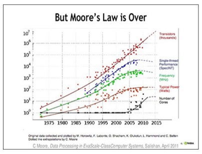
宇宙物理・数理科学研究室　Astrophysics & Mathematical Sciences

量子コンピュータとシュレーディンガー方程式

卒業研究中間報告　B19-110　吉田就

従来型コンピュータの限界



出典:「ムーアの法則の現在は？」
https://ameblo.jp/yurai777/entry12370044943.html

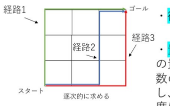
・従来型コンピュータの1コアあたりの計算速度は限界を迎えている。

・左図において青線(Single-thread Performance)は１コアあたりの処理能力を表している。

・ムーアの法則によれば２年ごとに一つの半導体チップの計算速度は1.5倍になるといわれている。

・トランジスタの大きさは、原子サイズの0.1nmに近づきつつあり、量子効果が発生してしまう。

量子の状態で計算？



量子ビット(重ね合わせで同時に3つの経路情報を持つ)

・従来型コンピュータ…逐次的に一つずつ求める。

・量子コンピュータ…重ね合わせを利用し、複数の量子(量子ビット)を組み合わせることで、相当な数の経路を複数の量子で表し、その量子の組に対し、状態を変化(計算)させることにより、経路を一度に計算する。

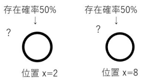
・得意とする問題は最適化である。

・量子が重ね合わせ状態を保つには超低温の環境、空気や他の原子と接触しないようにすることが必要で、まだ巨大であり実用的な機械は開発途上。

量子の状態？

・量子には不思議な性質がある。

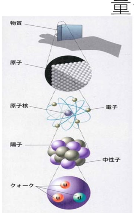
・量子の位置は特定できず、確率でしか表せない。
また、ひとたび観測されると、量子特有の性質が失われる。



・量子は様々な状態の重ね合わせである　ということも言える。

・これらの原理を利用し、量子が同時にもつ(重ね合わせの原理)、さまざまな状態を、1または0(後述)に対応付けて、量子コンピュータは計算を行う。

量子コンピュータ？



出典:一般財団法人 日本量子研究所[量子エネルギーと量子化技術]
https://www.jqsf21.com/about.html

・量子コンピュータの計算において欠かせないものは量子。

・量子は原子、中性子、電子、光子などの物体やエネルギーの最小単位の総称。

・量子コンピュータはトランジスタに代わりこの量子の状態を変化させる量子ゲートを用いて計算を行う。

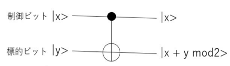
量子ビットについて

- 量子の重ね合わせ状態とはベクトルの和を用いて表現される。
- ある量子の状態$|\varphi>$が$|0>=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$と$|1>=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$の独立した状態(ベクトル)を同時に持つ(重ね合わせの原理)とする。
- |0>,|1>を量子ビット(qubit)と呼ぶ。

- この量子ビットを用いて一般の量子状態は
$|\varphi>$=A|0>+B|1>　$|A|^2+|B|^2=1$(規格化条件)

量子ゲートの例(1) 制御NOTゲート

- 量子ゲートとは量子ビットの各状態を変化させるもの
- $|\varphi>$=A|0>+B|1>を例にとると、|1> を制御ビット、|0>を標的ビットとして、入力する。
- すると、 $|\varphi>$=A|0>+B|1>→ $|\varphi>$=A|1>+B|1>となる。

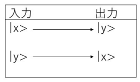


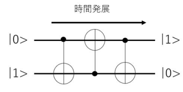
制御NOTゲート

制御ビット	|0>→|0>	|0>→|0>	|1>→|1>	|1>→|1>
標的ビット	|0>→|0>	|1>→|1>	|0>→|1>	|1>→|0>

量子ゲートの例(2) SWAPゲート

- $|\varphi>$=A|0>+B|1> を例にすると、SWAPゲートは量子ビットの係数A,Bを逆転させるゲートである。
- $|\varphi>$=A|0>+B|1>→ $|\varphi>$=B|0>+A|1>
- 図から制御NOTゲートの組み合わせである。





SWAP回路

波動関数とシュレーディンガー方程式

- 私の卒業研究では、量子ビットが重ね合わされた状態を量子が従う方程式(シュレーディンガー方程式)をプログラムで解いて、量子を時間発展させる。
- $\varphi(x,t)$は波動関数と呼ばれ、粒子の状態を表す。
- $|\varphi(x_1,t)|^2$は粒子がx_1に存在する確率になる。
- $\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi(x,t)|^2\,dx=1$(規格化条件)となる必要がある。

- シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(x,t)}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\mathrm{v(x)}\right)\varphi(x,t)$$

v(x)はポテンシャル
ħはプランク定数/2π
mは量子の質量

量子ビット

シュレーディンガー方程式を用いて、複数の位置に広がる電子、つまり一つの量子の波動関数を計算することで、量子ビットをシミュレートする。

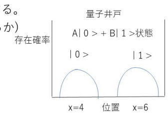
| 0 > →位置4付近に存在するベクトル

| 1 > →位置6付近に存在するベクトル

これらを量子井戸でA| 0 > + B| 1 >($|A|^2, |B|^2$は存在確率) という 0 と 1 状態が

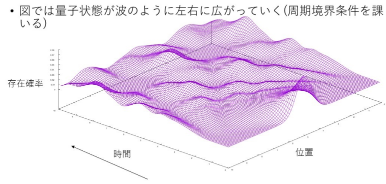
重ね合わされた状態を再現する。

(図では| 0 > か| 1 >のどちらか)



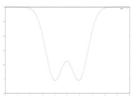
シュレーディンガー方程式の時間発展(1) ポテンシャル無しの場合(V(x)=0)

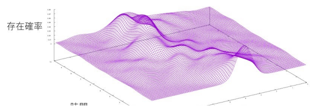
- 図では量子状態が波のように左右に広がっていく(周期境界条件を課している)



シュレーディンガー方程式の時間発展(2) ポテンシャルV(x)=$-e^{-(x-4)^2}$ - $e^{-(x-6)^2}$の場合

- x=4→6,かつその逆に確率が遷移している。
- すなわち、 $|\varphi>$=A|0>+ B|1>→ B|0>+ A|1>となり、SWAPゲートに近づいている。





まとめ

- 量子ゲートの理解に向けて、シュレーディンガー方程式の時間発展問題を数値計算をした。
- 差分法(2次精度)で時間発展、そしてCFL条件を用いてプログラムを組んだ。
- V(X)の設定によって、量子の存在確率の遷移をコントロールでき、量子ゲートの理解の助けになった。
- 今後はポテンシャルの設定を工夫し、2量子系、4量子系の量子ゲートを模擬する。
- そして、量子コンピューティングの仕組みを説明するツールを作成する。

参考文献

[1]宮野健次郎,古澤明「量子コンピュータ入門」，
日本評論社, 2016年3月

[2]遠藤理平,「14日で作る量子コンピュータ」,株式会社カットシステム, 2020年3月

[3] Am.J.Physics 79, C. J. Foot and M. D. Shotter, 「Double well potentials and quantum gates 」,762 (2011) P762-765