から。ベクトル空間の定義は割愛しますが、元 2 つの和や積が定義できるのは重要です。元とは集合を構成する要素 1 つ 1 つのことを指します。

^{*2} 物理的な状態の変化

^{*3} より正確には Hilbert 空間ですが、0 と 1 の二準位系の量子コンピュータを説明するのに無限次元を考える必要が無く、完備化を行うまでもないのでこうしました。

^{*4} 実数 x, y と虚数単位 i を用いて $z = x + iy$ と書ける数のこと。共役を取るという操作が存在し、それを $\bar{z} = x - iy$ と定義します。実数とは 0 や 10,000 や $3/2$ などの普段使っている数と思って問題ありません。

^{*5} ある集合から別の集合への元の対応を決めるもの

2 量子ビット

一般的な説明はこのくらいにして、量子コンピュータに限って話を進めます。今の(古典的な)コンピュータは情報を二進数、つまり0または1の文字の連続で処理しているというのはみなさんご存じだと思います。

まずは1 bit について考えると、量子コンピュータが扱う量子ビットも0や1の概念があり、次のような対応をさせます。

$$0 \mapsto |0\rangle \quad 1 \mapsto |1\rangle$$

さらにこの2つのケットは大きさ1でそれぞれ直交することと、量子ビットが属する複素ベクトル空間 Q はこれらの線型結合で空間内の全て元が書き表せることを要求して、この2つのケットが Q の正規直交基底になっているものとすれば次が成り立ちます。

$$\begin{aligned} \langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1, \quad \langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0 \\ Q = \{|\psi\rangle \mid |\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \alpha, \beta \in \mathbb{C}\} \end{aligned} \quad (2)$$

α, β は任意の複素数で全く問題ないですが、説明の都合上正規化という条件を加えて次のようにします*6。

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 : \text{正規化} \quad (3)$$

これは $\langle \psi|\psi\rangle = 1$ と全く同値です。上で書いたことだけで証明できるのでよければ示してみてください。上で何気なく書いた式ですが、これは古典的なビットとは決定的に違う事がすぐわかります。すなわち

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle \quad (4)$$

に対応する古典ビットは0なのか1なのかという事です。結論から言うとこれは0でも1でもない重ね合わせ状態にあるという表現をされます。これを理解するために次の節では(量子コンピュータにおける)測定について見ていきます。

3 測定

測定という言葉を知ると例えばものさしを当てて机の長さを測るなどが想像できます。でも机の長さが100 cmとわかった瞬間に机の重さが10 kgから11 kgに増えた! なんてことはありませんよね。つまり測定は物理的な状態を破壊せずに行え(ているように見え)るという事です。

では量子力学的にはどうでしょうか。先に述べたように物理的な状態は全て状態ベクトルに格納されています。もし古典との類推が成り立つのであれば測定は状態ベクトルを不変に保って行えることとなります.....わざわざこの話を振っているのだから想像に難くはないですが一般に測定は状態ベクトルを変化させます。2準位の量子コンピュータに限れば量子ビットを $|0\rangle$ または $|1\rangle$ に変化させる測定を行います。つまり上の $|\psi\rangle$ も測定したら最後、 $|0\rangle$ か $|1\rangle$ となって古典ビットとの対応が付くこととなります。逆に、測定する前はどちらとも断言できない状態にあることになり、これが重ね合わせ状態です。

では、 $|\psi\rangle$ が $|0\rangle$ や $|1\rangle$ に移るのに何か規則はあるのでしょうか。まずは簡単な例で見てみましょう。

量子ビットの測定前の状態が $|0\rangle$ であったとき、測定結果は必ず $|0\rangle$ であることが求められます(でないとはそれはもはや測定とは言えません)。これは $|1\rangle$ でも同じです。

次に $|0\rangle$ と $|1\rangle$ が同じ割合で混ざった

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \quad (5)$$

が測定前の状態だったとき、直観的には $|0\rangle$ と $|1\rangle$ が同じ確率で測定されるだろうと感じる事でしょう。実際IBM(世界の量子コンピューター開発のリーダーの一社です)のシミュレーター*7で見てみると

*6 複素数 $z = x + iy$ に対してその大きさの二乗 $|z|^2$ を $|z|^2 \equiv z\bar{z} = x^2 + y^2$ で定めます。

*7 Qiskitを使った量子計算の学習 <https://qiskit.org/textbook/ja/what-is-quantum.html> が参考になります。

```

1 qc = QuantumCircuit(1) #bit数1の回路を用意
2 backend = Aer.get_backend('statevector_simulator') #準備
3 initial_state = [1/sqrt(2), 1/sqrt(2)] #(5)の状態
4 qc.initialize(initial_state, 0) #(5)に状態ベクトルを初期化
5 results = execute(qc,backend).result().get_counts() #実行
6 plot_histogram(results) #図1の出力

```

コード1 測定とヒストグラムの作成

図1でたしかに望んだ結果が得られています。同じようにして(4)の状態を測定すると図2のように1/4の確率で|0>を、3/4の確率で|1>が測定されているようです。これからわかることは何でしょうか。

ここで正規化として(3)の条件を加えたことがきいてきます。量子ビット(4)や(5)の各ケットベクトルの係数の二乗を計算してみると、(4)は|0>について1/4、|1>について3/4、(5)は|0>、|1>ともに1/2になります。また|0>も自身の係数が1、他方が0になっています。

これは上の測定結果で得られた確率と完全に一致します！

ここまで来たところで量子ビットの測定を次のように定義します*8。

量子ビット $|\psi\rangle$ に対して測定によって $|k\rangle$ ($k=0,1$)となる確率 $p(k)$ は

$$p(k) = \langle \psi | k \rangle \langle k | \psi \rangle$$

で与えられる。測定後の量子ビットは次のようになる。

$$|\psi'\rangle = \frac{|k\rangle \langle k | \psi \rangle}{\sqrt{p(k)}}$$

(4)を例にとって(2)を用いて計算すれば

$$p(0) = \left(\frac{1}{2} \langle 0 | + \frac{\sqrt{3}}{2} \langle 1 | \right) |0\rangle \langle 0| \left(\frac{1}{2} |0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} |1\rangle \right) = \left(\frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{4}$$

$$p(1) = \left(\frac{1}{2} \langle 0 | + \frac{\sqrt{3}}{2} \langle 1 | \right) |1\rangle \langle 1| \left(\frac{1}{2} |0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} |1\rangle \right) = \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^2 = \frac{3}{4}$$

他の状態で計算しても全く無矛盾なことがわかります。

ところで上の定義はこれまでと一見矛盾している部分があります。この節の初めで測定後量子ビットは|0>または|1>になる、という事を説明しました。上の式はたしかに $|k\rangle$ には比例しているようですが $\frac{\langle k | \psi \rangle}{\sqrt{p(k)}}$ という複素数が付いています。これを $|k\rangle$ と同一視してもいいのでしょうか。ここで次の節のグローバル位相因子という概念が出て来ます。

■ 補足 ■

実はここまで扱った量子ビット(4),(5)はどちらも測定後の状態を上で式で計算すると|0>または|1>そのものが得られます。しかしこれは常に成り立つというわけではなく、例えば量子ビット

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} |0\rangle + i \frac{\sqrt{3}}{2} |1\rangle \tag{6}$$

を定義に従って計算すると

$$p(0) = 1/4, p(1) = 3/4, |\psi'\rangle = |0\rangle \text{ or } i|1\rangle$$

が得られて|1>に余計な*i*が付いてしまいます。

*8 所謂 Born の規則などと呼ばれるもの。これは他からの導出ができず公理(物事の出発点)とされています。

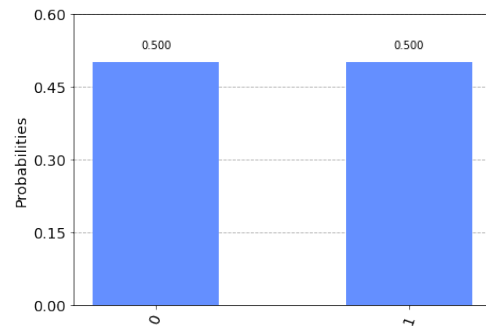


図1 (5)の測定結果

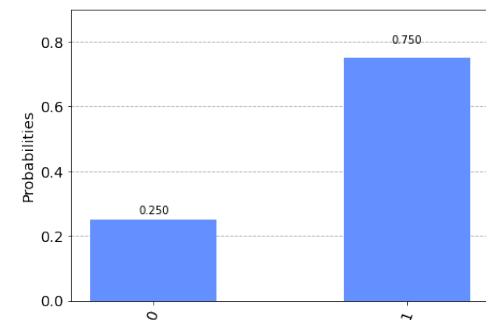


図2 (4)の測定結果

4 量子ビットの不定性と一般形

みなさんは第2節で何気なく付け加えた正規化という条件を覚えているでしょうか。そこでは始め全く任意だった係数を状態ベクトルが $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ となるように制限してしまっても問題ないということを行いました。これを正しいと仮定すれば、全く同じ物理的な状態を示す状態ベクトルは1つではなく、ある程度の不定性が許されているということになります。そこでまずは系^{*9}の状態が等しいとはどういう事なのか、について少しの間量子コンピュータの枠を超えて考えてみます。

量子ビットが測定によって $|0\rangle$ または $|1\rangle$ に確率的に移ったように、一般に量子力学の世界では系の物理量は確率的に与えられます。古典の世界では2つの系の状態が等しいという事を見るには系を特徴付ける全ての量を測定し、それが同じであればよかったわけですが、確率でしか測定値が与えられない以上これをそのまま適応するわけにはいきません。そこで量子力学では系の状態が等しい事を次のように定義します。

2つの系が等しいとは、任意の物理量についてそれを測定したときの確率分布が一致することである。

確率分布とは前ページのヒストグラムのように測定によって得られた全ての値とその確率をまとめたものだと思ってください。任意の物理量であるために一般に2つの系が等しいと証明するのはとても困難です。しかしこれまでに学んだ知識と式の形からある程度の目安を付けることは可能です。

ここからはまた簡単のために量子ビットに限って話を進めます。前節でやったように測定が $|0\rangle$ または $|1\rangle$ になる確率は

$$p(k) = \langle \psi | k \rangle \langle k | \psi \rangle \quad (k = 0, 1)$$

だったので $|\psi\rangle$ に次のような操作を加えてもこれは不変なことがわかります。

$$|\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = e^{i\theta} |\psi\rangle, \quad \theta \in \mathbb{R}$$

ここで出てきた $e^{i\theta}$ という文字は見慣れない人も多いと思います。後に詳しく解説するので今は複素数で大きさが1のものと思ってください。実際に計算してみると

$$\begin{aligned} p'(k) &= \overline{e^{i\theta} \langle \psi | k \rangle} e^{i\theta} \langle k | \psi \rangle \\ &= |e^{i\theta}|^2 \langle \psi | k \rangle \langle k | \psi \rangle \\ &= p(k) \quad (\because e^{i\theta} \text{の大きさは} 1) \end{aligned}$$

ここで(1)のケットからブラを対応させる規則を使いました。この $e^{i\theta}$ のことをグローバル位相因子、特に θ をグローバル位相と呼びます。前節最後の部分はこれによって解決されます。量子ビット(6)は $|1\rangle$ が測定されたとき $i|1\rangle$ を式の上では返しますが、これは i が大きき1の複素数であることから $|1\rangle$ と同一視してよく、指摘した説明の矛盾というのは解決されたことになります。

見てきたように、これを測定して決定するのは不可能なので今後特に断りが無ければこの項は1とします。

さて、ここまでで初めから次のようにまとめればよいのではないかと思った方もいらっしゃると思います。

量子ビット $|\psi\rangle$ と $|\phi\rangle$ が等しい

$$\Leftrightarrow \langle \psi | 0 \rangle \langle 0 | \psi \rangle = \langle \phi | 0 \rangle \langle 0 | \phi \rangle \text{ かつ } \langle \psi | 1 \rangle \langle 1 | \psi \rangle = \langle \phi | 1 \rangle \langle 1 | \phi \rangle$$

これは系が等しいことの定義を量子ビットに限った形で、前節の $p(i)$ の定義を使って書き直ただけなので正しく見えます。これによると一見違う表式でグローバル位相分の差では解消できない(4)と(6)は同じ状態を表すはずですが、実はこれは正しくありません。多くの本では「 $|0\rangle$ や $|1\rangle$ が恣意的な基底でそれを変更した時に.....」と続くところですが、ここでは観測で $|0\rangle, |1\rangle$ のいずれかになることを固定したまま議論できる次の定義を加えます。

^{*9} 物理的な考察の対象となるもの。例えば人間一人を系としてもいいし、人間と地球を合わせて1つの系としてもいいです。

2つの量子ビットが等しい事は両者に任意の同じゲート操作を施したあとも測定時に $|0\rangle, |1\rangle$ を得る確率分布が等しい事が必要十分である

ここでゲート操作という新たな言葉が出てきましたが、詳細は後にやる事にして今は量子ビットに作用して新たな別の量子ビットに写す操作とってください*10。ゲートの中でも特に Hadamard ゲートという

$$H : |\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \right) |\psi\rangle$$

で変換が記述できるゲートを考えます。(4),(6)にこれを作用させればそれぞれ

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= \frac{1 + \sqrt{3}}{2\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1 - \sqrt{3}}{2\sqrt{2}} |1\rangle \\ |\phi'\rangle &= \frac{1 + i\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1 - i\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} |1\rangle \end{aligned} \quad (7)$$

が得られます。これを測定したときも確率分布は依然同じでしょうか。 $p(k)$ の定義に従って計算してもよいですが、より視覚的にシミュレーターの結果を見ると

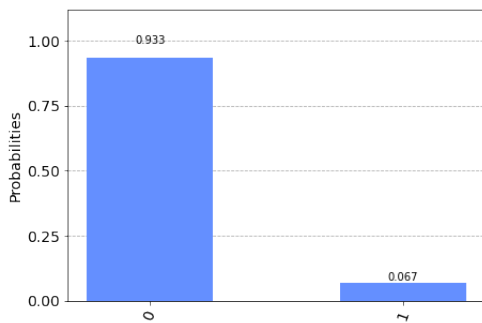


図3 $|\psi'\rangle$ の測定結果

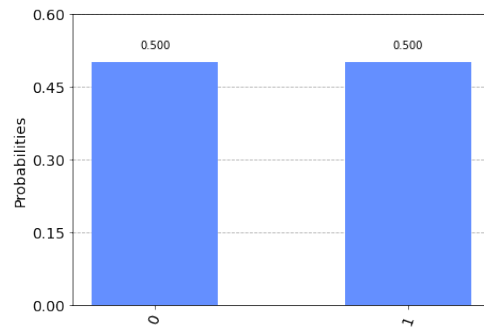


図4 $|\phi'\rangle$ の測定結果

で頭が違うことが分かります。つまり(4)と(6)は違う量子ビットの状態を表しているということです。これまでの事をまとめると全ての情報を含んだ量子ビットは一般に次の形で書けることが分かります*11。

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle, \quad \theta, \phi \in \mathbb{R} \quad (8)$$

ここでもまた見慣れない数式 \cos や \sin が出てきましたがすぐに必要になるのは

$$\cos^2 x + \sin^2 x = 1, \quad x \in \mathbb{R} \quad (9)$$

という事だけです*12。(8)はたしかに正規化条件(3)を満たし、 $e^{i\phi}$ の部分によって(4)と(6)の区別も付いています。この $e^{i\phi}$ の部分をグローバル位相因子との対応で相対位相因子、 ϕ を相対位相と呼ぶこともあります。グローバル位相が観測不可能だったのに対して、相対位相は測定によって推定が可能*13、 θ と並んで量子ビットを特徴づけるのに必要なパラメタの1つです。

物理においてよく使われる θ, ϕ を視覚的に表す方法として極座標というものがあり、量子ビットの世界ではこれに瓜二つのものを Bloch 球と呼んで次の節のゲート操作を視覚的に説明する方法がよく用いられます。しかし Bloch 球と対応する量子ビットを理解するには三角関数*14や $e^{i\phi}$ へのさらなる理解が必要なので次節のゲート操作を学んだ後にまとめてやろうと思います。

*10 この定義では不十分で、次節でユニタリ性などの条件が課されることを見ます。

*11 先に断ったようにグローバル位相因子は1とします。 \cos, \sin の中身が θ でなくそれを2で割った値なのは、P.9の **Intermission** で解説します。

*12 $(\cos x)^2$ のことを慣例で $\cos^2 x$ と書きます。これは $\cos(x^2)$ との混同を避けるためです。

*13 ここで推定と言ったのは、 $e^{i\phi}$ の周期性によって ϕ から 2π ズレたものも同じ状態を表すために一意に定まらないからです。次々節で詳しく扱います。

*14 (8)に出てきた \sin, \cos など

5 量子ゲート

この節では1量子ビットに作用するゲートを説明します*15。前節で述べたように量子ゲートは量子ビットに作用し各量子ゲートの性質に基づいて新たな量子ビットを返します。これを以下の記号で書くことにします。

$$G : |\psi\rangle \mapsto |\psi'\rangle = U_G |\psi\rangle$$

ゲート G はそれによって定まる U_G によって量子ビット $|\psi\rangle$ を $U_G |\psi\rangle$ に変換する、ということです。一般にこのような U_G のことを演算子と呼び、ブラベクトルも大きな意味でケットベクトルを複素数に写す演算子と言う事が出来ます。ただしここで使う量子ゲートの演算子はケットベクトルをケットベクトルに対応させるので、ブラベクトルとは種類の違う演算子です。

演算子 U_G によって写された量子ビットには次の性質があります。

$$U_G |\psi\rangle \text{ に対応するブラベクトルは } \langle\psi| U_G^\dagger$$

新出の \dagger は演算子の複素共役*16を表す記号です。この意味はすぐ後で学びます。

ここで、変換後も正規化が満たされている事を要求すると次の U_G に関する性質を導くことができます。

$$U_G^\dagger U_G = 1$$

上の式を満たす演算子の事を総称してユニタリ演算子と呼びます。つまり任意のゲート操作に対応する演算子はユニタリ演算子で書けるという事がわかりました。またユニタリ演算子に限っては \dagger 付きの演算子は元の演算子の逆の作用を引き起こす*17ことも見て取れます。さらに複数回ユニタリ演算子がかかった量子ビットは

$$U_n U_{n-1} \cdots U_2 U_1 |\psi\rangle \text{ に対応するブラベクトルは } \langle\psi| U_1^\dagger U_2^\dagger \cdots U_{n-1}^\dagger U_n^\dagger$$

の性質がなくてはならない事も内積が1に保存される事よりわかります。この意味を理解する上で確認すべき知識として2つの演算子について一般に

$$U_1 U_2 \neq U_2 U_1$$

になるという事です。これはこれまでの複素数 $e^{i\phi}$ や実数とは大きな違いなので慣れるまでは混乱するかもしれませんが、勝手に順序を交換することはできないという事は肝に銘じておいてください。

単一ビットにかかる量子ゲートは次の4つ*18の複素数で指定することができます。

$$U_G = a_{00} |0\rangle\langle 0| + a_{01} |0\rangle\langle 1| + a_{10} |1\rangle\langle 0| + a_{11} |1\rangle\langle 1|, \quad a_{ij} \in \mathbb{C} \quad (10)$$

前節でやった Hadamard ゲートもこの形をしていますね。よく使うゲートをまとめておきましょう。

表1 主なゲートの a_{ij}

U_G	a_{00}	a_{01}	a_{10}	a_{11}
X	0	1	1	0
Y	0	$-i$	i	0
Z	1	0	0	-1
I	1	0	0	1
H	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{2}$	$-1/\sqrt{2}$

*15 複数の量子ビットに作用するゲートも存在します。これは後にテンソル積状態を学んだ後に回収します。

*16 複素数の共役とはまた違う概念

*17 U_G^\dagger はケットベクトルにも作用します。 U_G を掛けたケットベクトルにさらに U_G^\dagger を掛けると元に戻るということです。

*18 ユニタリ演算子という条件を加えると、これらは独立ではなく3つで十分という事もわかります。

各 U_G がなぜ X, Y, Z などと名付けられているかについては深い意味があるのですがここでは割愛し^{*19}、具体的な計算をしながらゲート操作に慣れていきましょう。

まずは簡単に次の古典ビット 0 に対応する量子ビットを初期状態とします。

$$|\psi\rangle = |0\rangle$$

これに X ゲートを作用すると

$$X|\psi\rangle = \left(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|\right)|0\rangle = |1\rangle$$

となって真逆の状態 $|1\rangle$ を返すことがわかります。初期状態を $|1\rangle$ にしても同様に逆の $|0\rangle$ が返されることもわかります。どうやら X ゲートは大きな意味で反転、NOT の効果があるようです。

次に以下のような量子ビットに Z ゲートが作用したことを考えます。

$$|\psi\rangle = \frac{4}{5}|0\rangle + \frac{3}{5}|1\rangle \quad (11)$$

$$Z|\psi\rangle = \left(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|\right)\left(\frac{4}{5}|0\rangle + \frac{3}{5}|1\rangle\right) = \frac{4}{5}|0\rangle - \frac{3}{5}|1\rangle \quad (12)$$

元の量子ビットと新たな量子ビットの関係は (4) と (6) の関係に似ていますよね。そうです、相対位相の違いのみが効いてきています。このような相対位相因子 -1 倍を生み出す $e^{i\phi}$ は $\phi = \pi$ と知られているので^{*20}、 Z は π だけ相対位相をズラす効果があると言えます。

ここで前ページで指摘した演算子の非可換性も見ておきましょう。初期状態には引き続き (11) を採用して、ここに順に X, H と掛けたものと H, X と掛けたものを計算すれば (左に演算子が追加されていくことに注意)

$$\begin{aligned} HX|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|\right)\left(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|\right)\left(\frac{4}{5}|0\rangle + \frac{3}{5}|1\rangle\right) \\ &= \frac{7}{5\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{5\sqrt{2}}|1\rangle \\ XH|\psi\rangle &= \left(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|\right)\left(\frac{4}{5}|0\rangle + \frac{3}{5}|1\rangle\right) \\ &= \frac{1}{5\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{7}{5\sqrt{2}}|1\rangle \end{aligned}$$

すぐにグローバル位相では解消できない差が生まれていることがわかんと思います。つまりゲートを掛ける順番を変える事で得られる量子ビットの状態は変化するということが計算によってもわかりました。

この節の最後に面白い X, Y, Z ゲート間の関係を紹介します。

初期状態は (11) として、これに X, Y と作用させたときの量子ビットの状態を計算してみましょう。

$$\begin{aligned} YX|\psi\rangle &= \left(-i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0|\right)\left(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|\right)\left(\frac{4}{5}|0\rangle + \frac{3}{5}|1\rangle\right) \\ &= -i\frac{4}{5}|0\rangle + i\frac{3}{5}|1\rangle \end{aligned}$$

次に Y, X の順に作用した場合も同様に計算すると

$$\begin{aligned} XY|\psi\rangle &= \left(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|\right)\left(-i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0|\right)\left(\frac{4}{5}|0\rangle + \frac{3}{5}|1\rangle\right) \\ &= i\frac{4}{5}|0\rangle - i\frac{3}{5}|1\rangle \end{aligned}$$

これらはそれぞれ Z を作用した後の量子ビットの状態 (12) 全体に $-i$ または i を掛けたものなのでグローバル位相因子分の差しかなく同じ状態を表しています。これまでの議論の X の部分を Y に、 Y の部分を Z に変更すると、 Z が X になることもわかります。さらに X を Z 、 Y を X にすれば Z は Y になります。

^{*19} Pauli 行列で検索すると色々出ると思います。Bloch 球内の回転軸とも密接な関係がありそれは後に解説します。

^{*20} 弧度法という角度を表す方法における値 (後に解説します)。度数法では 180° です。

数式的にこれらのことは

$$XY = iZ, YX = -iZ \quad (X, Y, Z \text{ をこの順を保って交換したのも成り立つ})$$

でまとめられます。見てわかるように XY の作用が YX のその -1 倍というグローバル位相因子で解消される項になったことで先に述べた演算子の非可換性*21が実質現れず、また Z ゲート単体との作用との比較もグローバル位相因子 $\pm i$ で解消されるので標語的に次のように書くことができます。

$$(X \text{ ゲートの作用})(Y \text{ ゲートの作用}) = (Y \text{ ゲートの作用})(X \text{ ゲートの作用}) = (Z \text{ ゲートの作用})$$

■ 補足 ■

ここまで一緒に計算を追ってくれた方ならわかると思いますが、量子ゲートの作用を計算するのは作用させるゲートを増やすと項が多くなりがちでやや煩雑になり場所も取ります。そこで計算の方法として各演算子に対して行列という数学的道具を対応させ、それを用いて量子ビットの計算をするという事をよく用います。ここは行列の計算方法を習得していれば計算を簡単に行えるというだけでなにか新しい情報があるわけではないので、難しいと思った場合は読み飛ばしていただいて構いません。

量子ゲートの作用を表す演算子の一般形 (10)、もう一度書くと

$$U_G = a_{00} |0\rangle\langle 0| + a_{01} |0\rangle\langle 1| + a_{10} |1\rangle\langle 0| + a_{11} |1\rangle\langle 1|, \quad a_{ij} \in \mathbb{C}$$

に対応する行列を

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{pmatrix}$$

とします*22。

実は演算子を行列にするだけではまだダメで、量子ビット (8) も次のような列ベクトルに対応させます。

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

つまり、係数を順に上から2つ並べたリストのようなものを考えます。

この量子ビット $|\psi\rangle$ に U_G が作用して $|\psi'\rangle$ になることを次の数式で表します。

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{\theta'}{2} \\ e^{i\phi'} \sin \frac{\theta'}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

具体的な行列と列ベクトルの計算方法は教えていませんがこれまでのブラケットを用いた演算子での計算との整合性からわかるはずでです。つまり

$$\begin{aligned} \cos \frac{\theta'}{2} &= a_{00} \cos \frac{\theta}{2} + a_{01} e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi'} \sin \frac{\theta'}{2} &= a_{10} \cos \frac{\theta}{2} + a_{11} e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{aligned}$$

これだけでも紙面の大きな節約になりますが、行列のいいところは行列同士の積によって複数の演算子をまとめられるところにあります。行列同士の積は次の形で定義されます。

$$\begin{pmatrix} a'_{00} & a'_{01} \\ a'_{10} & a'_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a'_{00}a_{00} + a'_{01}a_{10} & a'_{00}a_{01} + a'_{01}a_{11} \\ a'_{10}a_{00} + a'_{11}a_{10} & a'_{10}a_{01} + a'_{11}a_{11} \end{pmatrix}$$

これを用いることで上で指摘した Y, X ゲートを順に作用させたものと Z ゲートの関係はより顕になります。

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \leftarrow XY = iZ \text{ に対応}$$

*21 順序を交換すると等しくなること。

*22 数学的には演算子からその行列表現を定める方法は一意ではなく基底を指定する事が必要です。ここでは基底を $|0\rangle, |1\rangle$ に取りました。

INTERMISSION Bloch 球とゲート

ここでは Bloch 球を理解することを目的で弧度法や三角関数や $e^{i\phi}$, 三次元極座標について解説し、その後前節の各ゲートが Bloch 球上の矢印の変化として視覚的に見る事ができる事を見ます。この記事の本題とは少し逸れる部分なので気楽に読んでください。

正三角形の1つの角の大きさはいくつでしょう、という問いに3人がこう答えたとします。

小学生：60°

大学生： $\pi/3$ rad

航海士：360'

一見全て違って見えますが、実は全員が正しい事を言っています。このように同じ角度を示すにも色々な方法があり、°を付ける角度の表記を度数法、radを付けるそれを弧度法と呼んでいます*23。数学や物理ではもっぱら弧度法を使い、radは省略されることが多いのでここでもそれに倣います。

度数法表記の角度 x° から弧度法表記 θ への変換は次の式で与えられます。

$$\theta = \frac{x}{180}\pi$$

つまり直角 90° は $\pi/2$, 一周 360° は 2π に対応して.....と言った具合です。またこの記事の範囲では一周すると元に戻る*24という直観を認め、弧度法における θ と $\theta + 2\pi$ を同一視し、 $0 \leq \theta < 2\pi$ に制限することになります。

三角関数 \sin, \cos はこの θ の範囲で図5のような振動する振る舞いを見せます。今すぐに θ とそれに対応する三角関数の値を具体的に覚える必要はなく、雰囲気を感じただけであれば結構ですが、 $\sin \theta, \cos \theta$ の値を同時に*25指定すれば θ は一意に定まり、特に両者を非負の値で指定すれば θ は $0 \leq \theta \leq \pi/2$ の中に存在することや、どちらも $\theta \rightarrow \theta + \pi$ で値が -1 倍になることは重要です*26。

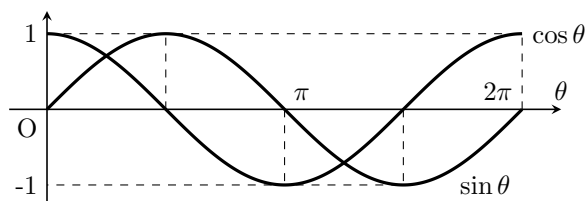


図5 $\sin \theta, \cos \theta$ のグラフ

三角関数の振る舞いを見たところで $e^{i\phi}$ と三角関数を次の式で結びつけます。

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

四節で初めて $e^{i\phi}$ が登場した時に複素数で大きさ1のものと説明しましたが、今やこの性質は上の式と(9)から明らかです。また、 \sin, \cos 両方を含むので $e^{i\phi}$ について対応する ϕ を一意に決定することができます。ここでもう一度量子ビットの一般形(8)を見てみましょう。

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

今注目してほしいのは後ろの $\theta, \phi \in \mathbb{R}$ の部分です。これは三角関数の周期性とグローバル位相因子を考慮すれば

$$0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi \tag{13}$$

の大幅な制限を加えることができ、この範囲で量子ビット $|\psi\rangle$ と組 (θ, ϕ) は1対1の対応をします。これを証明する代わりに今まで扱った量子ビットの中から数個を選んで対応する (θ, ϕ) を探ってみましょう。

*23 ' を付けるのは度数法の一部です。

*24 これは一般には正しくありません。例えば太さのある紐を 2π 振った後に両端点の相対的な向きを保ったままできる操作を加えて振る前の状態に戻すのは不可能で、 4π 振ってようやくこれが可能になる事が知られています。

*25 関係式(9)があるので独立に好きな値を選べるというわけではありません。

*26 これらは(13)式の範囲で全ての量子ビットが網羅できていることに効いてきます。

まずは状態 (4) を見てみましょう。|1〉の係数が正の実数であることから相対位相因子の部分は $e^{i\phi} = 1$ 、つまり $\phi = 0$ として良さそうです*27。 θ については次の式

$$\cos \frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} \quad \sin \frac{\theta}{2} = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

を解けばいいとわかります。先ほど指摘したようにこの場合 $\theta/2$ は 0 から $\pi/2$ の間に必ず解をただ 1 つ持ちます。解は $\theta = 2\pi/3$ とわかるので、状態を指定するのに (4) の代わりに $(1, \theta, \phi) = (1, 2\pi/3, 0)$ という組を用いても良いとわかりました*28。

では (6) はどうでしょうか。|1〉の係数に加わった i は $e^{i\phi}$ において $\phi = \pi/2$ とした値であり、残った θ に関する式は上と全く同じとわかります。つまり $(1, 2\pi/3, \pi/2)$ が求める組です。

最後にこれまでよりは明らかに骨が折れそうな (7) に挑戦してみましょう。改めて式を書くと

$$|\phi'\rangle = \frac{1+i\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1-i\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle$$

見てわかるように |0〉の係数に i が含まれており、このままでは \sin の値にならないので全体にグローバル位相因子 $\frac{1-i\sqrt{3}}{2}$ を掛け*29

$$|\phi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{-1-i\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle$$

へ書き換えます。さらに |1〉の係数について

$$\frac{-1-i\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} = \frac{-1-i\sqrt{3}}{2} \times \frac{1}{\sqrt{2}} = e^{4\pi/3} \times \frac{1}{\sqrt{2}}$$

になることから $\phi = 4\pi/3$ とわかり、 θ についても

$$\sin \frac{\theta}{2} = \cos \frac{\theta}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

を解くことで $\theta = \pi/2$ とわかります。こうして厳つい見た目の (7) も $(1, \pi/2, 4\pi/3)$ と上 2 つと同じくらい簡潔にまとめることができました。

量子ビットの |0〉, |1〉を使った式から $(1, \theta, \phi)$ への変換方法はおおよそ理解できたでしょうか。ここからは状態ベクトルを視覚的に表せるという Bloch 球にこの情報がどう落とし込まれるのかを見ていきます。

半径 1 の球上の一点を指定するにはいくつの情報が必要になるのでしょうか。ある程度三次元の幾何学を学んだ人なら「点の座標 (x, y, z) に条件 $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ が課されるから……」と言った具合に 2 を導くでしょう。これは何ら間違っていないのですが、より身近なところで球面上の点を指定する方法を私たちはよく目にしています—それは緯度経度です。

三次元極座標はこれに緯度に当たるものを北極から測るように変更し、球の半径 r まで自由に動かせるようにしたもので、右の図の (r, θ, ϕ) で指定されます。ちょうど上で求めた値が使えるそうですね。極め付きは緯度経度を思い出せばわかるように

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

となる事です。変数の取れる値まで一致しているので自然と量子ビットを右の図の矢印に対応させるという発想が生まれます。

既に上で量子ビットから $(1, \theta, \phi)$ の変換を見た皆さんは |0〉, |1〉がそれぞれ $\theta = 0, \pi$ (北極と南極) に対応することがわかると思います。

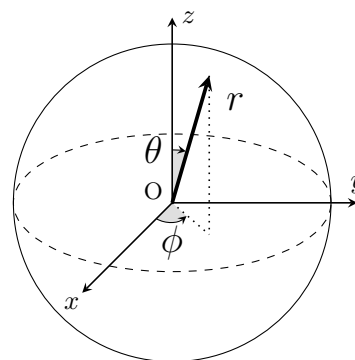


図 6 三次元極座標 (r, θ, ϕ)

*27 これに限らずまず初めに相対位相 ϕ を決定し、その後 θ を決定する方法がやりやすいと思います

*28 1 つ目の数字 1 は量子ビットの状態ベクトルの大きさが 1 であることに由来します。純粋状態という特殊な状態 (この記事ではこの状態しか扱いません) では常に 1 となるので特に気にする必要はありません。

*29 これに対応するグローバル位相は $5\pi/3$ です

この情報を付け加えたのが右の図です*30。おおよそ $\theta = \pi/12$, $\phi = \pi/4$ でしょうか。この時の $|\psi\rangle$ をみなさんはもう書けるはずですよ。

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\pi}{24} |0\rangle + e^{i\pi/4} \sin \frac{\pi}{24} |1\rangle \\ \simeq 0.99 |0\rangle + (0.09 + 0.09i) |1\rangle$$

ですね。合っていましたか？

先ほども出てきたシミュレーターには入力した状態について対応する Bloch 球上の矢印を返してくれる機能もあります。(4) で実行し前ページで求めた $(\theta, \phi) = (2\pi/3, 0)$ がちゃんと出るか見てみましょう。

```
1 qc = QuantumCircuit(1) #bit 数 1
2 initial_state = [1/2, sqrt(3)/2] #(4)の状態
3 qc.initialize(initial_state, 0) #初期化
4 qc.save_statevector() #準備
5 qobj = assemble(qc) #実行
6 state = sim.run(qobj).result().get_statevector()#結果
7 plot_bloch_multivector(state) #図 8 の表示
```

コード 2 Bloch 球の表示

図 8 を見るとたしかに合っていそうです。

Bloch 球の最も便利な点は量子ゲートの操作を Bloch 球上の矢印の軸周りの回転などで書けることです。(4) に Z ゲートを作用させた場合

$$Z|\psi\rangle \equiv |\psi'\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle \quad (14)$$

となりますがこの状態は図 9 のようになります*31。前節で Z ゲートを見た時に「Z は π だけ相対位相をズラす効果がある」と言ったのを覚えているでしょうか。これを Bloch 球の言葉で言い換えると矢印を z 軸周りに π だけ回転させる、となります。他にも X, Y ゲートを作用させると (画像は省略しますが) それぞれ x, y 軸周りに π 回転したものが得られ、また Hadamard ゲートは直線 $x = z, y = 0$ を基準に π だけ回転させる効果がある事などが知られています。

ここまで 3 ページかけて Bloch 球を学んできましたが次ページ以降の複数量子ビットには応用が難しく出てきません。あくまで単一量子ビット限定を視覚的に理解することができる便利な道具、くらいの認識でいるといいと思います。

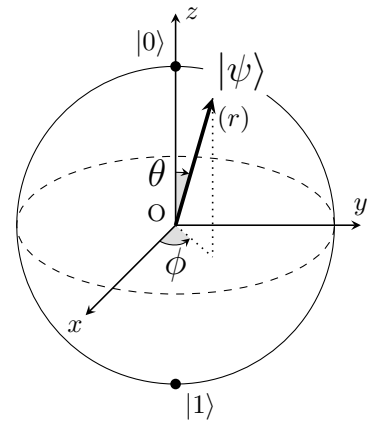


図 7 Bloch 球

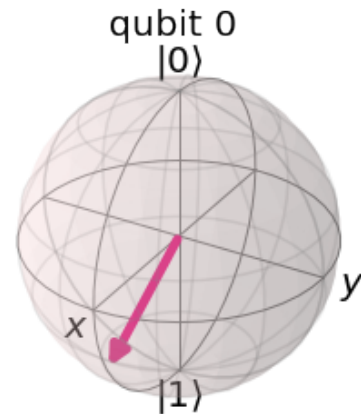


図 8 Bloch 球上の (4)

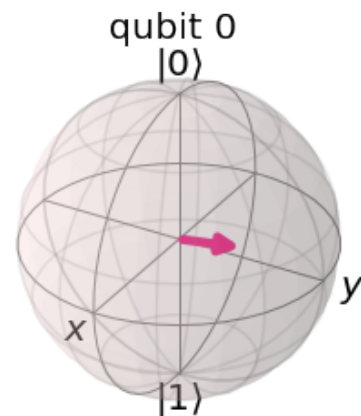


図 9 Bloch 球上の (14)

*30 (r) としたのは 1 で固定だからです。

*31 ややわかりにくいですが紙面手前から奥へ矢印が伸びています (y 軸方向ではありません)。

6 複数量子ビット

記事の本筋に戻り、この節では古典ビット 2 bits 以上に対応するようような量子ビット^{*32}をどう扱うかについて見ていきます。2 bits さえ理解してしまえばそれ以上の bit 数に対応する状態はそれの繰り返しで求められるので主に 2 量子ビットに注目します。

1 量子ビットはそれが正規直交基底を成す複素ベクトル空間 (V と置きます) の元として書けるというのを第二節で見ました。 n 量子ビットと言っても所詮は 1 量子ビット n 個の集まりなのでこれが使えそうです。これをまとめる数学的な方法にテンソル積という方法があり、量子ビット $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ がまとまって複数量子ビット $|\Psi\rangle$ になっている状態を \otimes という記号を用いて次のように書きます。

$$|\Psi\rangle \equiv |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$$

1 量子ビットが V の元であったようにこの状態が属する新たな複素ベクトル空間を考えることもできます。これは同じ記号 \otimes を用いて

$$|\Psi\rangle \in \otimes^2 V$$

で書いて、この $\otimes^2 V$ を V, V のテンソル積空間と呼びます^{*33}。つまりテンソル積状態はテンソル積空間の元になります。これの応用すれば n 量子ビットは $\otimes^n V$ の元になります。

1 量子ビットのテンソル積を計算するのに必要なテンソル積の性質を下にまとめました。

$$\begin{aligned} z(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) &= (z|\psi\rangle) \otimes |\phi\rangle = |\psi\rangle \otimes (z|\phi\rangle) \quad z \in \mathbb{C} \\ (|0\rangle + |1\rangle) \otimes |\phi\rangle &= |0\rangle \otimes |\phi\rangle + |1\rangle \otimes |\phi\rangle \\ |\psi\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle) &= |\psi\rangle \otimes |0\rangle + |\psi\rangle \otimes |1\rangle \end{aligned} \tag{15}$$

たとえば (4) と (5) のテンソル積状態は

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle \right) \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) \\ = \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |0\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle \otimes |1\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle \otimes |0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle \otimes |1\rangle \end{aligned} \tag{16}$$

になります。文脈から明らかな時 \otimes は省略され

$$|0\rangle \otimes |0\rangle = |0\rangle|0\rangle \text{ または } |00\rangle$$

とも書きます。(15) に従って計算すれば 2 量子ビットは必ず

$$|\psi\rangle = c_{00}|0\rangle|0\rangle + c_{01}|0\rangle|1\rangle + c_{10}|1\rangle|0\rangle + c_{11}|1\rangle|1\rangle$$

の形をしています。さらに $|i\rangle|j\rangle$ と $|k\rangle|l\rangle$ の内積を

$$\langle c_{ij}|i\rangle|j\rangle, c_{kl}|k\rangle|l\rangle \rangle \equiv c_{ij}^* c_{kl} \langle i|k\rangle \langle j|l\rangle \tag{17}$$

と定めれば (2) を用いてこの 4 つの $|i\rangle|j\rangle$ はそれぞれ大きさ 1 で互いに直交する、テンソル積空間の正規直交基底を成すことがわかります。また証明はしませんが上の式を用いることで正規化された 1 量子ビットのテンソル積として与えられた複数量子ビットの状態ベクトルもまた正規化されている、という事がわかります。

^{*32} 以降、 n bits に対応するそれを n 量子ビットと言います。

^{*33} 数学的には直積空間 $V \times V$ 上の双線型形式全体がなすベクトル空間の双対空間という定義がありますが、この記事を理解する上では表記法と基底の取り方さえ理解すれば大丈夫です。

次に2量子ビットに作用する演算子について見ていきます。これまであまり注意してきませんでした。演算子は各々にそれが作用できる元が属する空間が定まっています。第五節で演算子の例に挙げたブラベクトル^{*34}や量子ゲートは1量子ビットに作用するので V がその空間でした。 $\otimes^2 V$ は V とは違う空間なので例えば2量子ビット(16)に1量子ビットに作用する Z ゲートを施すという行為は無意味な事になります。

そこで Z ゲートなどの1量子ビットに作用する演算子もまた2量子ビットに作用するように拡張します。ここでも \otimes を使い、 V 上の演算子 A, B に関して $\otimes^2 V$ 上の演算子を

$$(A \otimes B)(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) \equiv A|\psi\rangle \otimes B|\phi\rangle \quad (18)$$

を満たすような $A \otimes B$ で定義します。演算子の積と区別をするためこの \otimes はまず省略されません。

例を見ていきましょう。2量子ビット(16)に $Z \otimes Z \equiv Z^{\otimes 2}$ がかかった^{*35}時の状態は

$$\begin{aligned} & Z^{\otimes 2} \left[\left(\frac{1}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle \right) \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) \right] \\ &= Z \left(\frac{1}{2}|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle \right) \otimes Z \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) = \left(\frac{1}{2}|0\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}|1\rangle \right) \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle|0\rangle - \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle|1\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle|1\rangle \end{aligned} \quad (19)$$

となります。

もう1つ別の計算方法として先に $Z \otimes Z$ を計算しそれを(16)の第二式に作用させるというのがあります。これを見るにはテンソル積状態のケットベクトルとそれに対応するブラベクトルの関係

$$c_{ij} |i\rangle|j\rangle \longleftrightarrow c_{ij}^* \langle i|\langle j|$$

と $|i\rangle|j\rangle$ のテンソル積

$$|i\rangle|j\rangle \otimes |k\rangle|l\rangle = |i\rangle|k\rangle|j\rangle|l\rangle$$

そしてブラベクトルとケットベクトルの積の計算方法

$$(\langle i|\langle j|) (|k\rangle|l\rangle) = \langle i|k\rangle \langle j|l\rangle$$

だけ知っていれば十分です。たしかに(17)と無矛盾なことを確認してください。この方法で計算すれば^{*36}

$$\begin{aligned} & Z^{\otimes 2} \left[\frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle|0\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle|1\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle|1\rangle \right] \\ &= \left[(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) \otimes (|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) \right] \left[\frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle|0\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle|1\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle|1\rangle \right] \\ &= \left(|0\rangle\langle 0|\langle 0|\langle 0| - |1\rangle\langle 0|\langle 1|\langle 0| - |0\rangle\langle 1|\langle 0|\langle 1| + |1\rangle\langle 1|\langle 1|\langle 1| \right) \left[\frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle|0\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle|1\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle|1\rangle \right] \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle|0\rangle - \frac{1}{2\sqrt{2}}|0\rangle|1\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle|0\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}|1\rangle|1\rangle \end{aligned}$$

と(19)と同じ結果が得られました。

^{*34} ここで言っているのは1量子ビットのブラベクトルのことです。このページの中段でやるテンソル積状態に定義されたブラベクトルはこの限りではありません。

^{*35} このように同じ演算子 A を n 個集めて作ったテンソル積にかかる演算子を $A^{\otimes n}$ と書くこともあります。

^{*36} 1量子ビットにかかる演算子が(10)で与えられたように、2量子ビットに作用する演算子も16項からなる $\sum a_{ijkl} |i\rangle|k\rangle|j\rangle|l\rangle$ で書くことができます。ここまで来ると横にズラズラと並べて書く気は起きませんよね。そこで、これを 4×4 行列に対応させて……といった試みもあるので興味のある方はKronecker積などで調べてみてください。

これには様々な利点があります。まずすぐ後に見る CNOT ゲートのような 1 量子ビットにかかるゲートのテンソル積で書けないような (つまり式の左に \otimes が含まれないような) ゲート操作も自在に書くことができます。さらに、次の節で見る量子もつれ状態という 1 量子ビットのテンソル積で書けないような (つまり式の右に \otimes が含まれないような) 状態にある 2 量子ビットへの作用もわかります。

そこでテンソル積で書けないという CNOT ゲートを見てみましょう。この理解は最初にテンソル積状態にある $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$ の対称性を崩し、左にある $|\psi\rangle$ を制御ビット、 $|\phi\rangle$ を標的ビットと呼ぶことから始まります。その上で CNOT ゲートは制御ビットが $|0\rangle$ のとき標的ビットに何もせず、逆に制御ビットが $|1\rangle$ のとき標的ビットに X ゲートを作用させるが制御ビットはどちらの場合でも不変に保たれる、という言葉で説明されます。これは以下のように書けます。

$$\text{CNOT} = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X \quad (20)$$

この式には \otimes が含まれていますが、これは CNOT がテンソル積で書けないという事と矛盾しません。これが主張するのは

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

となる A, B が存在しないという事です。存在しないことを証明するのは一般に難しいですが、次の節の内容を先取りしてやや技巧的に証明してみようと思います。

この証明で使うのは (18) です。テンソル積状態の 2 量子ビットに CNOT を作用させたとき、もし CNOT が演算子のテンソル積で書けるなら作用させた後の状態も 1 量子ビットのテンソル積で書けるはずだが……とこのことを使います。CNOT に慣れるためにも見てみましょう。

最初の 2 量子ビットは次のテンソル積状態を取ります。

$$|\psi\rangle = H|0\rangle \otimes |0\rangle = \frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

ここに CNOT ゲートが作用した時、第一項 $|00\rangle$ については左が 0 なので右も 0 のまま、第二項 $|10\rangle$ については右が 1 なので左も 1 に変わるといった具合に^{*37}

$$\text{CNOT}|\psi\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \quad (21)$$

へと状態が変化します。これが 2 つの量子ビット $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ を用いて $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$ で書けない、つまり量子もつれ状態にあるのは明らかですね^{*38}。つまり CNOT ゲートは 1 量子ビットに作用する演算子のテンソル積では書けないという事がわかりました。次節では (21) のような状態をたくさん目にします。

最後にテンソル積状態にある 2 量子ビットの測定を見てこの節を終わります。

1 量子ビットの測定との変更点は 2 つある量子ビットのうちの片方を測定するという操作が可能になったという事です。測定される方にだけに注目すれば測定結果の確率分布や測定後の変化に関して 1 量子ビットと全く変わりません。(16) を例にとると左の量子ビットを測定したときに確率 $1/4$ で $|0\rangle$ が得られ測定後

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

へ 2 量子ビットは変化し、残りの確率 $3/4$ では $|1\rangle$ が得られそのときは測定後に

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

が 2 量子ビットとして得られます。もしこの後 2 つ目の量子ビットを測定したならば 1 つ目の測定結果によらず 半々の確率で $|0\rangle$ または $|1\rangle$ が得られます。これは測定する順番を変えて右から測定しても同じです。このことが次の節の量子もつれ状態の測定との決定的な違いを生みます。

^{*37} このように (20) を使わずに CNOT の意味で考えた方が作用した後の状態が求めやすいということが往々にしてあります。

^{*38} これを数学的に示すのであれば、 $(a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle)$ が (21) となるような複素数の組 (a, b, c, d) が存在しないことを言えばよいです。正規化の条件を加えるまでもなく存在しないことがわかります。

7 量子もつれ状態

この記事の締めとして量子もつれ状態の顕著な特徴をいくつか見ていきます。
既に前節でも登場した次の2量子ビットを考えます。

$$|\psi\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \quad (22)$$

これは1量子ビット同士のテンソル積では書けません。このようなとき(22)は量子もつれ状態にあると言えます。

量子もつれ状態であっても1つ目のビット(または2つ目のビット)を選択的に測定することができます。前節ではテンソル積状態の場合に測定の順序がそれぞれの測定結果に影響を与えないということを説明しました。量子もつれ状態ではどうでしょうか。

1つ目の測定を先にした場合を考えます。このとき半々で $|0\rangle, |1\rangle$ が得られるのは各ケットの係数からわかります。テンソル積と大きく変わるのはこの後でも $|0\rangle$ が測定されたとき、測定後の状態は

$$|0\rangle \otimes |0\rangle$$

となります。この後2つ目のビットを測定すると $|0\rangle$ が確率1で得られるのは明らかですね。逆に $|1\rangle$ が測定された場合は状態が

$$|1\rangle \otimes |1\rangle$$

に変化します。2つ目のビットを測定すれば必ず $|1\rangle$ が得られます。このように量子もつれ状態では先に測定したビットの結果によって次のビットの測定結果が左右されます。また測定後の状態に \otimes をわざとらしく書いたのにも気付いたでしょうか。このように測定は量子もつれ状態を解消させる効果があります。逆に、CNOTゲートのような複数量子ビットにかかる演算子で1量子ビットにかかる演算子のテンソル積で書けないものは、テンソル積状態にある状態に作用して量子もつれ状態を生み出す事がある^{*39}ということもわかります。

以上でこの記事を終わりにします。量子コンピューターに関する最低限の知識は網羅したつもりです。特に関りが深い記事として、より発展的に量子コンピューターの応用する[小泉さんの量子機械学習の記事](#)、量子もつれ状態が鍵となる[松本さんのCHSH不等式の破れの説明の記事](#)、さらに量子もつれを一般の系について一から詳しく説明している[樋口さんの記事](#)を合わせてお読みいただくと量子コンピューターのみならず量子物理学への理解が深まると思います。最後までご覧いただきありがとうございました！

^{*39} 例えばCNOTゲートがテンソル積状態 $|01\rangle$ に作用しても $|01\rangle$ のままのようにテンソル積状態が維持されることもあります