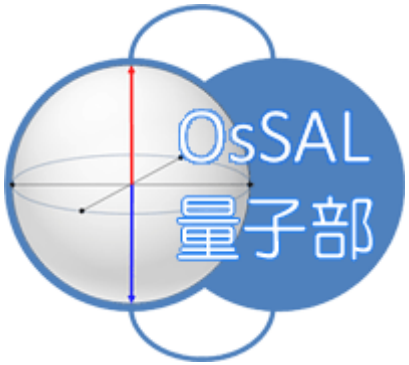
古典プログラマ向け
量子プログラミング入門
[フル版]

- ショアのアルゴリズムから巡回セールスマン問題まで -



OsSAL.org サル量子部

https://www.ossal.org/qc/

LangEdge,Inc.
有限会社 ラング・エッジ

宮地直人（miyachi@langedge.jp）

Ver1.1 2019年11月22日

はじめに

本資料はオープン勉強会として開催された、
サル量子オフ(https://www.OsSAL.org/qc/)の
2019年9月11日開催 [量子ゲート編] と、
2019年10月9日開催 [量子アニーリング編]
で使用した資料に加筆した完全フル版です。

著者が趣味で勉強した量子プログラミングですが入門用に出来るだけソースコードを付けて独習ができるようにしたつもりです。内容に誤りや問題があれば全て著者の責任です。

古典プログラマ向け量子プログラミング入門［フル版］目次

Part 0：イントロダクション（プロローグ）

Part 1： 関連数学と1量子ビット操作

1-1： 線形代数学の基本知識
1-2： ブラケット記法と量子計算
1-3： ブロッホ球と1量子ビット操作
1-4： IBM Q

Part 2： 量子ゲート型のプログラミング

2-1： 複数量子ビット操作
2-2： 量子アルゴリズムの基本
2-3： ドイチェ アルゴリズム
2-4： グローバー検索（量子検索）
2-5： 量子フーリエ変換
2-6： ショアのアルゴリズム
2-7： エラー訂正問題
2-8： Cirq（Google）・Blueqat（MDR）
2-9： 量子ゲート編 付録

Part 3： 量子アニーリング型のプログラミング

3-1： ハミルトニアンとQUBO
3-2： イジングモデル
3-3： グラフ理論
3-4： 巡回セールスマン問題
3-5： 多体相互作用
3-6： アニーリング計算まとめ
3-7： ナップサック問題（応用）
3-8： D-Wave / D-Wave Leap
3-9： 量子アニーリング編 付録

Part 4： 量子と暗号

Part 0：イントロダクション（プロローグ）

Richard Feynman（リチャード ファイマン）

“If you think you understand quantum mechanics, you don’t understand quantum mechanics.”

「もしあなたが量子力学を理解できたと思うならば、それは量子力学を理解できていないと言うことだ。」

※ と言うことできっと私も理解できていないので間違い等ご指摘を！

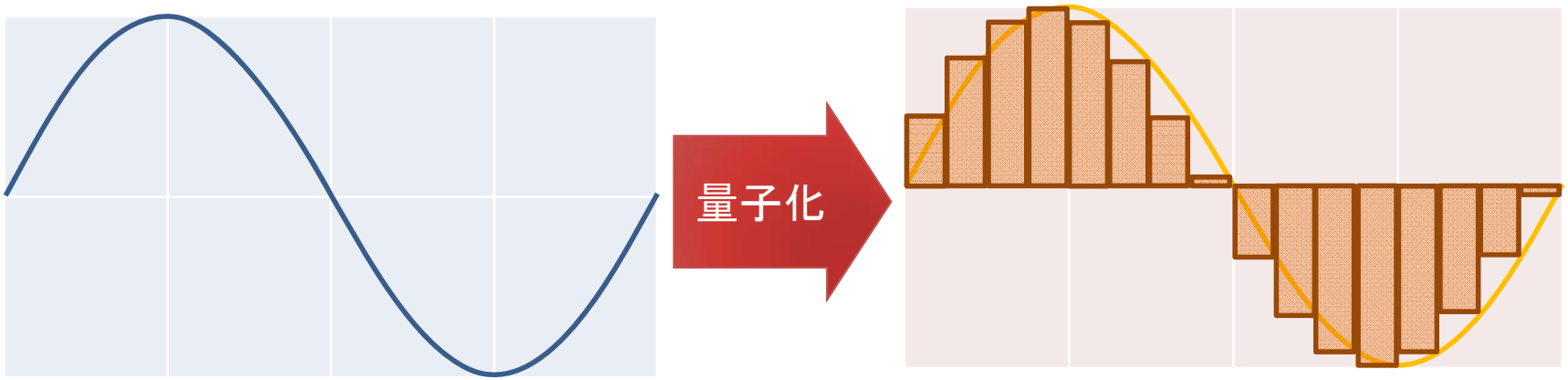
量子とは？

一般的な定義：

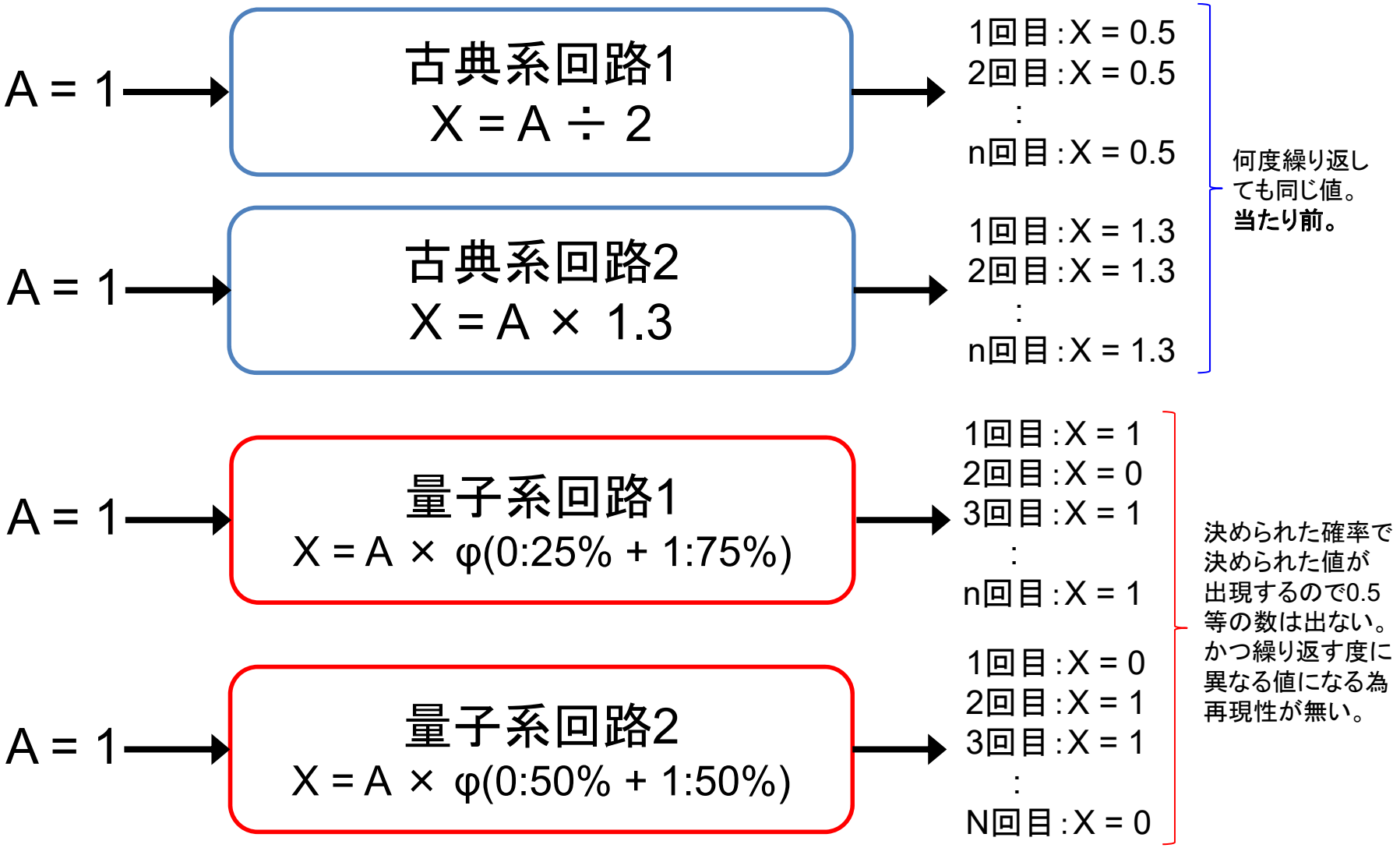
物理量を実数では無く単位量の整数倍で表す場合にその単位量を「量子」と呼ぶ。

※ 量子論/力学以外でも使われる場合がある。

例：アナログ波形のデジタル化を量子化と呼ぶ。



古典系と量子系の測定



φ : 波動関数（複数の解を持つ）

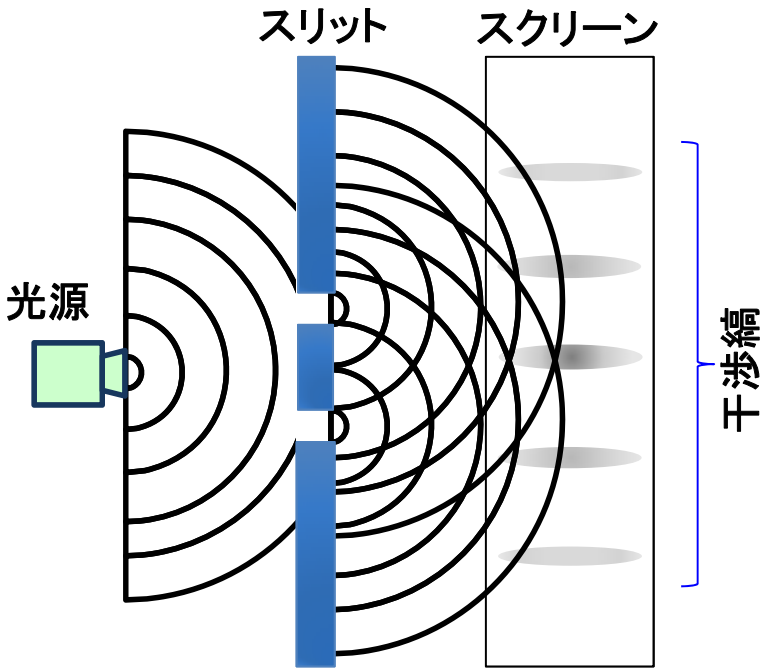
量子系(量子論の世界)

- 量子論で記述された(量子)系が取る状態。
- 古典論では全く同じ系で測定された物理量は**毎回同じ測定値(実数)を示す。**
- 量子論では全く同じ系で測定された物理量は**毎回異なった測定値を示す。**
- 量子状態の測定値は実数では無く固有値によるとびとびの値を取る(だから量子)。
- どの測定値となるかは波動関数により決まる**確率分布**にて示される(コペンハーゲン解釈)。
- 一般に原子以下のミクロな世界は量子状態。

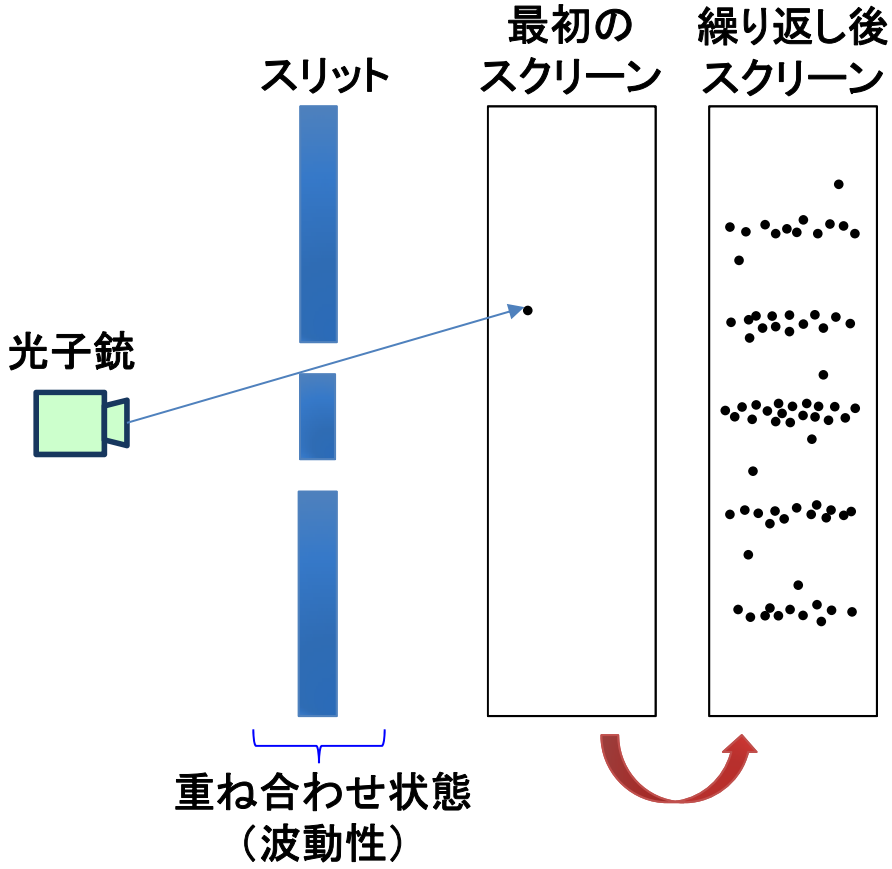
量子の対語は古典

二重スリット実験（光の波動性）

二重スリット通過後に干渉縞が表示される。
と言うことは光に波動性があることを示す。
干渉縞は同じ位相を持つ光源が2つあり、
距離により位相が強めあう場所と弱めあう
場所がある為に生じる現象である。

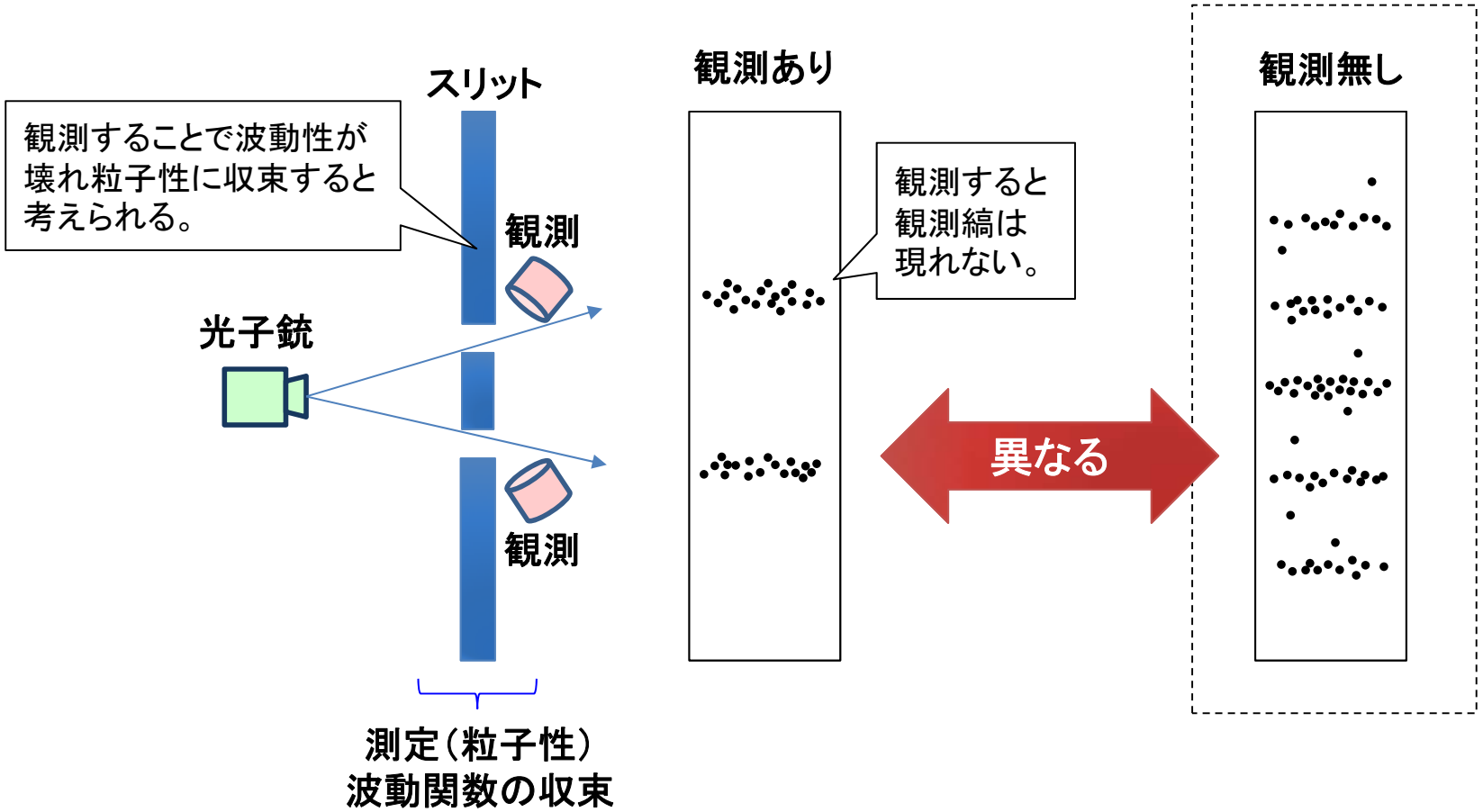


光子1個ずつ発射可能な光子銃と光子1個を
認識できるスクリーンを使う。光子1個ずつを
打ち出しても繰り返すうちに干渉縞が出てくる。
つまり光子1個でも波動性があることになる。



二重スリット実験の観測問題

観測問題：どちらのスリットを通過したかを観測することにより干渉縞が出なくなる。
コペンハーゲン解釈では観測することで量子干渉が壊れて粒子として収束していると考える。
しかし他にも解釈は存在しており（平行宇宙論等）、正確なことは分かっていない。



波動と粒子の二重性（量子重ね合わせ）

アナログ的（複数状態の並列計算）

観測しなくても
時間が経つと崩壊する

観測

デジタル的（計算結果：0 or 1）

重ね合わせ状態（波動性）

量子計算中の状態

収束

固有値状態（粒子性）

量子計算結果の状態

量子デコヒーレンス

複数の状態が同時に存在して
量子干渉を生じている
（コペンハーゲン解釈）

波動関数（列ベクトル）を
$|\psi>$ と表現すると

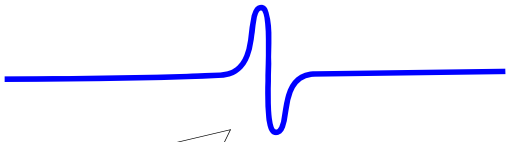
$$|\psi> = c_0|\psi_0> + c_1|\psi_1>$$
$$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1.0$$

c_0 と c_1 は複素数

固有状態のうち1つの状態

$|\psi_0\rangle$ または $|\psi_1\rangle$ のいずれか

波動性は失われる
複素数虚数部は意味を持たない

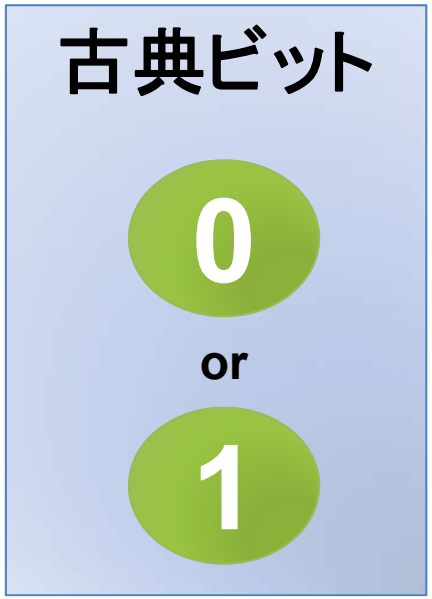


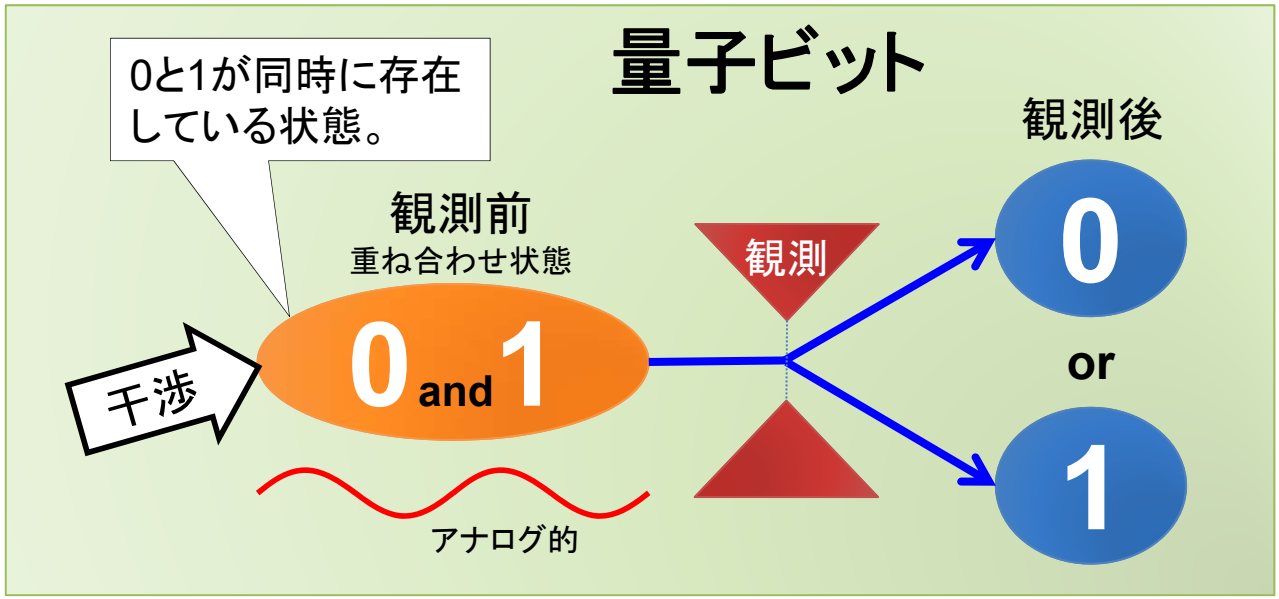
コペンハーゲン解釈では、粒子状態
は波動がパルス状になったと考える。
位置が決まると波長は定まらなくなる。

※ コヒーレンス時間（状態の量子干渉が失われるまでの時間）は通常短い。

量子ビット（重ね合わせの実現）

- 1ビットの情報を持つ量子のビットが量子ビット。
- 量子ビットは観測されると0か1の値を取るが、観測前は0と1の重ね合わせ状態を取る。
- 古典ビットは0か1のいずれかの値のみ持つ。





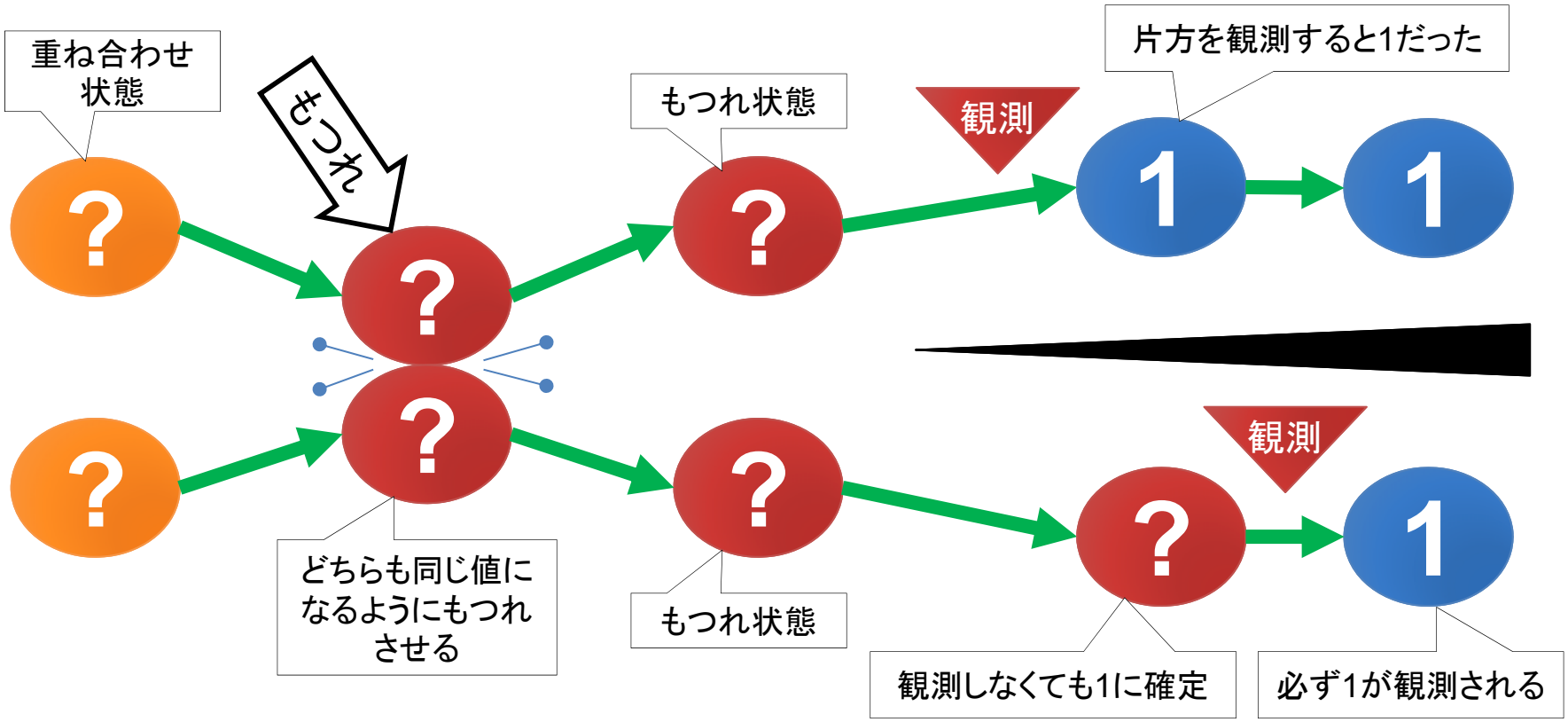
量子ビットの実現

- 物理的に実現するには幾つかの方法がある。

方式	概要	開発
超伝導量子ビット	現在主流となっている超伝導状態のシリコン回路で量子ビットを実現する方式（極低温）	IBM, Google, D-Wave
イオントラップ	捕獲したイオンをレーザーで冷却して利用（室温） 理論的には量子ビット間の全結合が可能	IonQ
量子ドット	原子10～50個で構成した微小半導体を利用（極低温?）	Intel
トポロジカル	超電導体とトポロジカル絶縁体による量子ビット（極低温?）	Microsoft
NVセンター ダイヤモンド窒素-空孔中心	ダイヤモンドの炭素を窒素に置き換えて生じる欠損部に電子を捕獲して量子ビットに利用（室温）	（研究レベル）
QNN 量子ニューラルネットワーク	光パルスを量子ビットとして利用（室温） 全結合によるアニーリング型の計算が可能（らしい）	NTT/NII/東大（ImPACT）

量子もつれ（量子エンタングルメント）

- 2つの粒子（量子ビット）の間に何らかの方法で関係を設定することで、一方を測定すると、もう一方の値が確定する現象を量子もつれと呼ぶ。



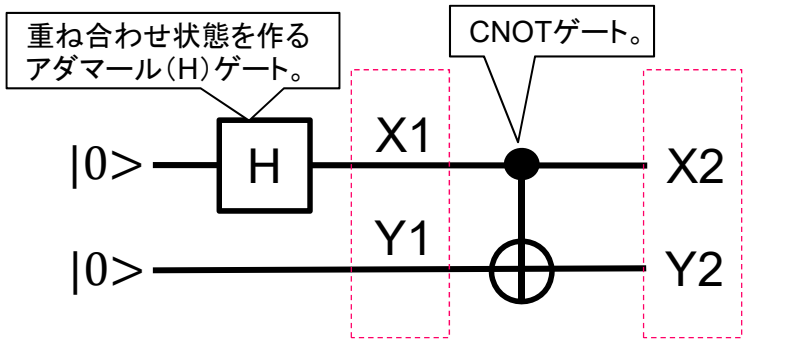
量子もつれの実現

量子ゲート型：

$X1 = |0\rangle : 50\% + |1\rangle : 50\%$
$Y1 = |0\rangle$

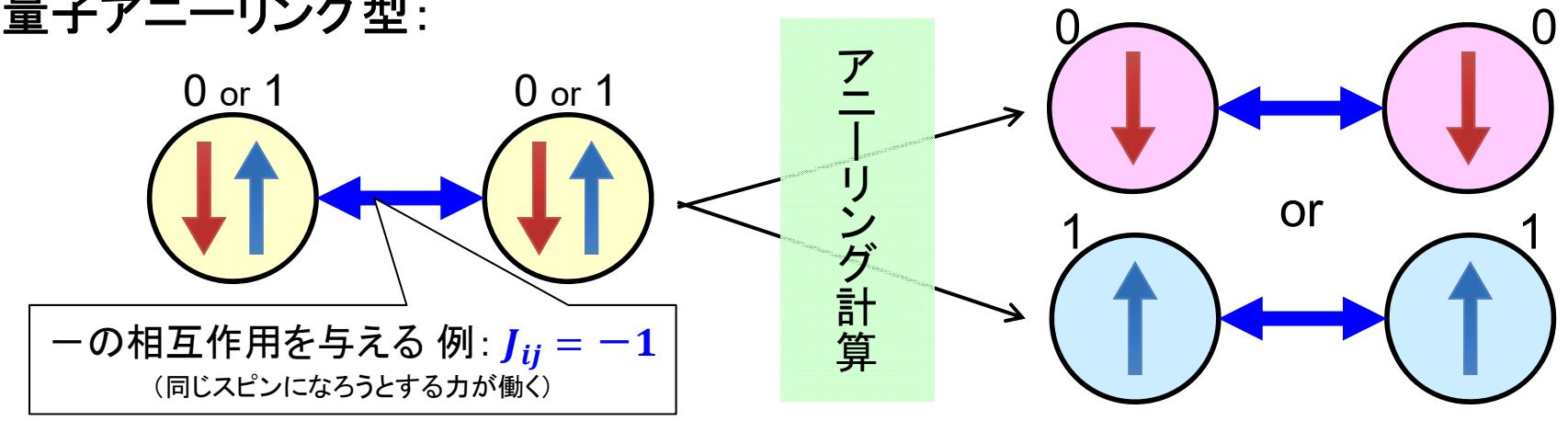
$X2 = X1 = |0\rangle : 50\% + |1\rangle : 50\%$
X1が $|0\rangle$ なら Y2も $|0\rangle$ （Y1そのまま）
X1が $|1\rangle$ なら Y2も $|1\rangle$ （Y1を反転する）

$X2Y2 = |00\rangle : 50\% + |11\rangle : 50\%$
※ $|01\rangle$ や $|10\rangle$ は 0%



X2が0ならY2も0に、
Y2が1ならX2も1と、観測

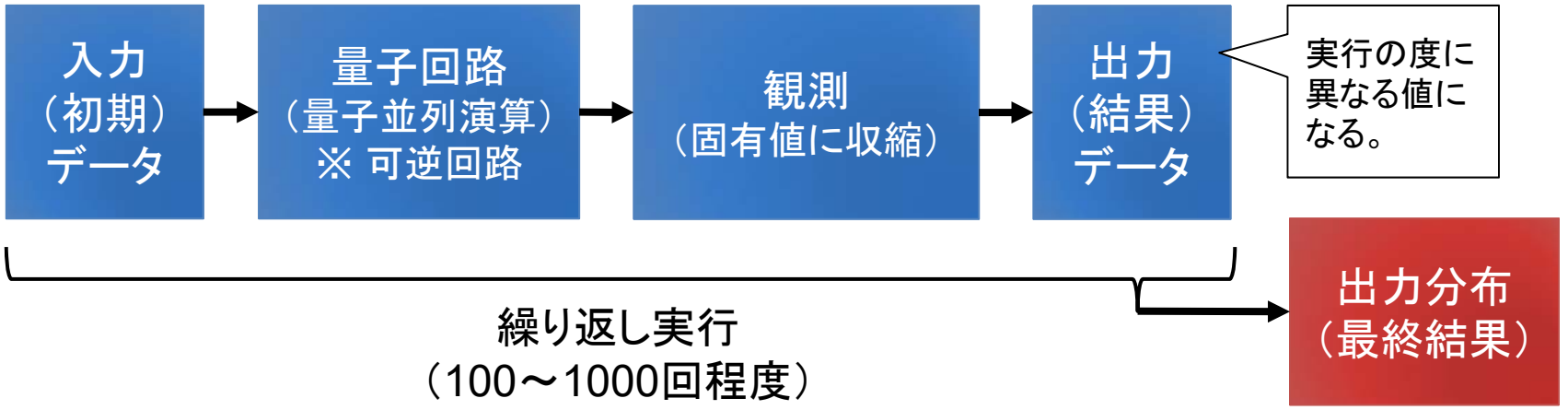
量子アニーリング型：



量子コンピュータの概要

1. 0と1の2つの基底を持つ複数の量子ビットを利用。
2. 重ね合わせた状態のままで量子並列演算を行う。
3. 量子ビット同士を絡み合わせて量子回路を構築。
4. 重ね合わせ状態の出力を観測して固有値に収縮。
5. **繰り返し実行**し確率的な固有値の**出力分布**を得る。

→ 二重スリット実験時に光子の分布により干渉縞を確認するようなもの。



量子コンピュータの種類

量子ゲート型（狭義の量子コンピュータ）

方式：量子ゲートの量子回路による量子計算

対象問題：汎用（ただし量子アルゴリズムの範囲内）

開発企業：IBM/Google/Intel/Alibaba/Microsoft等

量子アニーリング型（正確には量子シミュレータ）

方式：イジングモデルを使った量子シミュレーション

対象問題：最適化問題特化（深層学習等への応用）

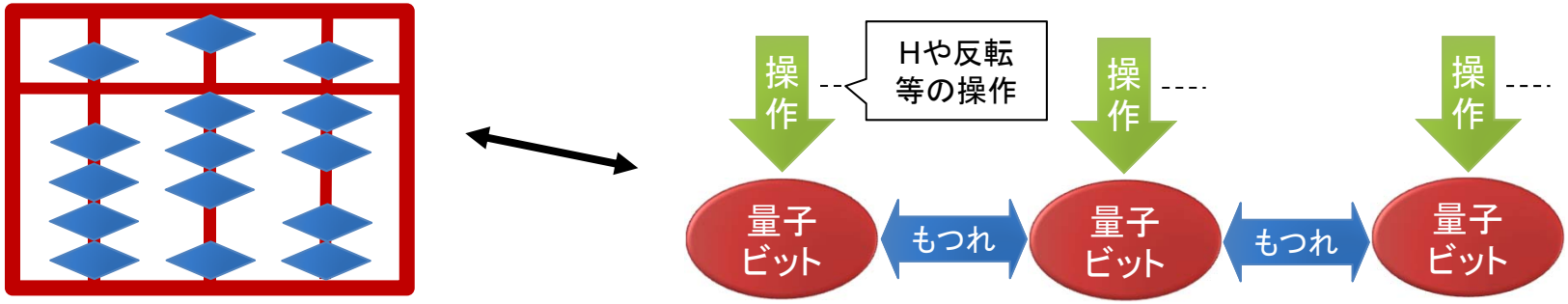
開発企業：D-Wave（非量子型では富士通と日立）

※ 非量子：富士通「デジタルアニーラ」、日立「CMOSアニーリングマシン」。

※ 他に光を使ったCIM（コヒーレントイジングマシン）もあるがここでは省略。

量子ゲート型とソロバン

ソロバンは珠(たま)を配置したハードウェアを、指で弾いて行くことで計算を進めて行く。各珠の間には桁上がり等の関連性がある。



量子ゲート型は量子ビットを配置したハードウェアを、レーザーや電界で弾いて行くことで計算を進めて行く。各量子ビット間には量子もつれによる関連性がある。

ソロバンは可逆回路でもある。ただしソロバンは同じ操作をすれば毎回同じ値になるが、量子では異なる。

可逆コンピュータ

可逆コンピュータは非量子な場合には低電力になっても低性能になる為にほぼ実用化されていない。

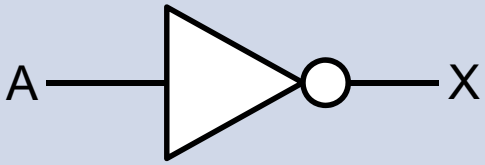
情報が失われる時にエネルギー（熱）が消費される。

可逆コンピュータが実現すると低電力化が可能となる。

IBMから1960年代に出た理論で今も研究が続いている。

※ 量子コンピュータは可逆コンピュータの一種である（詳細は次ページ）。

NOTゲート

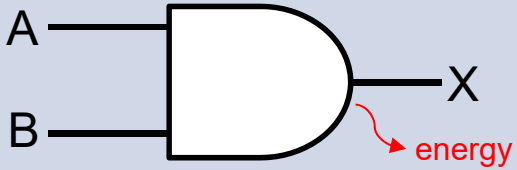


A	X
1	0
0	1

出力から入力が再現できるので可逆

可逆

ANDゲート

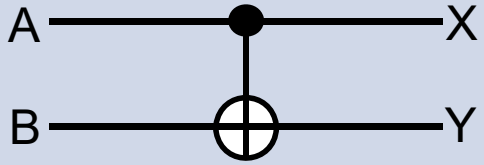


A	B	X
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

出力から入力が再現できない

非可逆（量子計算では使えない）

CNOTゲート



A	B	X	Y
0	0	0	0
0	1	0	1
1	0	1	1
1	1	1	0

Yだけ見るとXOR

可逆

なぜ量子コンピュータは可逆なのか？

量子計算:

1. 量子力学の計算にはシュレディンガー方程式を利用。
2. シュレディンガー方程式は時間に可逆な性質を持つ。

従って:

シュレディンガー方程式を使う量子計算も可逆となる必要がある。

つまり:

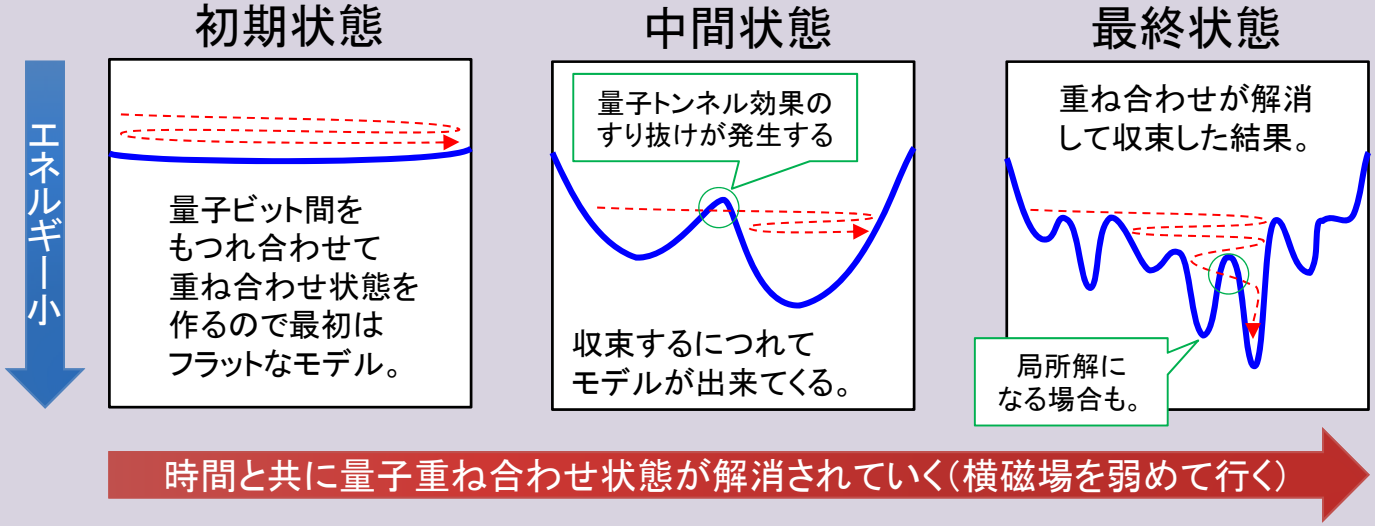
ゲート型の量子コンピュータは可逆コンピュータ。

※ 後ほどもう少し詳しくシュレディンガー方程式を見ます。

量子アニーリング型の計算

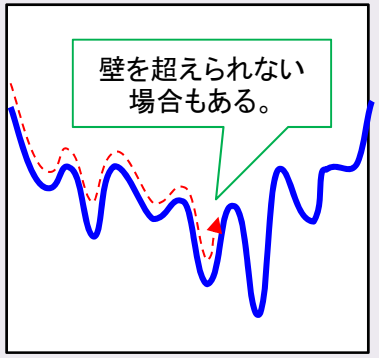
どちらも問題をイジング
モデルとして定式化する
必要があり数学が必要。

量子アニーリング



量子アニーリングでは量子ビット間の全結合(もつれ)が理想だが…

シミュレーテッドアニーリング(SA)



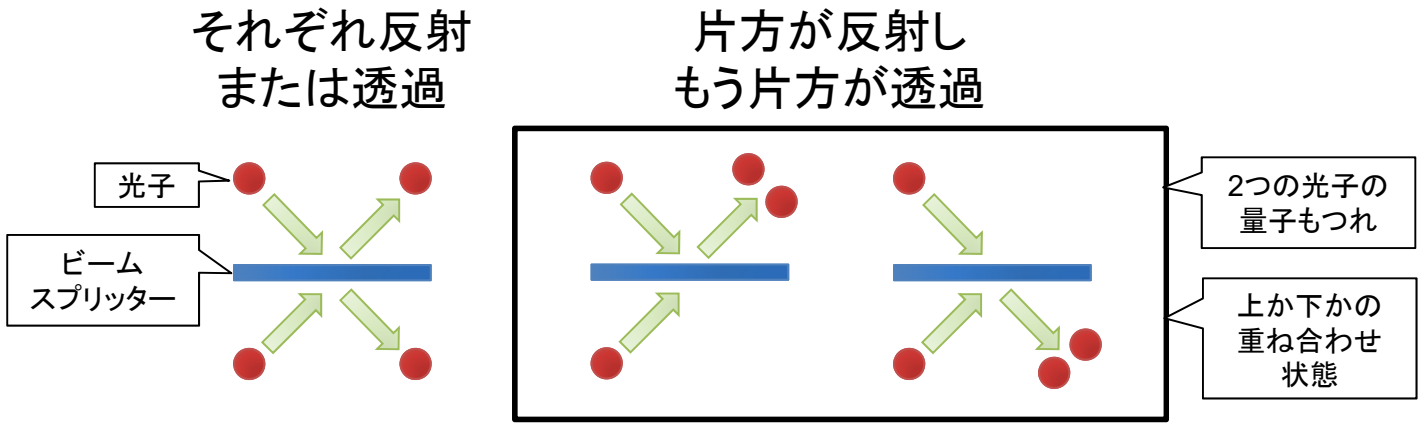
シミュレーテッドアニーリング(SA)は先に
モデルをセットして最適解を求めて行く。

シミュレーテッドアニーリングは古くから
使われており、現在でも富士通や日立が
専用ハードウェアを使ったアニーリングを
実現(例:デジタルアニーラ)している。

光の量子コンピュータ

上下から光子対を入射する。

・ビームスプリッターとはハーフミラーのこと。

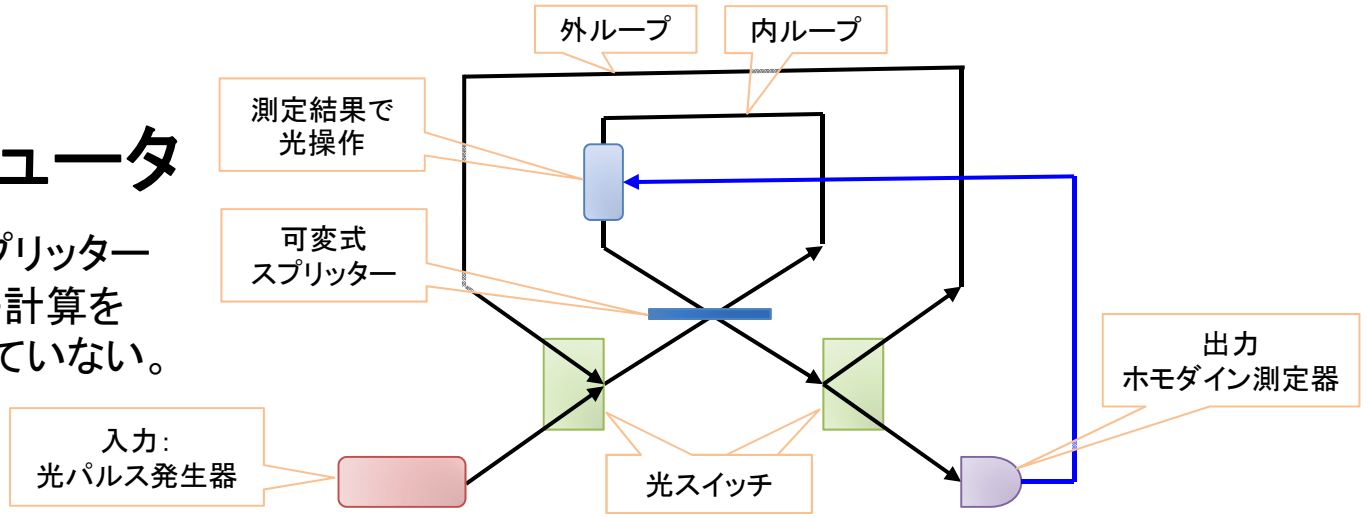


※ 測定するとこちらのいずれかになる

ループ型光量子コンピュータ

1つの可変式ビームスプリッターを何度も使うことで量子計算を行っていく。まだ完成していない。

複数のビームスプリッターを使うことで量子計算を行っていくタイプもある。



NISQの時代（今後5～10年程度）

Q2B: QUANTUM FOR BUSINESS 2017

物理学者 John Preskill による基調講演の論文

「*Quantum Computing in the NISQ era and beyond*」

https://arxiv.org/abs/1801.00862

NISQ: Noisy Intermediate-Scale Quantum

ノイズエラーがあり中規模量子ビット数の時代

50～数百量子ビット程度

現在は標準ハードウェアと標準ソフトウェア（アルゴリズム）を確立する時期で、特にソフトウェアは量子シミュレータを使って勉強しておくことで量子プログラミング時代に備える。

量子コンピュータの未来予想

量子超越
（古典コンピュータでは解けない問題）

RSA暗号解読

どこかでブレークスルーを生じる可能性はゼロではないが…

2015　2019　2023～2030　2040～2060くらい（予測困難）

	NISQ *ノイズあり中規模*	*量子加速* *（Quantum Speedup）*	*万能（Universal）量子コンピュータ*
実用性 汎用性	ほぼない （一部を除き古典機の方が早い）	一部あり （古典機よりも早い分野がある）	あり （ただし得意不得意はある）
信頼性	ノイズ（エラー）あり	（部分的な）エラー訂正	エラー訂正あり
量子数	10～10^2	（エラー訂正あり）10^2～10^6	10^6（数百万）以上
利用形態	専用機	専用機・外部接続装置	単独・古典機と融合

参考：（ノイマン型）古典コンピュータの歴史

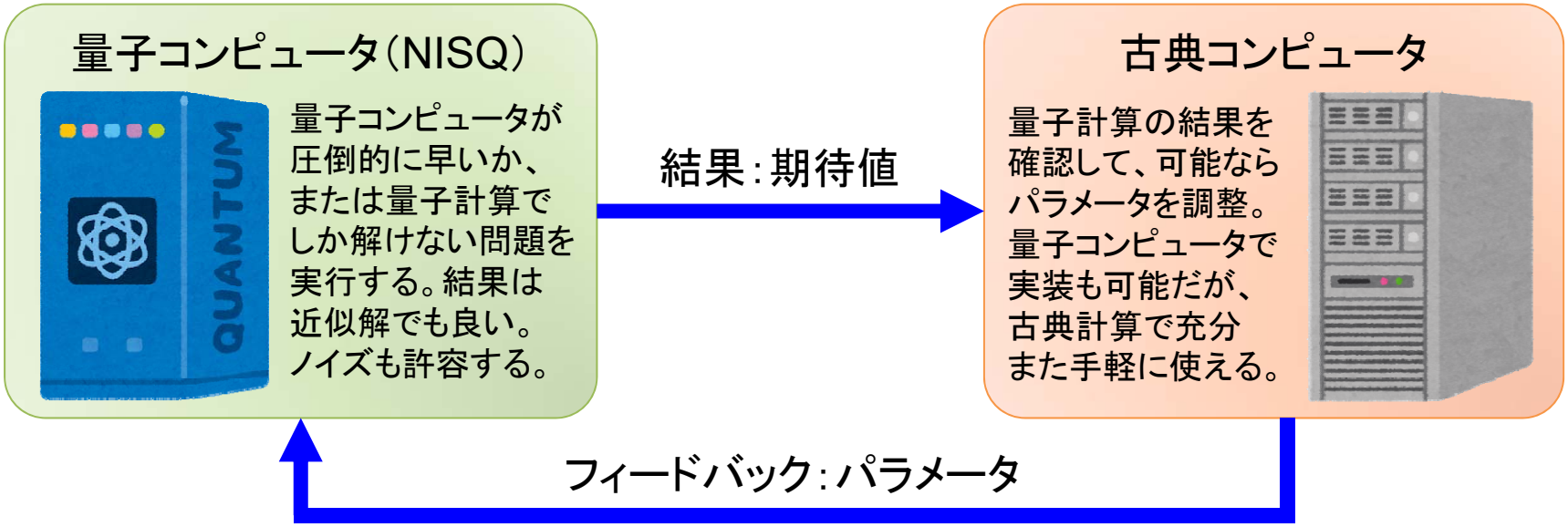
同じような経緯か？

1950　1955　1970

第1世代 *真空管・試用や研究*	*第2世代* *トランジスタ・商用化*	*第3世代* *集積回路・パーソナル化*

古典量子ハイブリッドアルゴリズム

現実的な利用方法として古典コンピュータとの組合せ利用が進んでいる。
第２部で説明するショアのアルゴリズムもある意味ハイブリッド計算である。



主な用途：

- 近似最適化：QAOA（Quantum Approximate Optimization Algo）
- 基底状態探索：VQE（Variational Quantum Eigensolver）
- 機械学習：QCL（Quantum Circuit Learning）

量子計算フレームワーク（量子ゲート型）

IBMやGoogleは自社量子コンピュータを使う為の量子計算フレームワークを公開している。実機だけではなくシミュレーション機能を持っているので、量子プログラミングの勉強用として最適だが小規模の量子回路のみとなる。

項目	IBM Qiskit	Google Cirq
ロゴ	 Quantum Information Science Kit	 Cirq
構成	Terra: 量子計算の基盤部（Python） Aqua: 量子アルゴリズムのライブラリ OpenQASM: 量子低レベル中間言語	Cirq:量子計算基盤Pythonライブラリ OpenFermion: 量子化学ライブラリ
提供	オープンソース（GitHub）	オープンソース（GitHub）
取得	https://qiskit.org/ https://github.com/Qiskit	https://github.com/quantumlib/Cirq
情報	https://qiskit.org/documentation/ja/	https://cirq.readthedocs.io/en/latest/
その他	IBM Q Experience: GUI利用 ※ GUIからOpenQASMに展開し実行 https://quantumexperience.ng.bluemix.net/	2018年夏に正式公開されたライブラリ 量子コンピュータ実機はまだ使えない

量子計算フレームワーク（量子アニーリング型）

日本のベンチャーが開発した量子計算フレームワークも公開されている。
D-Wave社のOceanもQiskit/Cirqと同じく基本的には自社ハード用SDKである。

項目	Blueqat	D-Wave Ocean SDK
ロゴ	Blueqat	D-Wave The Quantum Computing Company™
構成	量子ゲート型の計算（本来ゲート型） 量子アニーリング計算も可能	量子アニーリング型の計算
提供	オープンソース（GitHub）	オープンソース（GitHub）
取得	https://github.com/Blueqat	https://github.com/dwavesystems/dwave-ocean-sdk
開発	株式会社 MDR https://mdrft.com/?hl=ja	D-Wave Systems, Inc.（カナダ） https://www.dwavesys.com/
その他	Qiskit/Cirqよりも回路記述が簡単。 前身は量子アニーリング用のWildqat。 日本語のSlackも参加可能。 勉強会・ブログ等で積極的に日本語で情報発信をしている。	D-Waveマシン用のSDK。 シミュレーテッドアニーリング計算も可能。 計算に実機を使う為には登録が必要。 D-Wave Leap https://www.dwavesys.com/take-leap

量子計算シミュレータ

富士通のデジタルアニーラや、
日立のCMOSアニーリングも、
ある意味ではシミュレータである。

今、我々に必要なもの：

エラーなし高速の量子計算シミュレータ

目的：量子アルゴリズムの学習の為

量子コンピュータの実機とシミュレータの比較：

実機（NISQ）：エラーがあり小規模（各種制限あり）のみ

シミュレータ：エラーなしで中規模（制限少）、ただし限界あり

※ シミュレータもNISQ計算のQiskit/Cirqはその意味では向いていない。

- Qulacs（QunaSys社）：C++実装で高速化
- QGATE（個人の趣味）：GPUを使って高速化

https://numba.pydata.org/（Blueqat 0.3.9 の numba バックエンドで利用）

Part 1：関連数学と1量子ビット操作

まず必要となる関連数学として線形代数学の勉強と、1量子ビットのイメージを学びます。

主に量子ゲート型向けですが量子アニーリングでも共通の概念が使われています。

参考：シュレディンガー方程式と波動関数

※ 理解できなくても量子プログラミングでの大きな問題にはなりません。

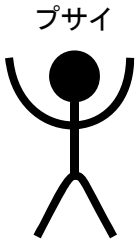
（時間依存する）シュレディンガー方程式

$\hbar$：プランク定数h / 2π

m：質量

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(x,t) = H\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x,t)$$

- $i\hbar\frac{d}{dt}\psi(x,t)$：時間から見た全エネルギー
- $H\psi(x,t)$：ψ:波動関数
- H:ハミルトニアン
- $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$：運動エネルギー
- $V(x)$：ポテンシャルエネルギー

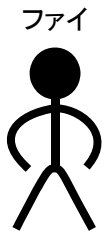


シュレディンガー方程式は、波動関数の値を求める方程式ではなく、
波動関数の式そのものを求める方程式となっている。

古典力学では粒子のエネルギーは保存される（時間依存が無い）ので、
時間発展しないシュレディンガー方程式を導くことができる。

$$E\phi(x) = H\phi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\phi(x)$$

- $E\phi(x)$：エネルギー固有値
- $H\phi(x)$：φ:波動関数（時間依存無し）



http://scienceinoh.jp/schrodinger/

量子計算は複素数計算が必要

シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(x,t) = H\psi(x,t)$$

左辺に虚数単位 i が出てくる。
この方程式を成立させる為には右辺の H が実数であるので、波動関数 ψ が複素数で表現されなければならい。

波動力学と行列力学

時間発展しないシュレディンガー方程式（波動力学）

$$H\varphi(x) = E\varphi(x)$$

Hはハミルトニアン式、φ(x)は波動関数（固有関数）、Eはエネルギー固有値

行列における固有値問題の式

$$Ax = \lambda x$$

Aは正方行列、xは列ベクトル（固有ベクトル）、λはスカラー値（固有値）

量子計算は行列の固有値問題として解くことができる。
これをハイゼンベルク方程式（行列力学）と呼ばれる。
この場合に波動関数は固有ベクトルとして求められる。

※ 波動力学と行列力学が数学的に同じであることはシュレディンガーにより確認されている。

量子の状態はベクトルで表現できる

量子系の状態ベクトル

n次元量子の状態 $=$
基底: $|0\rangle, |1\rangle, \ldots, |n\text{-}1\rangle$

$$\begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \vdots \\ C_{n-1} \end{pmatrix} = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle + \ \ldots + C_{n-1}|n\text{-}1\rangle$$

ただし $|C_0|^2+|C_1|^2+|C_{n-1}|^2 = 1$

ただし C_0～C_{n-1}は複素数。

量子ビットの状態 $=$
基底: $|0\rangle$ と $|1\rangle$

$$\begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \end{pmatrix} = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$$

ただし $|C_0|^2+|C_1|^2 = 1$

それぞれ確率50%なら: $C_0 = C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$|0\rangle$ を得る確率は $|C_0|^2$
$|1\rangle$ を得る確率は $|C_1|^2$

1-1：線形代数学の基本知識

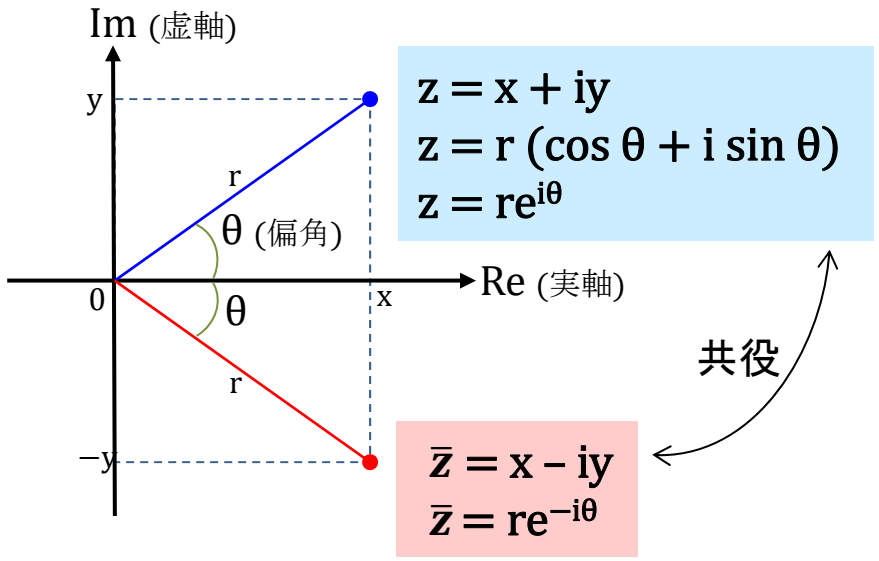
量子計算が行列演算で解けるということは、
行列演算の線形代数学の知識が必要です。

このパートは線形代数学をマスターしている人は
読み飛ばして頂いて構いません。

数学: 複素数と共役(複素共役)

名称	定義	例
実数	実在する数	$0, 2, 0.4, 1/3, \sqrt{2}$
虚数	2乗してマイナスになる数 i をつけて表す	$i = \sqrt{-1}, i3 = \sqrt{-3}, -i4 = -\sqrt{-4}$ $i^0 = 1, i^1 = i, i^2 = -1, i^3 = -i$
複素数	実数と虚数で示される数 実数部/虚数部が0も含む	$5 + i3, 2 - i4, -0.2 + i0.2,$ $-2 + i0 = -2, 0 - i3 = -3i$

複素平面における共役関係



複素共役(ふくそきょうやく)

虚数部がマイナスになっているペア値。

複素数 Z に対して $\overline{Z}$ と書く。

1. z が実数なら、$z = \bar{z}$
2. $\overline{(z_1 + z_2)} = \bar{z}_1 + \bar{z}_2$
3. $\overline{(z_1 \times z_2)} = \bar{z}_1 \times \bar{z}_2$
4. $\overline{(z_1 \div z_2)} = \bar{z}_1 \div \bar{z}_2$
5. $\bar{z}\, z = |z|^2$

数学: オイラーの公式

複素数の場合には
指数関数と三角関数
の相互変換が可能。

指数関数を三角関数で表す。

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

量子ビットの位相
を扱う為に重要

オイラーの公式の複素共役。

$$e^{-i\theta} = \cos\theta - i\sin\theta$$

三角関数を指数関数で表す。

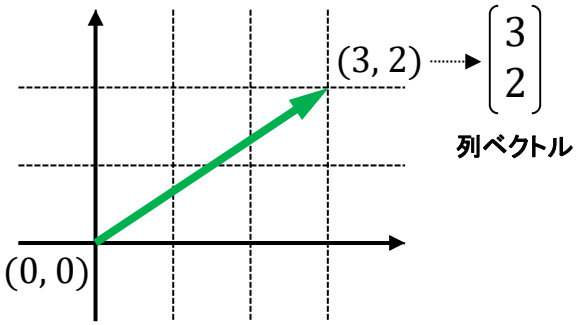
$$\sin\theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}, \quad \cos\theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}$$

数学: ベクトルと基底ベクトル

ベクトル：始点/終点と向き/長さを持つ

- n次元の1行のみの行ベクトルや1列のみの列ベクトルとして扱う。
- 量子計算では原点を始点としたベクトルのみを扱う（線形変換）。
- 量子計算では座標を示す数は複素数。

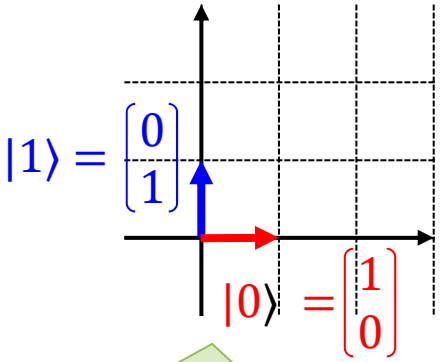
ベクトルと列ベクトル表記



基底ベクトル：基本単位となるベクトル

- 量子計算は $|0\rangle$ と $|1\rangle$ を規定ベクトルとする。「$|\psi\rangle$（ケット）」に関しては後述。
- 規定ベクトルを基準にすることで、移動や回転が表現できる（線形変換）。
- 量子計算では回転のみを利用する。

基底ベクトル



注：値は複素数
例：$1 = 1 + i0$

数学: ベクトルの演算

スカラー倍:

$$m\,(a_1\ a_2\ \dots\ a_n) = (ma_1\ ma_2\ \dots\ ma_n)$$

,

$$m\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mb_1 \\ mb_2 \\ \vdots \\ mb_n \end{pmatrix}$$

ベクトル同士の和と差（同じ次元数同士のみ）:

$$(a_1\ a_2\ \dots\ a_n) + (b_1\ b_2\ \dots\ b_n) = (a_1{+}b_1\ a_2{+}b_2\ \dots\ a_n{+}b_n)$$

$$(a_1\ a_2\ \dots\ a_n) - (b_1\ b_2\ \dots\ b_n) = (a_1{-}b_1\ a_2{-}b_2\ \dots\ a_n{-}b_n)$$

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1{+}b_1 \\ a_2{+}b_2 \\ \vdots \\ a_n{+}b_n \end{pmatrix}$$

,

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1{-}b_1 \\ a_2{-}b_2 \\ \vdots \\ a_n{-}b_n \end{pmatrix}$$

数学: ベクトルの内積

$$\text{行ベクトル} \cdot \text{列ベクトル} = (a_1\ a_2\ \ldots\ a_n) \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

同じ次元間のみ
内積計算が可能

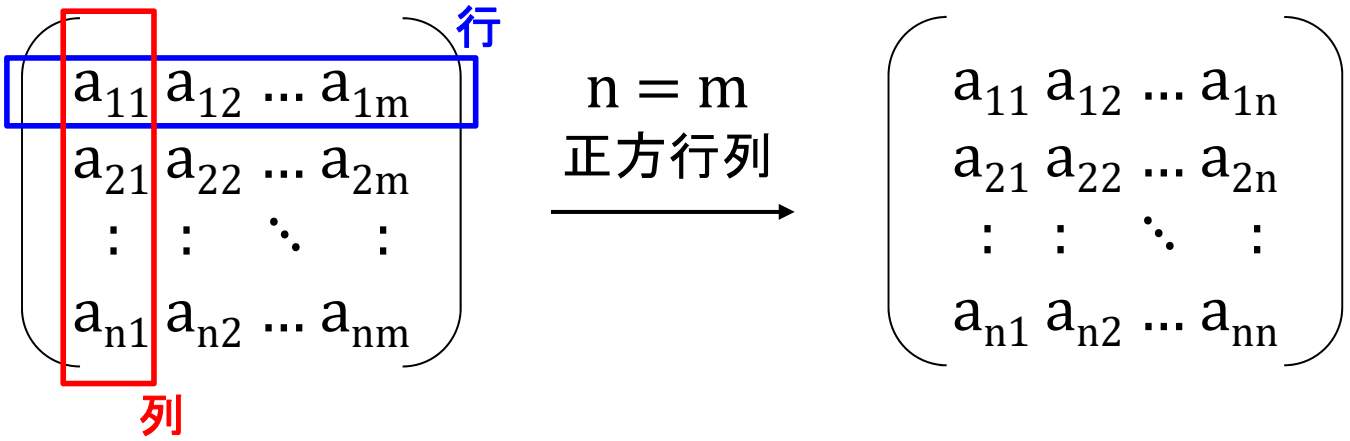
$$= a_1b_1 + a_2b_2 + \ldots + a_nb_n$$

内積の結果はベクトル
ではなくスカラー値になる
ただし複素数なので注意

$$= \sum_{j=1}^{n} a_jb_j$$

数学: 行列と正方行列

行列とは数・記号・式などを縦（列）と横（行）に並べたもの。
列数と行数が同じ場合には正方行列と呼び、量子計算においては正方行列のみを理解していれば良い。



$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{pmatrix} \xrightarrow{n = m \text{ 正方行列}} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

ex1) 2x2 $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$

ex2) 3x3 $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 3 & 4 & 5 \\ 6 & 7 & 8 \end{pmatrix}$

数学: 行列の演算

スカラー倍:

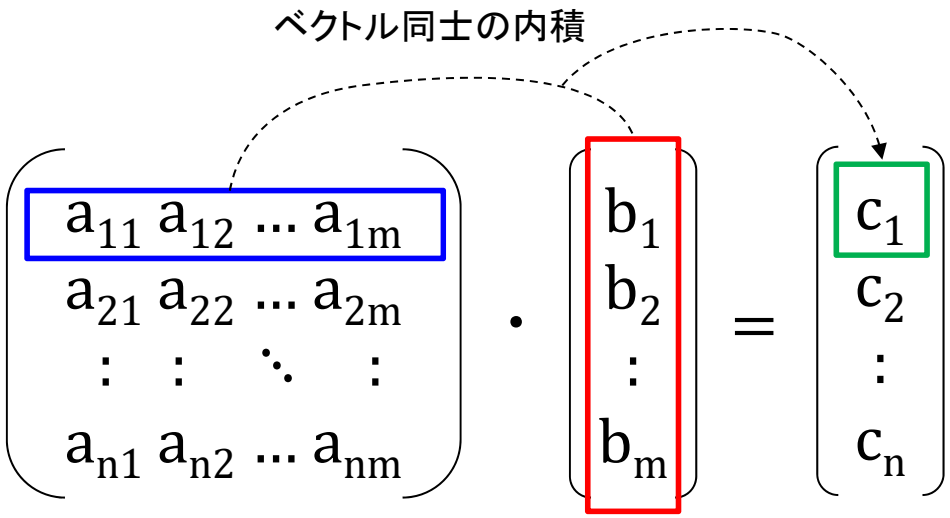
$$\lambda \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda a_{11} & \lambda a_{12} & \cdots & \lambda a_{1n} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdots & \lambda a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda a_{n1} & \lambda a_{n2} & \cdots & \lambda a_{nn} \end{pmatrix}$$

行列同士の和（同じ次元数同士のみ）:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} & \cdots & a_{1n}+b_{1n} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} & \cdots & a_{2n}+b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}+b_{n1} & a_{n2}+b_{n2} & \cdots & a_{nn}+b_{nn} \end{pmatrix}$$

数学: 行列と列ベクトルの内積

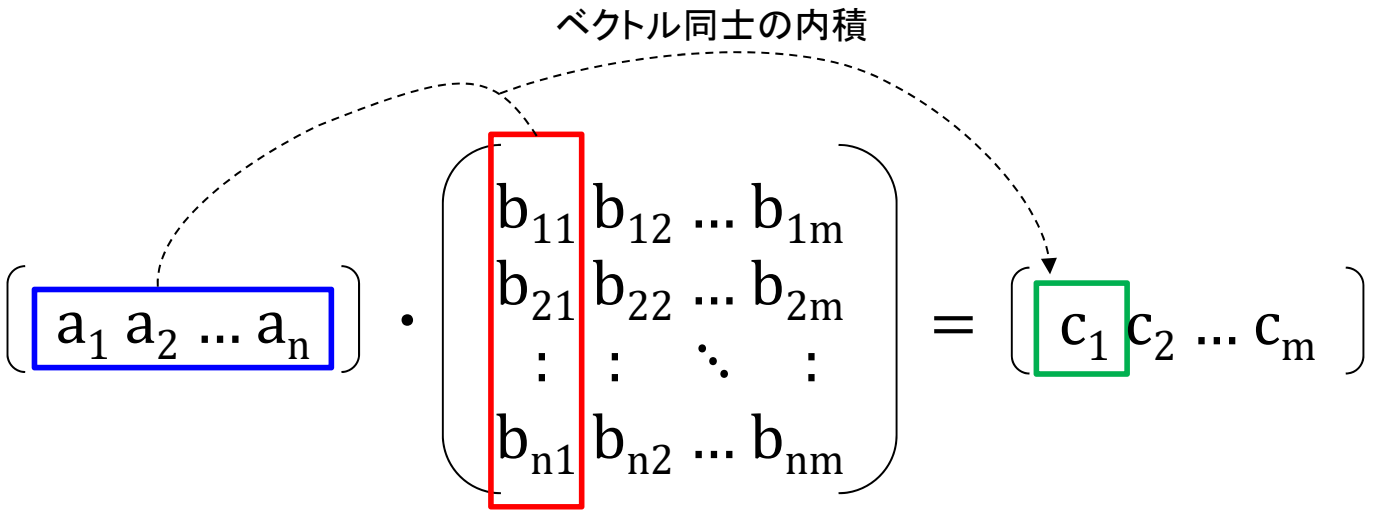
n行m列とm次の列ベクトルの内積はn次の列ベクトルになる:



$$
\begin{aligned}
c_1 &= a_{11}b_1 + a_{12}b_2 + \cdots + a_{1m}b_m \\
c_2 &= a_{21}b_1 + a_{22}b_2 + \cdots + a_{2m}b_m \\
&\vdots \\
c_n &= a_{n1}b_1 + a_{n2}b_2 + \cdots + a_{nm}b_m
\end{aligned}
\qquad \rightarrow \quad c_1 = \sum_{j=1}^{m} a_{1jbj}
$$

数学: 行ベクトルと行列の内積

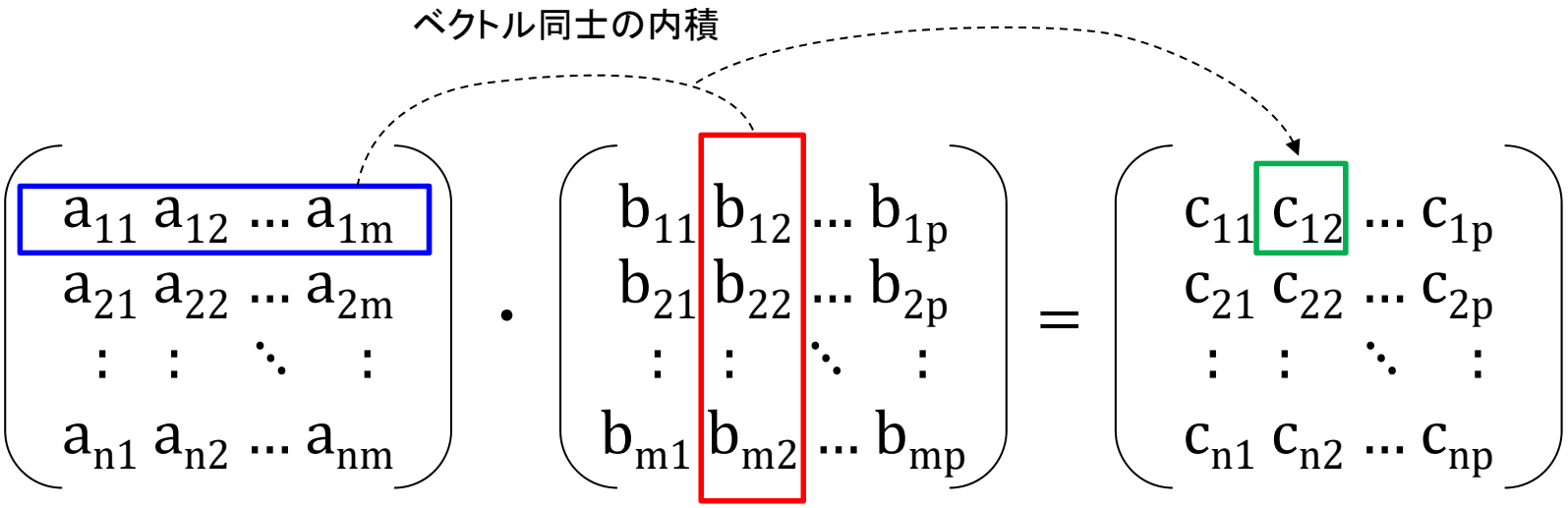
n次の行ベクトルとn行m列の内積はm次の行ベクトルになる:



$$
\begin{aligned}
c_1 &= a_1 b_{11} + a_2 b_{21} + \cdots + a_n b_{n1} \\
c_2 &= a_1 b_{12} + a_2 b_{22} + \cdots + a_n b_{n2} \\
&\vdots \\
c_m &= a_1 b_{1m} + a_2 b_{2m} + \cdots + a_n b_{nm}
\end{aligned}
\qquad \rightarrow \qquad c_1 = \sum_{j=1}^{n} a_j b_{j1}
$$

数学: 行列同士の内積

n行m列とn行m列との内積はn行m列の行列になる:



$$c_{11} = a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} + \ldots + a_{1m}b_{m1}$$
$$c_{12} = a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} + \ldots + a_{1m}b_{m2}$$
$$\vdots$$
$$c_{np} = a_{n1}b_{1p} + a_{n2}b_{2p} + \ldots + a_{nm}b_{mp}$$

数学: 単位行列

単位行列とは対角の値が1でそれ以外の値が0の正方行列:

Eはシュレディンガー方程式のエネルギー固有値Eとは異なるので注意すること。

$$\text{単位行列E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

ex1) 2x2

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

ex2) 4x4

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

単位行列Eの性質:

正方行列Aを単位行列Eにかけると元の正方行列Aのまま

$$AE = EA = A$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

数学: 逆行列

逆行列とは元の正方行列をかけると単位行列になる正方行列:

行列Aの逆行列を A^{-1}(インバース)と書く

逆行列A^{-1}の性質:

正方行列Aに逆行列A^{-1}をかけると単位行列Eになる

$$A\,A^{-1} = A^{-1}\,A = E$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

2x2の場合のみ:

$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ で $ad - bc \neq 0$ の時、

$A^{-1} = \frac{1}{ad-bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$ となる。

ex) 3x3

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

数学: 行列式と逆行列の計算

行列式は正方行列を式としてスカラー値を得る計算ができる:

行列A

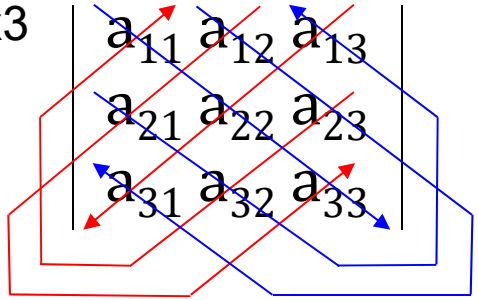
$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

行列式A

$$|A| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

3x3

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{21}a_{32}a_{13} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{23}a_{32}a_{11}$$



逆行列の計算:

$$A^{-1} = \frac{1}{|A|}\hat{A}$$

余因子行列:Â(エーハット)

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix}$$

ここではこれ以上
詳しく説明しない

数学: 固有値問題式変形（固有値問題1）

$$Ax = \lambda x \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

A は正方行列、λ は固有値（スカラー値）、x は列ベクトル

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

単位行列を使って展開

右辺を左辺に移動

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

係数をまとめる

$$\begin{pmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$x \neq 0$ かつ $y \neq 0$

この行列がゼロである必要がある。

$$\begin{pmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda \end{pmatrix}$$

数学: 固有値の計算（固有値問題2）

$$\begin{pmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

この行列がゼロである必要がある

$x \neq 0$
$y \neq 0$

右行列式が成り立つ

$$\begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda \end{vmatrix}=0$$

固有値 λ_1 λ_2 を求める計算例:

※ 2次元の場合の固有値は2つ（重解なら1つ）。

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}$$ とした場合、

$$\begin{pmatrix} 1-\lambda & 2 \\ -1 & 4-\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

右行列式が成り立つ

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 2 \\ -1 & 4-\lambda \end{vmatrix}=0$$

$$(1-\lambda)(4-\lambda)+2=0$$
$$\lambda^2-5\lambda+6=0$$
$$(\lambda-2)(\lambda-3)=0$$

λ が 2 か 3 の時に成り立つ。

答: 固有値

$$\lambda_1=2$$
$$\lambda_2=3$$

数学: 固有ベクトルの計算（固有値問題3）

前頁の結果から:

$$\begin{pmatrix} 1-\lambda & 2 \\ -1 & 4-\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

の固有値は $\lambda_1 = 2$ と $\lambda_2 = 3$ である。

この時のそれぞれの固有ベクトルを計算。

$\lambda_1 = 2$ の時: $\begin{pmatrix} 1-2 & 2 \\ -1 & 4-2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ➡ $-x + 2y = 0$

$-x + 2y = 0 \rightarrow$ λ_1の固有ベクトル解: $\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ （の定数倍）

$\lambda_2 = 3$ の時: $\begin{pmatrix} 1-3 & 2 \\ -1 & 4-3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ➡ $-x + y = 0$

$-x + y = 0 \rightarrow$ λ_2の固有ベクトル解: $\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ （の定数倍）

数学: 行列の対角化（固有値問題4）

$\begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ と、$\begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ を結合した行列Pを、$P = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ y_1 & y_2 \end{pmatrix}$ とすると、

固有値λを対角化した行列を使って、 $AP = P\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$ が成り立つ。

確認: $\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}}_{A}\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}_{P} = \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}_{P}\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}}_{\text{固有値行列}} = \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$

$AP = P\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$ の両辺にP^{-1}を掛けて、 $P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$ が成り立つ。

固有ベクトルを結合した逆行列P^{-1}と行列Pで
挟むことで対角化された固有値行列となる

数学: 固有値問題まとめ（固有値問題5）

$$Ax = \lambda x \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

A は正方行列、λ は固有値（スカラー値）、x は列ベクトル

- 2次元行列の固有値は2つある（量子ビットにも関連）。
  ※ ただし重解（同じ値）のケースでは1つだけ。
- 以下の行列式を解くことで固有値λの計算が可能。

$$\begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

固有値の1つをセットすることで
1つの固有ベクトルの式ができる。

- 固有値λが計算出来たら固有ベクトルも計算できる。
- 対角化により固有値と固有ベクトルの式が成立する。

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \qquad P = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ y_1 & y_2 \end{pmatrix}$$

Pは2つの固有ベクトル
を繋げた行列

数学: 転置行列と複素共役行列

行列の転置とは行と列を入れ替える操作:

行列Aの転置行列を A^T (トランスポーズ)と書く

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \qquad A^T = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{pmatrix}$$

行列の複素共役は虚数部を反転する操作:

行列Bの複素共役行列を $\overline{B}$ (バー)と書く

ex)
3x3

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 2i & 3 \\ 4 & 5-3i & -6i \\ 7i & 8+2i & 9 \end{pmatrix} \qquad \overline{B} = \begin{pmatrix} 1 & -2i & 3 \\ 4 & 5+3i & 6i \\ -7i & 8-2i & 9 \end{pmatrix}$$

数学: 共役転置行列（または随伴行列）

共役転置行列は、行列の複素共役と転置を行う:

行列Aの共役転置行列を A^*（スター）と書く

$$A^* = \overline{A}^T$$

物理学の定義: $A^\dagger = [\,A^T\,]^*$

ex)
3x3

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 2i & 3 \\ 4 & 5-3i & -6i \\ 7i & 8+2i & 9 \end{pmatrix} \quad B^T = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7i \\ 2i & 5-3i & 8+2i \\ 3 & -6i & 9 \end{pmatrix}$$

$$B^* = \overline{B}^T = \begin{pmatrix} 1 & 4 & -7i \\ -2i & 5+3i & 8-2i \\ 3 & 6i & 9 \end{pmatrix}$$

数学: 正規行列

元行列と共役転置行列を掛けて、交換法則(可換)が成り立つ場合に、その行列を正規行列と呼ぶ:

$$A^* A = A A^*$$

物理学の定義: $A^\dagger A = A A^\dagger$

ex)
3x3

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad B^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B^* B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

$$B B^* = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

数学：ユニタリ行列

元行列と共役転置行列を掛けると単位行列Eになる行列：

※ 逆行列と共役転置行列が等しくなる。

※ 内積の値（ベクトルの長さ）は変わらず複素空間の回転が可能。

正規行列

$$U^* U = U U^* = E \Rightarrow A^{-1} = A^*$$

量子ビットの操作に利用（後述）

物理学の定義：$U^\dagger U = U U^\dagger$（ダガー）$= I$

ex)

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

$$A^* A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A A^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

数学: エルミート行列

エルミート行列は元行列と共役転置行列が同じ行列:

$$A = A^* \Rightarrow \overbrace{A^* A = A A^*}^{\text{正規行列}} = A A = A^* A^*$$

物理学の定義:行列 A のエルミート行列は $A^\dagger$ (ダガー)

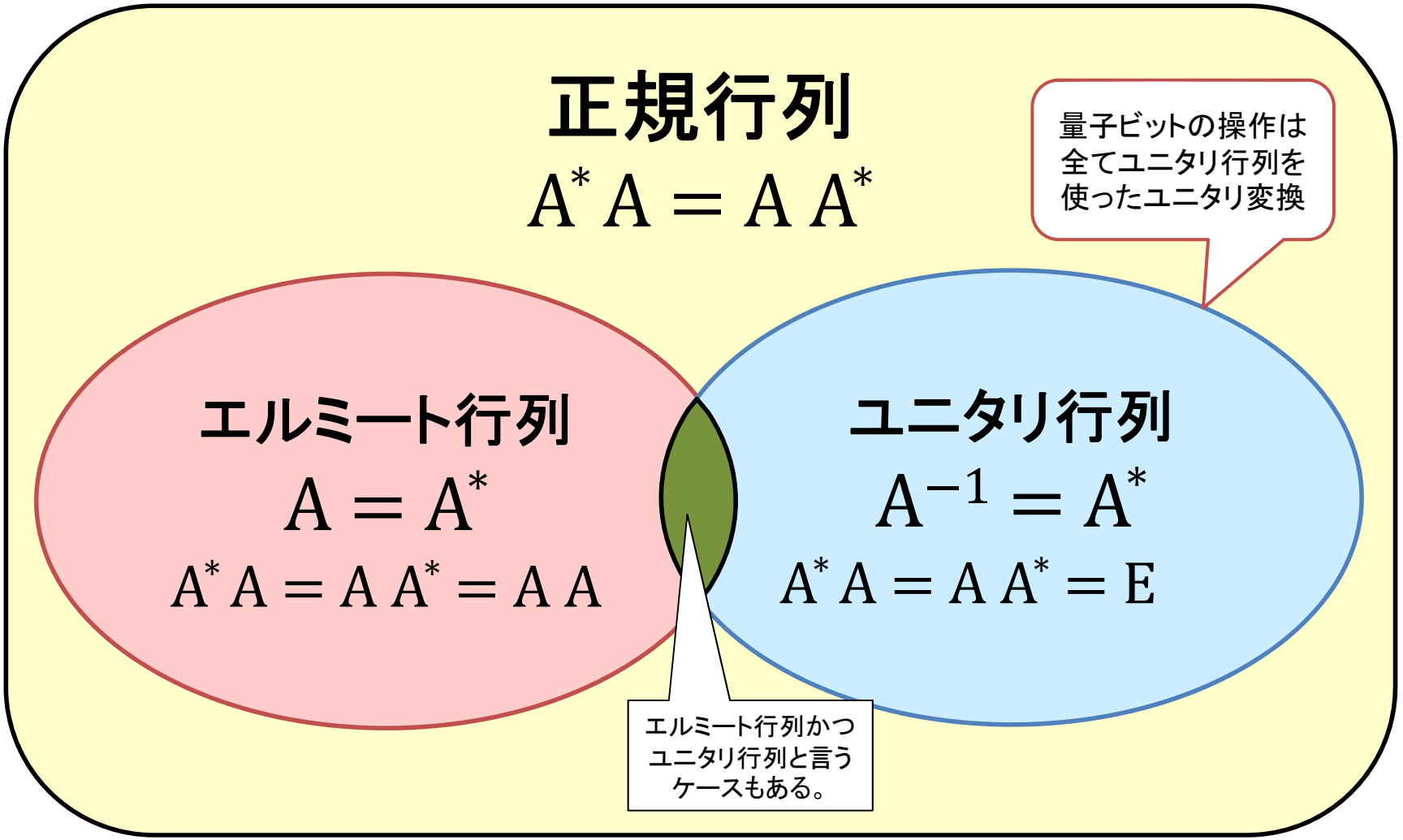
ex) 2x2
$$\begin{pmatrix} 1 & 2+i \\ 2-i & 3 \end{pmatrix}$$

ex) 3x3
$$\begin{pmatrix} 1 & 2-i & 3+i \\ 2+I & 5 & 4+i \\ 3-i & 4-I & 6 \end{pmatrix}$$

エルミート行列の対角は実数になる。
エルミート行列の固有値は実数になる。

量子ビットの観測に利用(後述)

数学: 正規行列・エルミート行列・ユニタリ行列



数学: 推薦図書

高校数学でわかる線形代数
行列の基礎から固有値まで
(ブルーバックス)
竹内 淳 (著) - 231 ページ
出版社: 講談社 (2010/11/20)

Kindle版：950円
https://www.amazon.co.jp/gp/product/B00J9YQF3E/

1-1で説明した内容の多くが本図書で説明されています。量子力学と固有値問題に関しても説明あります。値段も安いし良書だと思います。

1-2: ブラケット記法と量子計算

このパートからいよいよ量子計算関連する話になります。

と同時に数学から物理学へ話が変わります。

物理学と数学の違い

紛らわしい…特にA^*… このページ以降は物理学の 作法で記述して行きます。	物理学 （量子力学）	数学 （線形代数学）
複素共役 （虚数部の±反転）	A^* （スター）	$\overline{A}$ （バー）
複素共役転置	$A^\dagger$ （ダガー）	A^* （スター）
エルミート （自己随伴）	$A = A^\dagger$	$A = A^*$
ユニタリ	$U^{-1} = U^\dagger$	$U^{-1} = U^*$
単位行列	I （id:単位ゲート）	E

ブラケット(BraKet)記法

⟨Bra| ：ブラ(行)ベクトル
|Ket⟩ ：ケット(列)ベクトル

n次元ブラ:
(行)ベクトル $\langle\varphi| = \begin{pmatrix} d_0 & d_1 & \cdots & d_n \end{pmatrix}$,

n次元ケット:
(列)ベクトル $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$

量子計算では
基底ベクトルとして
1 と 0 の2次元の
ブラケットを利用。

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

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

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

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

量子計算結果の
|0⟩ と |1⟩ が重要

ケットベクトルとブラベクトルの関係

n次元ケット（列ベクトル）：
$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

と言う $|\psi\rangle$ ケットがある時に、同じ ψ の $\langle\psi|$ ブラは、
転置＋複素共役 をとった関係となる。

n次元ブラ（行ベクトル）：
$$\langle\psi| = \begin{pmatrix} a_0^* & a_1^* & \cdots & a_n^* \end{pmatrix}$$

ex)
$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ -2i \end{pmatrix} \Leftrightarrow \langle\varphi| = \begin{pmatrix} 4 & 3 & 2i \end{pmatrix}$$

ブラケットベクトルの内積と外積

n次φブラ：（行ベクトル） $\langle\varphi| = \begin{pmatrix} d_0 & d_1 & \cdots & d_n \end{pmatrix}$ ，n次ψケット：（列ベクトル） $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$

がある時に、

内積：$\langle\varphi|\psi\rangle = \begin{pmatrix} d_0 & d_1 & \cdots & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = d_0c_0 + d_1c_1 + \cdots + d_nc_n = \sum_{j=0}^{n} d_jc_j$

結果はスカラー

外積：$|\psi\rangle\langle\varphi| = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_0 & d_1 & \cdots & d_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_0d_0 & c_0d_1 & \cdots & c_0d_n \\ c_1d_0 & c_1d_1 & \cdots & c_1d_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_nd_0 & c_nd_1 & \cdots & c_nd_n \end{pmatrix}$

結果は行列

同じベクトルの内積

ブラベクトル：$\langle\varphi| = \begin{pmatrix} a_0^* & a_1^* & \dots & a_n^* \end{pmatrix}$，ケットベクトル：$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$

がある時に内積計算は、

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} a_0^* & a_1^* & \dots & a_n^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

$$= a_0^* a_0 + a_1^* a_1 + \dots + a_n^* a_n$$

量子計算では、内積の結果が1となるように規格化されている。

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$$

※ これはベクトルの長さが1と言うことと同じ。

テンソル積（1階のテンソル積）

2つの2次元ベクトル $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ がある時、

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a|0\rangle + b|1\rangle \qquad |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = c|0\rangle + d|1\rangle$$

$|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ のテンソル積⊗は4次元ベクトルとなる。

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} a\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \\ b\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ac \\ ad \\ bc \\ bd \end{pmatrix} = \begin{array}{l} ac|00\rangle + ad|01\rangle \\ \quad + bc|10\rangle + bd|11\rangle \end{array}$$

テンソル積の記号⊗は省略されることが多い。

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \quad \Rightarrow \quad |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle \quad \Rightarrow \quad |\psi_1\psi_2\rangle$$

複数量子ビットとテンソル積

複数量子ビットは
テンソル積で表せる。

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$ であるので、

$$|00\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |01\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |10\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |11\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$|000\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |001\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{...(略)...} \quad |111\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$|111\rangle = |7\rangle$
と表示する場合もある

演算子（正方行列）

ブラケットを利用した計算の演算子は正方行列で表す。
演算子をA（正方行列）とすると、ケットは左から、ブラは右から
演算子を適用して、新しいケットやブラに変換ができる。

相対関係 ---------- 複素共役転置になる

$$A|\psi\rangle = |\psi'\rangle \quad \longleftrightarrow \quad \langle\psi|A^{\dagger} = \langle\psi'|$$

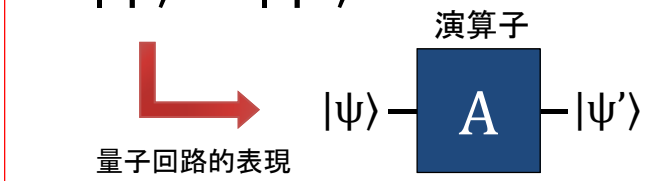
ex)

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad |\psi\rangle = |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ビット反転演算子

$A|\psi\rangle = |\psi'\rangle$

量子回路的表現



の時、

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

なので、 $|\psi'\rangle = |1\rangle$ となる。

ユニタリ(Unitary)演算

量子計算の演算子は全てユニタリ演算子 U となる。

$$U^{\dagger} = U^{-1} \quad \left(U^{\dagger}U = UU^{\dagger} = I \right) \quad \text{の時、}$$

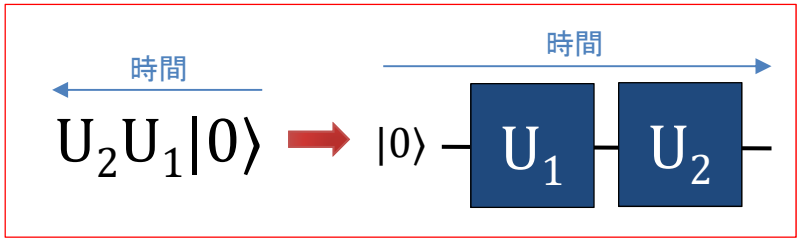
ユニタリ演算により、$U|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ となる。

ユニタリ演算子は**回転操作**(長さは変化しない)演算である。
この為に複数のユニタリ演算子を時間的に順番に利用できる。

ex)

位相反転演算子

$$U_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad U_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$



$$U_2U_1|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -|1\rangle$$

マイナスは位相反転

エルミート(Hermitian)演算

エルミート行列Hは、

$$H^{\dagger} = H \quad \left(H^{\dagger}H = HH^{\dagger} = HH \right)$$ である。

2つの固有ベクトル φ_i と φ_j と、その固有値 λ_i と λ_j がある時、

式1: $H|\varphi_i\rangle = \lambda_i|\varphi_i\rangle$ と、式2: $H|\varphi_j\rangle = \lambda_j|\varphi_j\rangle$ となる。

式1の左辺から $\langle\varphi_j|$ を適用し $\langle\varphi_j|H|\varphi_i\rangle = \lambda_i\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle$ となる。

式2を複素共役転置して式3: $\langle\varphi_j|H^{\dagger} = \langle\varphi_j|H = \lambda_j^{*}\langle\varphi_j|$ とし、

式3の右辺から $|\varphi_i\rangle$ を適用し $\langle\varphi_j|H|\varphi_i\rangle = \lambda_j^{*}\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle$ となる。

結果: $\langle\varphi_j|H|\varphi_i\rangle = \lambda_i\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle = \lambda_j^{*}\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle$ より、

$(\lambda_i - \lambda_j^{*})\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle = 0$ を得る。

$i = j$ なら $\lambda_i = \lambda_i^{*}$ で λ_i は実数、規格化より $\langle\varphi_i|\varphi_i\rangle = 1$ となる。
$i \neq j$ なら $\lambda_i - \lambda_j^{*}$ は0ではなく、$\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle = 0$ (直交)となる。

演算子の行列表現（エルミート演算による対角化）

エルミート演算を波動ベクトルで囲った行列を演算子の行列表現と呼ぶ。ここでは演算を $\langle\varphi_n|H|\varphi_n\rangle$ で（n=0,1,2,...,n）とすると、

$$\begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & \cdots & H_{0n} \\ H_{10} & H_{11} & \cdots & H_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n0} & H_{n1} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\varphi_0|H|\varphi_0\rangle & \langle\varphi_0|H|\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_0|H|\varphi_n\rangle \\ \langle\varphi_1|H|\varphi_0\rangle & \langle\varphi_1|H|\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_1|H|\varphi_n\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle\varphi_n|H|\varphi_0\rangle & \langle\varphi_n|H|\varphi_1\rangle & \cdots & \langle\varphi_n|H|\varphi_n\rangle \end{pmatrix}$$

$i = j$ なら $\lambda_i = \lambda_i^*$ で λ_i は実数、規格化より $\langle\varphi_i|\varphi_i\rangle = 1$ であり、
$i \neq j$ なら $\lambda_i - \lambda_j^*$ は0ではなく、$\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle = 0$（直交）となるので、

$$\langle\varphi_0|H|\varphi_0\rangle = \lambda_0\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = \lambda_0$$
$$\langle\varphi_1|H|\varphi_1\rangle = \lambda_1\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = \lambda_1$$
$$\vdots$$
$$\langle\varphi_n|H|\varphi_n\rangle = \lambda_n\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = \lambda_n$$

$$H = \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

固有値の対角化

エルミート演算による期待値

観測前ベクトル $|\psi\rangle$ と、観測後固有ベクトル $|\varphi_n\rangle$ と、固有値 λ_n があり、どちらのベクトルも規格化されている（長さが1）とする。
この時の期待値（観測される物理量）は $P = \langle\psi| H |\psi\rangle$ で計算可能。

$$\langle\psi| H |\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle\varphi_0|\psi\rangle^* & \langle\varphi_1|\psi\rangle^* & \cdots & \langle\varphi_n|\psi\rangle^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\varphi_0|\psi\rangle \\ \langle\varphi_1|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle\varphi_n|\psi\rangle \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \langle\varphi_0|\psi\rangle^* & \langle\varphi_1|\psi\rangle^* & \cdots & \langle\varphi_n|\psi\rangle^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_0\langle\varphi_0|\psi\rangle \\ \lambda_1\langle\varphi_1|\psi\rangle \\ \vdots \\ \lambda_n\langle\varphi_n|\psi\rangle \end{pmatrix}$$

$$= \underbrace{\lambda_0|\langle\varphi_0|\psi\rangle|^2}_{\lambda_0\text{の期待値}} + \underbrace{\lambda_1|\langle\varphi_1|\psi\rangle|^2}_{\lambda_1\text{の期待値}} + \cdots + \underbrace{\lambda_n|\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2}_{\lambda_n\text{の期待値}}$$

ボルンの規則

量子系の任意ベクトル ψ の物理量(オブザーバブル)の観測時に、各測定値(固有値λ_n)が取る期待値は固有値のどれかとなり、また測定値(固有値λ_n・固有ベクトルφ_n)を得る確率は $|\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2$ となる。

確率振幅を $c_n = \langle\varphi_n|\psi\rangle$ とした時に、全固有ベクトルは完全系をなすので、以下の式が成り立つ。なお c_n は複素数である。

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$$
$$= c_0|\varphi_0\rangle + c_1|\varphi_1\rangle + \ldots + c_n|\varphi_n\rangle$$

$$|c_0|^2 + |c_1|^2 + \ldots + |c_n|^2 = 1$$

全確率の合計は1(100%)となる

よって任意のベクトルは取りえる全ての固有ベクトルで表せる。

※ 期待値が確率振幅の二乗となることをボルンの規則と呼ぶ。

- ボルンの規則は他の方程式から導けないが実験結果と一致するので現在主流となっている計算方法である。

有限準位量子力学系（量子ビット＝2次元）

量子ビットは2つの固有ベクトル・固有値を持つ。
2つの固有（基底）ベクトルを $|0\rangle$ と $|1\rangle$ とする。

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

任意の量子ベクトル ψ に関して確率振幅 c_n を
使ってボルンの規則により以下の式が成り立つ、

確率振幅
c_0 と c_1 は
複素数

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

$$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$$

$$c_0 = \langle 0|\psi\rangle \qquad c_1 = \langle 1|\psi\rangle$$

重要!

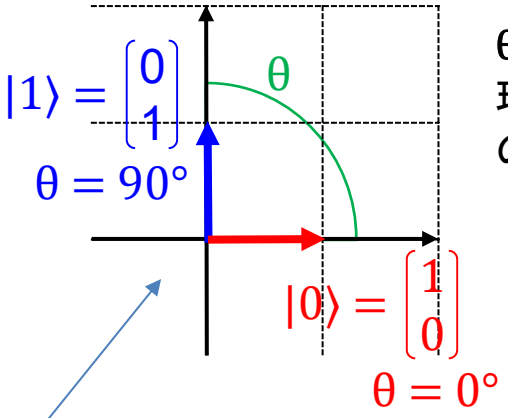
1-3: ブロッホ球と1量子ビット操作

お待たせしました！
このパートからやっと量子計算の話になります。

ここからが本題です！

量子ビットとブロッホ球

基底ベクトル



θ‘ = 2θ とすることで
球面上を量子ビット
の状態が移動する。

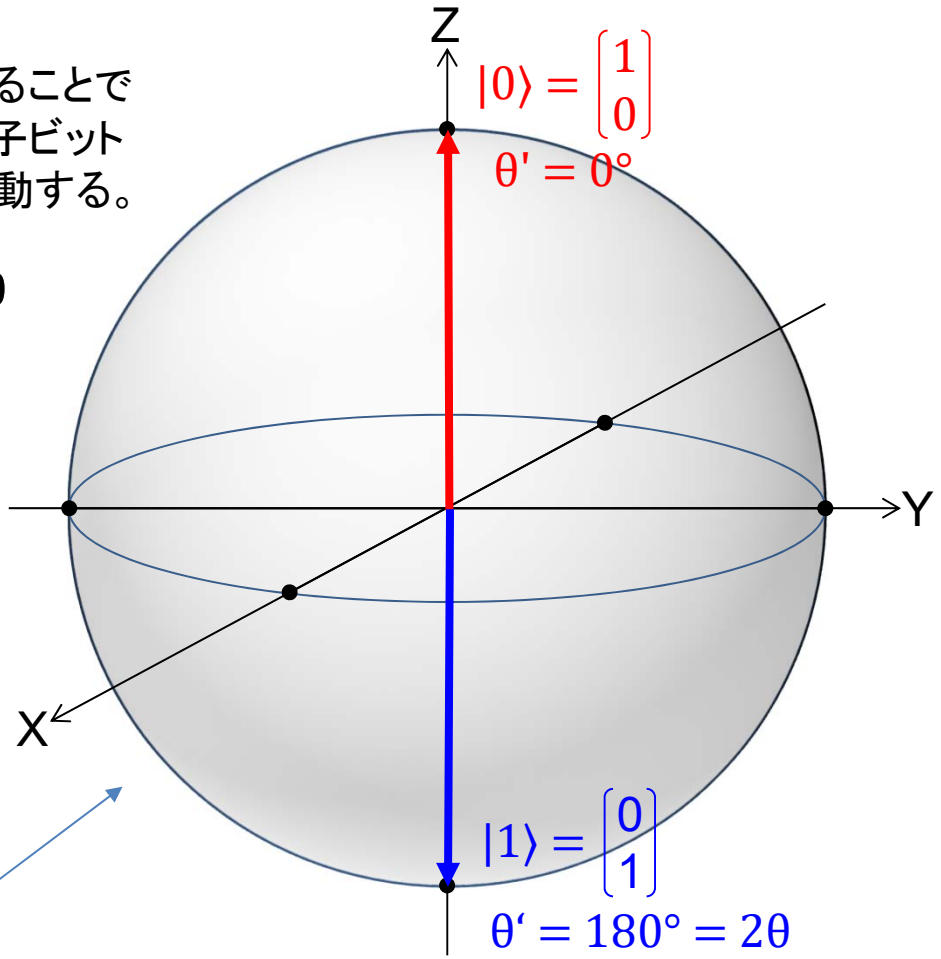
θ' = 2θ

これでは上半球の部分しか
使えない…また虚数部がある
ので4次元の空間となる。
量子状態のイメージが掴めない…

虚数部（位相）は絶対値ではなく
干渉に関する相対値とする。
なので|0⟩の位置をゼロとして、
|1⟩の虚数部（Z軸の回転θ）に
位相差を示し3次元空間にする。

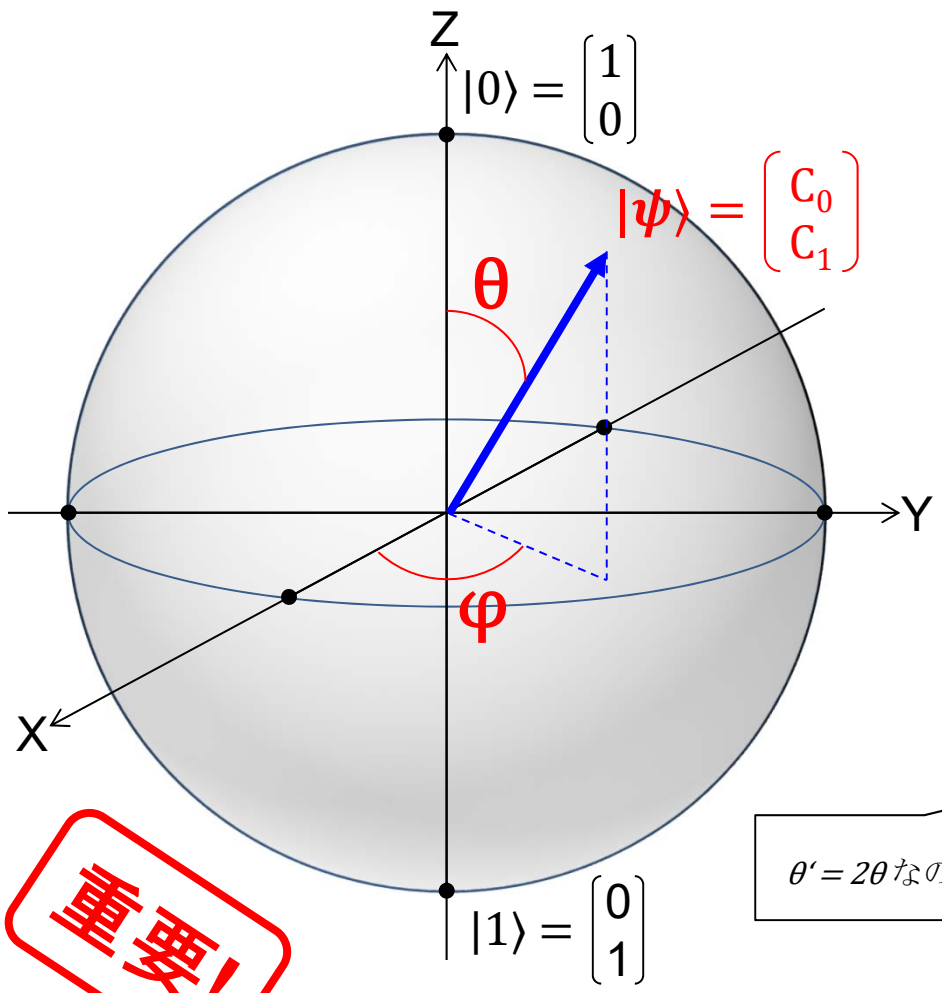
ブロッホ球

量子状態を単位球面上に表す表記法



ブロッホ球は複素ヒルベルト空間を示す。

量子ビットの存在確率と位相



重要!

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

$$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$$ 球面上の制約

$\|0\rangle$ 実数部	$z = cos\ \theta$
$\|0\rangle$ 虚数部	位相差を見るのでゼロ
$\|1\rangle$ 実数部	$x = cos\ \varphi\ sin\ \theta$
$\|1\rangle$ 虚数部	$y = sin\ \varphi\ sin\ \theta$

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \underbrace{(cos\ \varphi + i\ sin\ \varphi)}_{\text{位相差}}\ sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$

$$|\psi\rangle = \underbrace{\cos\frac{\theta}{2}}_{\text{二乗すると}}|0\rangle + \underbrace{e^{i\varphi}}_{\text{オイラーの公式}}\underbrace{sin\frac{\theta}{2}}_{\text{二乗すると}}|1\rangle$$

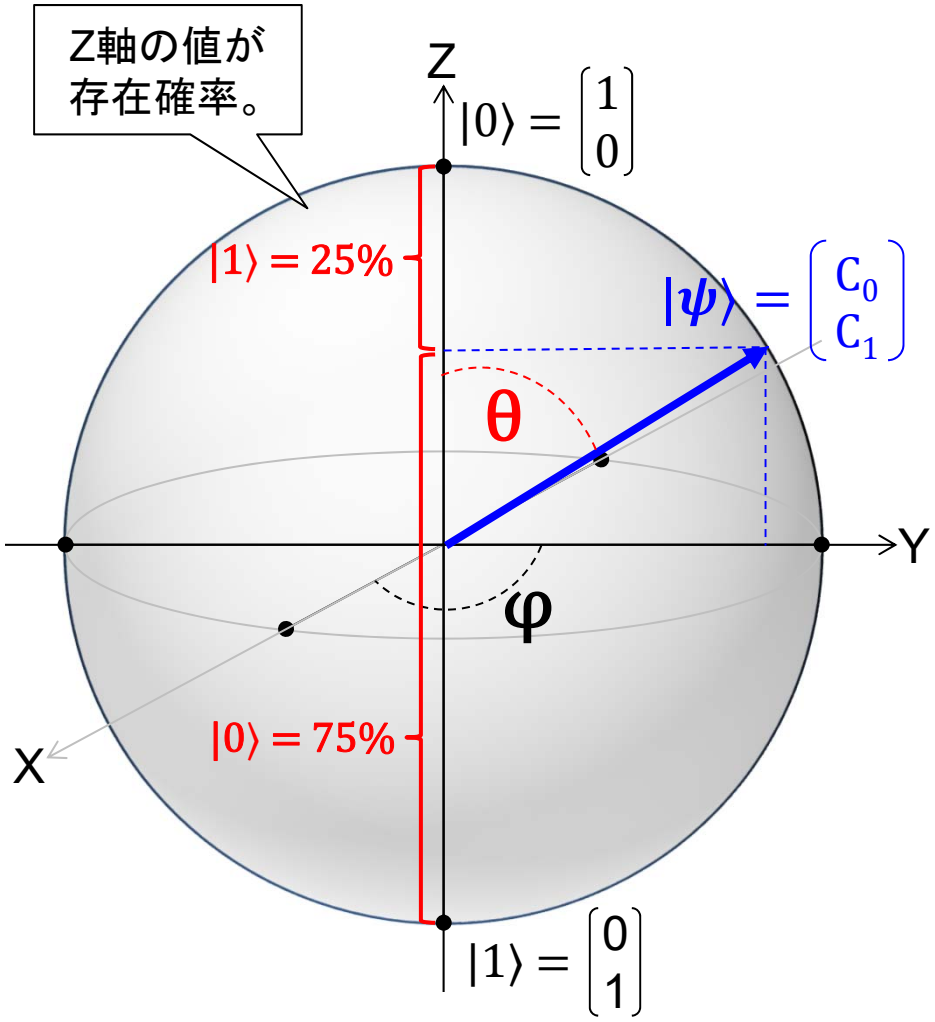
$\theta' = 2\theta$ なので $\frac{\theta}{2}$

二乗すると $|0\rangle$ の存在確立

二乗すると $|1\rangle$ の存在確立

※ θ は存在確率を、φ は位相を示す。

存在確率の計算例（角度θのみに依存）



$\theta = \pi/3 = 60°$ の場合

$$|0\rangle = |\cos(\pi/3/2)|^2$$
$$= |\cos(\pi/6)|^2$$
$$= |0.86602\ldots|^2$$
$$= 0.75 = \mathbf{75\%}$$

$$|1\rangle = |\sin(\pi/3/2)|^2$$
$$= |\sin(\pi/6)|^2$$
$$= |0.5|^2$$
$$= 0.25 = \mathbf{25\%}$$

※ 位相 $e^{i\varphi}$ は虚数部なので1つの量子ビット計算には影響しない。

量子ビットに対するユニタリ演算

ユニタリ行列による座標変換: $U|\psi\rangle = |\psi'\rangle$

id 恒等演算 iden(q) = $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 単位行列 I なので何もしない演算となる。

X ビット反転演算 x(q) = $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Y 位相ビット反転演算 y(q) = $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

Z 位相反転演算 z(q) = $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

パウリ (Pauli) ゲート

位相のみを変換する場合は位相シフトゲートとも呼ぶ。

IBMのQiskitを使う（ローカル環境）

環境：**Anaconda3**（Python3）

後述する IBM Q Experience の notebook 画面を使っても良い。

以下より環境に合わせてダウンロードとインストール

https://www.anaconda.com/distribution/

ライブラリ：**Qiskit**（キスキット）

Windows版：Anaconda Prompt

MacOS版：ターミナル

インストール

```
pip install qiskit
```

バージョン指定インストール

```
pip install qiskit=0.11.1
```

アンインストール

```
pip uninstall qiskit
```

※ Qiskitのバージョン確認：

```
In:  import qiskit
     qiskit.__qiskit_version__
Out: {'qiskit-terra': '0.9.0',
      'qiskit-ignis': '0.2.0',
      'qiskit-aqua': '0.6.0',
      'qiskit': '0.12.0',
      'qiskit-aer': '0.3.0',
      'qiskit-ibmq-provider': '0.3.2'}
```

本資料のソースは 0.12.0 と表示される環境にて確認しています。

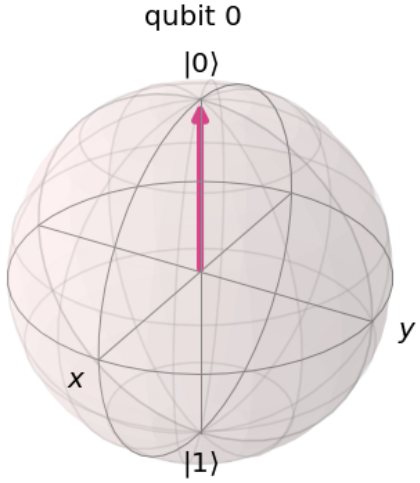
Qiskit はバージョンアップの頻度が多く、ソースがそのまま使えないケースもあるので注意が必要。

Qiskitでブロッホ球を表示する（恒等演算）

Jupiter Notebook から以下を実行(コピペで大丈夫です)。

```
from qiskit import *                              # 量子計算用
from qiskit.tools.visualization import *          # 結果表示用
backend = Aer.get_backend('statevector_simulator')  # シミュレータ指定
q = QuantumRegister(1)                            # 量子ビットを1つ用意
qc = QuantumCircuit(q)                            # 量子回路に量子ビットをセット
qc.iden(q[0])                                     # 恒等演算（初期値 |0⟩ を出力）
r = execute(qc, backend).result()                 # 回路実行して結果取得
psi = r.get_statevector(qc)                       # ステータス取得
print(psi)                                        # ステータス（ベクトル）表示
plot_bloch_multivector(psi)                       # ブロッホ球表示（※ Qiskit 0.7以降）
```

※ Qiskit 0.6 以前は plot_state(psi,"bloch") を使う。

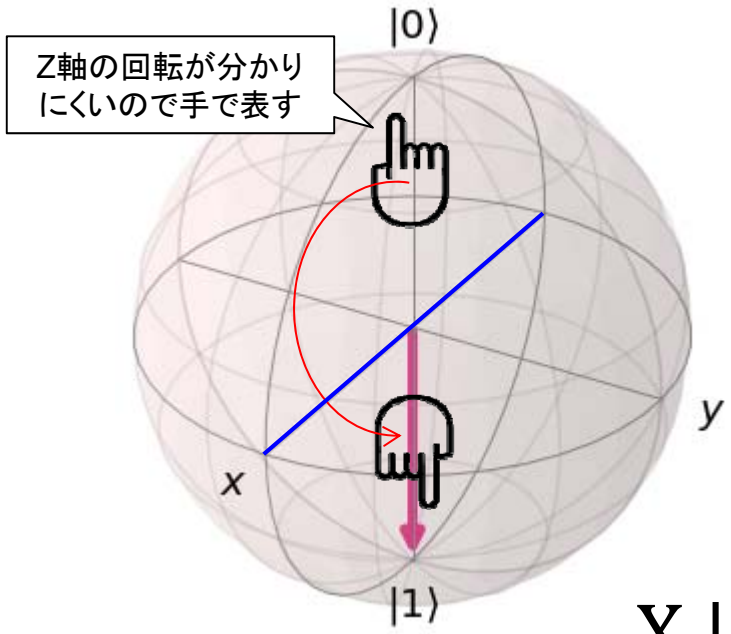


各量子ビットの初期状態は |0⟩ なので、左のように |0⟩ のブロッホ球が表示されるはず。

次ページからはプログラムの6行目の演算を変更することでユニタリ演算を確認して行く。

ビット反転演算 X ゲート

qc.x(q[0])



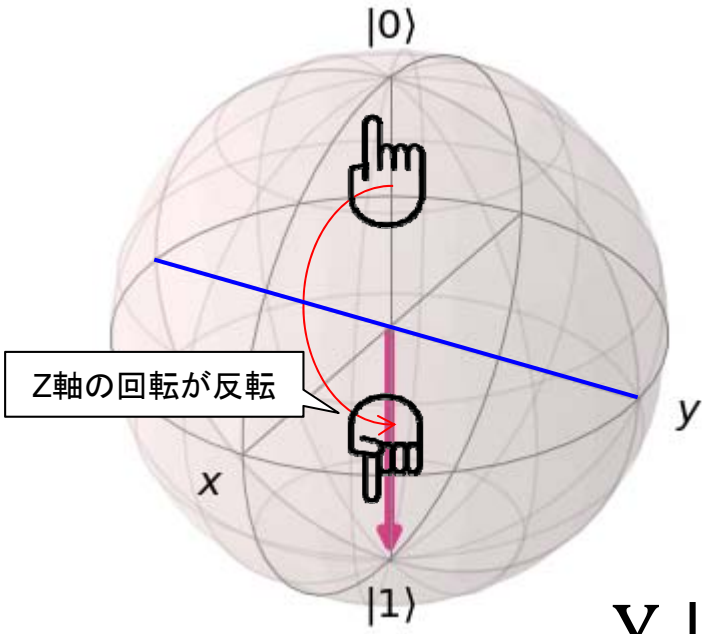
Xゲートの演算は、
ブロッホ球のX軸回りに、
180度(π)回転する。
ビットは反転するが、
位相φは変わらない。

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

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

位相ビット反転演算Yゲート

qc.y(q[0])



Yゲートの演算は、
ブロッホ球のY軸回りに、
180度(π)回転する。
ビットは反転し、
位相φも反転する。

虚数部は結果に影響しない

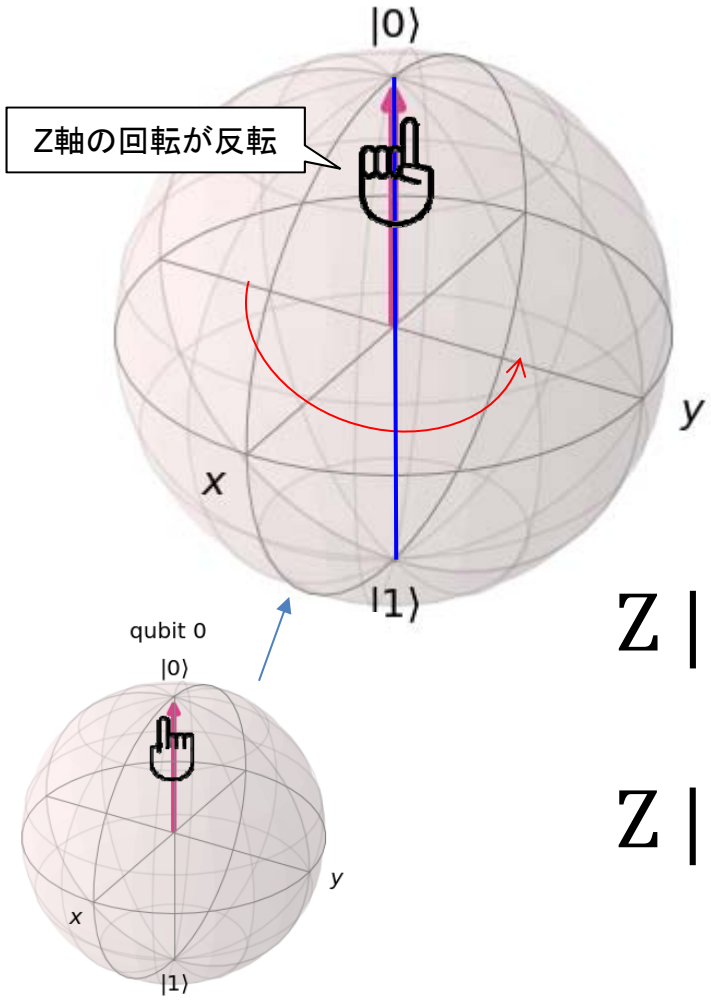
$$Y|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = i|1\rangle$$

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

マイナスが位相反転を示す

位相反転演算 Z ゲート

qc.z(q[0])



Zゲートの演算は、
ブロッホ球のZ軸回りに、
180度(π)回転する。
ビットは反転しないが、
位相φは反転する。

|0⟩の虚数部はゼロ固定

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

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

|1⟩のマイナスが位相反転を示す

アダマール H ゲート（重ね合わせ状態の生成）

アダマールによる座標変換: $H|\psi\rangle = |\psi'\rangle$

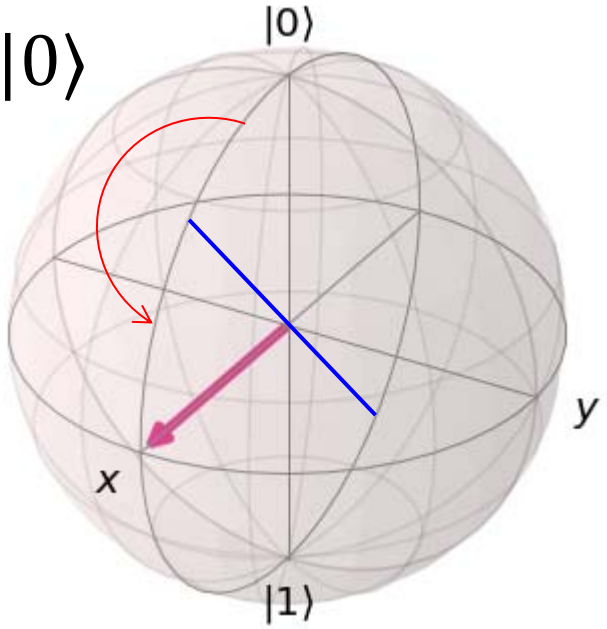
H　アダマール演算 $h(q) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$

Hadamard

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

qc.h(q[0])

$H|0\rangle$



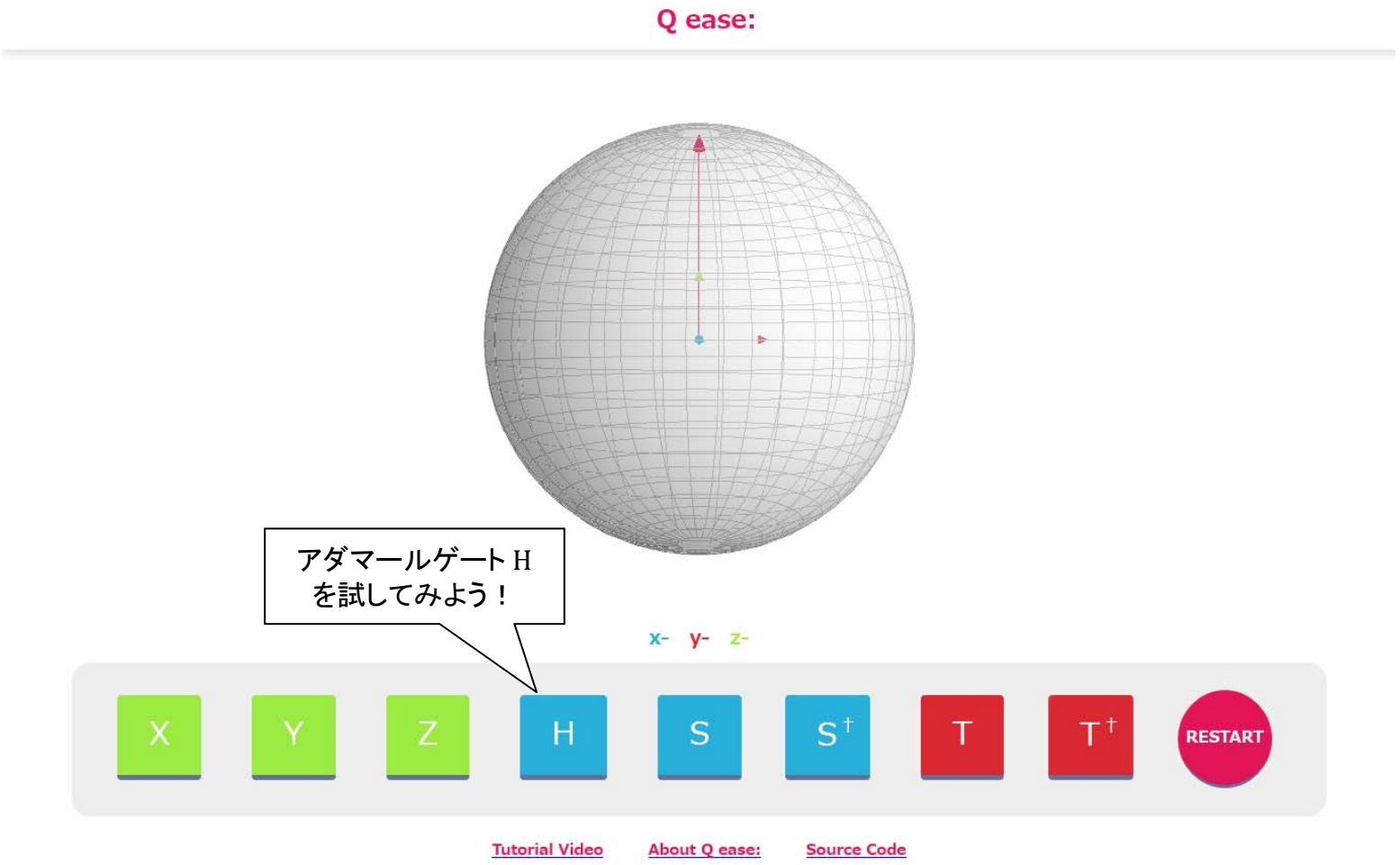
重要!

Hゲートの演算は、
ブロッホ球のXZ平面に、
45度傾いた軸回りに、
180度（π）回転する。

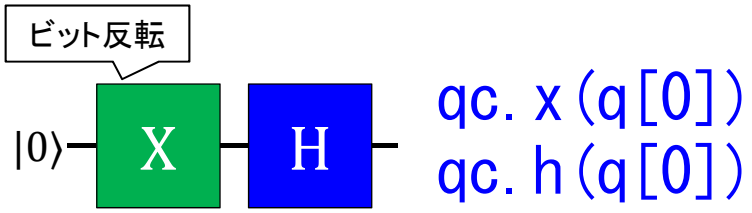
※ Y軸に90度回転する訳ではない。

Webでブロッホ球を表示する

Try Bloch!
https://qease.herokuapp.com/bloch/try/



|1⟩ へのアダマール H ゲート適用

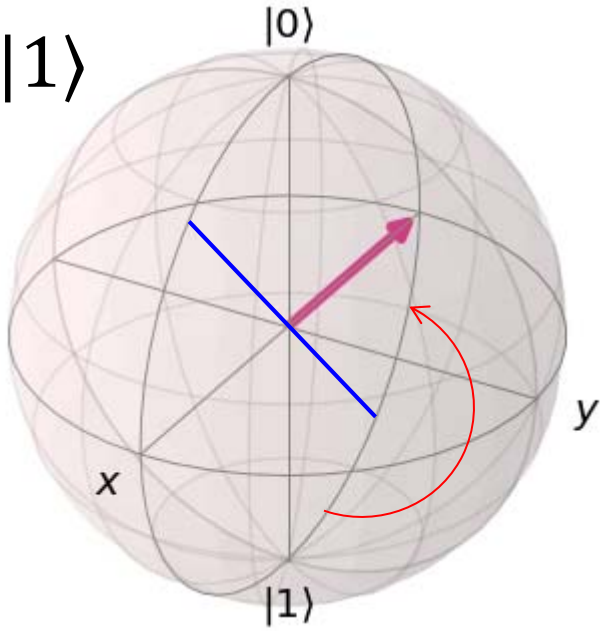



```
qc.x(q[0])
qc.h(q[0])
```

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

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

$H|1\rangle$

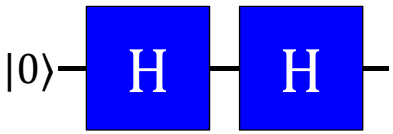


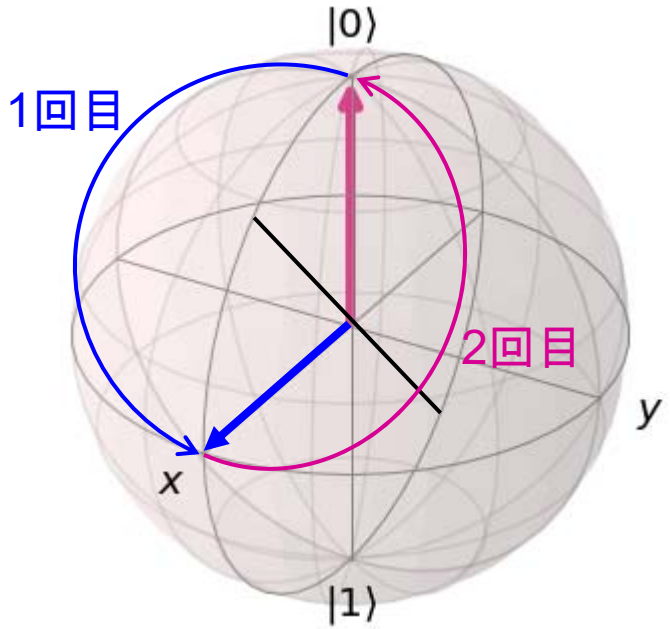
$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$$

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

$H|0\rangle$ と $H|1\rangle$ はどちらも $|0\rangle : 50\%$ と $|1\rangle : 50\%$ となり同じ確率分布になる。
ただし位相が逆になっている。

アダマール H ゲートを2回適用





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

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I \text{（単位行列）}$$

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

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

結論：2回アダマール演算を適用すると元のベクトルに戻る。

量子ゲートの組み合わせ

- アダマールゲートで挟むと変換が可能となる。

$HXH = Z$ ：ビット反転Xゲートを挟むと位相反転Zゲートに。

$HZH = X$ ：位相反転Zゲートを挟むとビット反転Xゲートに。

$HYH = -Y$ ：位相ビット反転Yゲートを挟むと位相のみ反転。

ex) HXHの計算

$$XH = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

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

位相シフト S/S†/T/T† ゲート（あまり使わない）

Z　位相反転演算 $z(q) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

反転なので逆位相も同じ

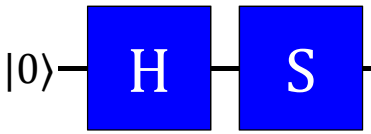
S　$\frac{\pi}{4}$ 位相シフト演算 $s(q) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$

S†　$-\frac{\pi}{4}$ 位相シフト演算 $s^{\dagger}(q) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$

T　$\frac{\pi}{8}$ 位相シフト演算 $t(q) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{(1+i)}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$

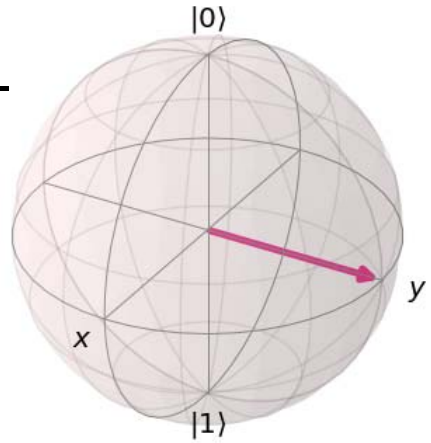
T†　$-\frac{\pi}{8}$ 位相シフト演算 $t^{\dagger}(q) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$

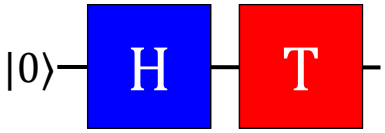
重ね合わせ状態での位相シフト



$\frac{\pi}{4}$位相シフト演算

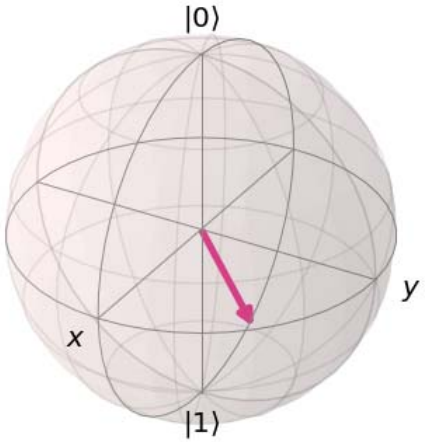
```
qc.h(q[0])
qc.s(q[0])
```



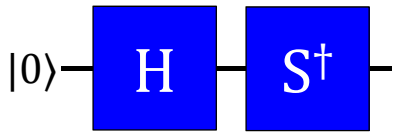


$\frac{\pi}{8}$位相シフト演算

```
qc.h(q[0])
qc.t(q[0])
```

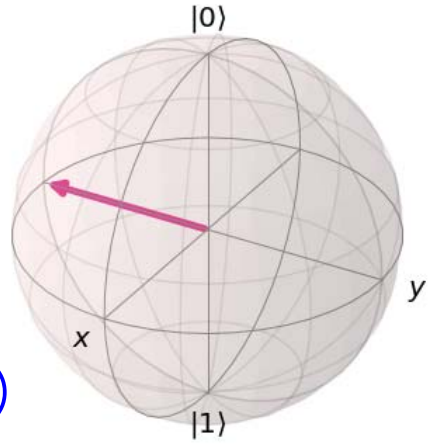


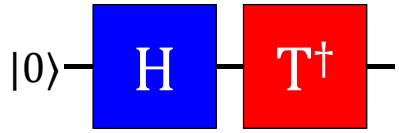
※ ダガー"†"が付くと逆方向の位相となる。



$-\frac{\pi}{4}$位相シフト演算

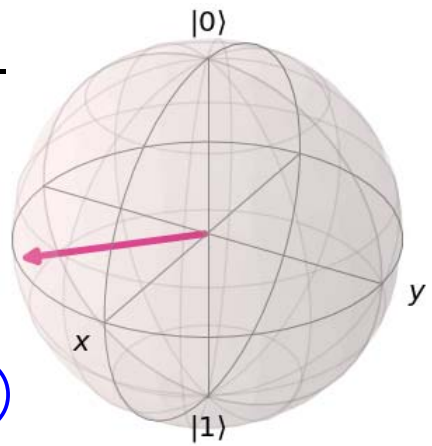
```
qc.h(q[0])
qc.sdg(q[0])
```



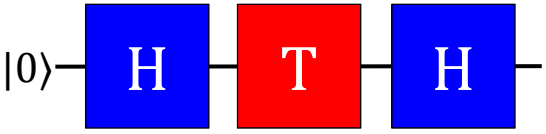


$-\frac{\pi}{8}$位相シフト演算

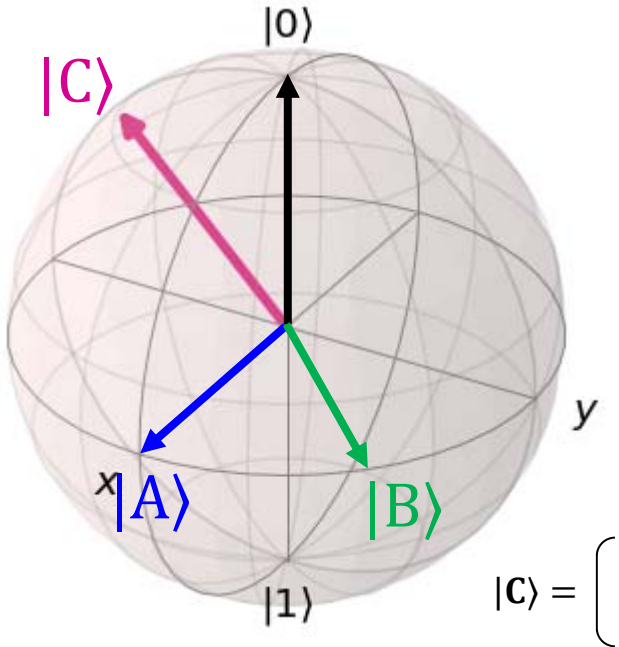
```
qc.h(q[0])
qc.tdg(q[0])
```



π/2 以外の位相シフトの意味




```
qc.h(q[0]) #|A⟩
qc.t(q[0]) #|B⟩
qc.h(q[0]) #|C⟩
```



課題:

量子演算を行う為にはブロッホ球上の任意の場所にベクトルを移動する必要がある。

解決方法:

アマダール演算と位相シフト演算を組み合わせることで任意の位置にベクトル移動することが可能となる。ただしπ/8のシフト演算だけだと取れる方向はある程度限定されてしまうが現在の量子計算では十分な精度らしい。

$$|\mathbf{C}\rangle = \begin{pmatrix} 0.85355339+0.35355339\mathrm{j} \\ 0.14644661-0.35355339\mathrm{j} \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} |c_0|^2 &= 0.85355339 \\ |c_1|^2 &= 0.14644661 \end{aligned}$$

軸回転 Rx/Ry/Rz ゲート

実際の量子プログラミングでは、任意角度での軸回転（シフト）ゲートが必要になる。

Rx X軸回転演算 $Rx(\theta, q) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$

Ry Y軸回転演算 $Ry(\theta, q) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$

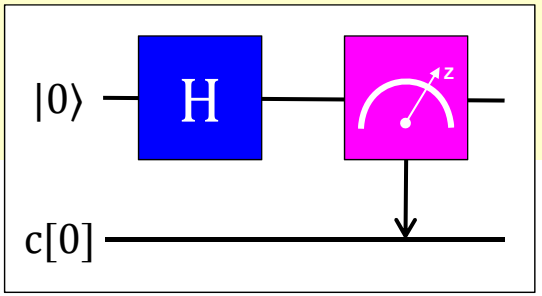
Rz Z軸回転演算 $Rz(\theta, q) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}$

測定（量子ビットを収束させて古典ビットとして取り出す）

標準基底測定 measure(q, c)

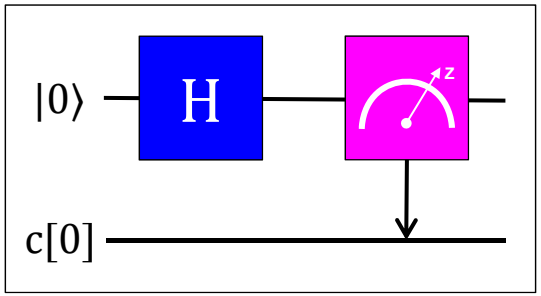
Jupiter Notebook から以下を実行(コピペで大丈夫です)。

```
from qiskit import *                              # 量子計算用
from qiskit.tools.visualization import *          # 結果表示用
backend = Aer.get_backend('qasm_simulator')  # 量子シミュレータ指定
q = QuantumRegister(1)          # 量子ビットを1つ用意
c = ClassicalRegister(1)        # 古典ビットを1つ用意
qc = QuantumCircuit(q, c)       # 量子回路に量子ビットと古典ビットをセット
qc.h(q[0])                      # 量子重ね合わせ（アダマール演算）
qc.measure(q[0], c[0])          # 量子ビットq[0]を観測し古典ビットc[0]へ
r = execute(qc, backend, shots=1000).result() # 回路を1000回実行する
rc = r.get_counts()             # 結果取得
print(rc)                       # 結果表示
plot_histogram(rc)              # ヒストグラム表示
```



測定結果の例1：Hゲート（アダマール演算）

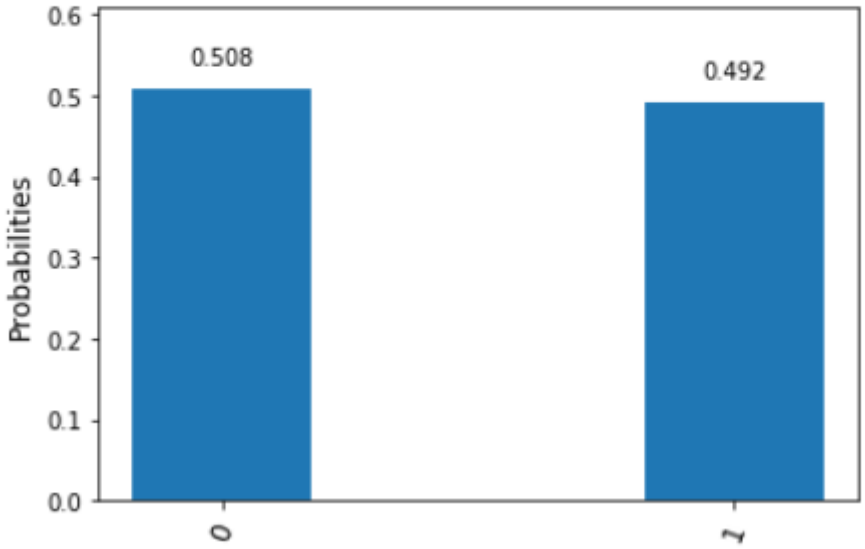
```
qc.h(q[0])
qc.measure(q[0],c[0])
```

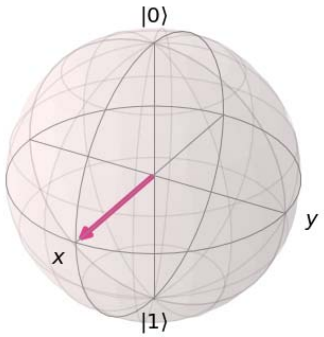



```
print(rc)                    # 結果表示
plot_histogram(rc)           # ヒストグラム表示
```

{'0': 508, '1': 492}

'0' : 500, '1': 500 となるはずだが…NISQシミュレータなのでノイズを考慮している。

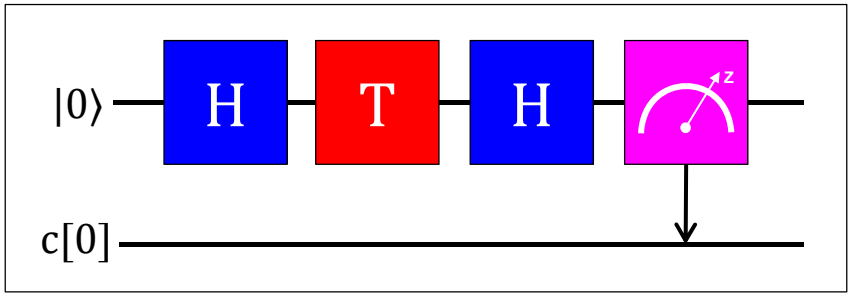




参考：ブロッホ球表示

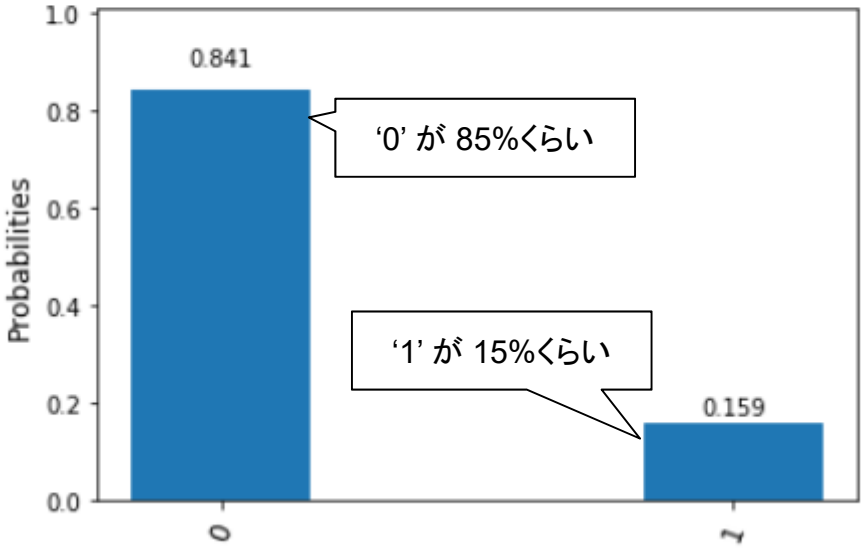
測定結果の例2：Hゲートと Tゲート

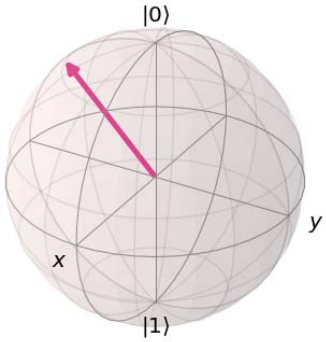
```
qc.h(q[0])
qc.t(q[0])
qc.h(q[0])
qc.measure(q[0],c[0])
```




```
print(rc)                    # 結果表示
plot_histogram(rc)           # ヒストグラム表示
```

```
{'0': 841, '1': 159}
```





参考：ブロッホ球表示

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 0.85355339+0.35355339\mathrm{j} \\ 0.14644661-0.35355339\mathrm{j} \end{pmatrix}$$

$$|c_0|^2 = (0.85355339)^2+(+0.35355339)^2 = 0.85355339 \ [85.36\%]$$

$$|c_1|^2 = (0.14644661)^2+(-0.35355339)^2 = 0.14644661 \ [14.64\%]$$

1-4：IBM Q と Qiskit

https://www.research.ibm.com/ibm-q/

Qiskitのバックエンド

- 'statevector_simulator'
  - 重ね合わせ状態のまま値を取得できるローカル量子シミュレータ。
  - ノイズ無しの理論値（確率振幅）を取得できる。
  - ブロッホ球（重ね合わせ状態）の表示時に使う。
- 'qasm_simulator'
  - ノイズありのローカル量子シミュレータ。
  - 通常の量子計算に使う標準のシミュレータ。

IBM Q Experience のクラウドサービス

- 'ibmq_qasm_simulator'
  - IBM Q の量子シミュレータ（アカウントが必要）。
- 'ibmq_ourense' / 'ibmqx4' / 'ibmqx2'
  - IBM Q の5量子ビット実機（アカウント・トークンが必要）。
- 'ibmq_16_melbourne'
  - IBM Q の16量子ビット実機（アカウント・トークンが必要）。

クラウド量子計算：IBM Q Experience

IBM Q を使う為のクラウドサービス

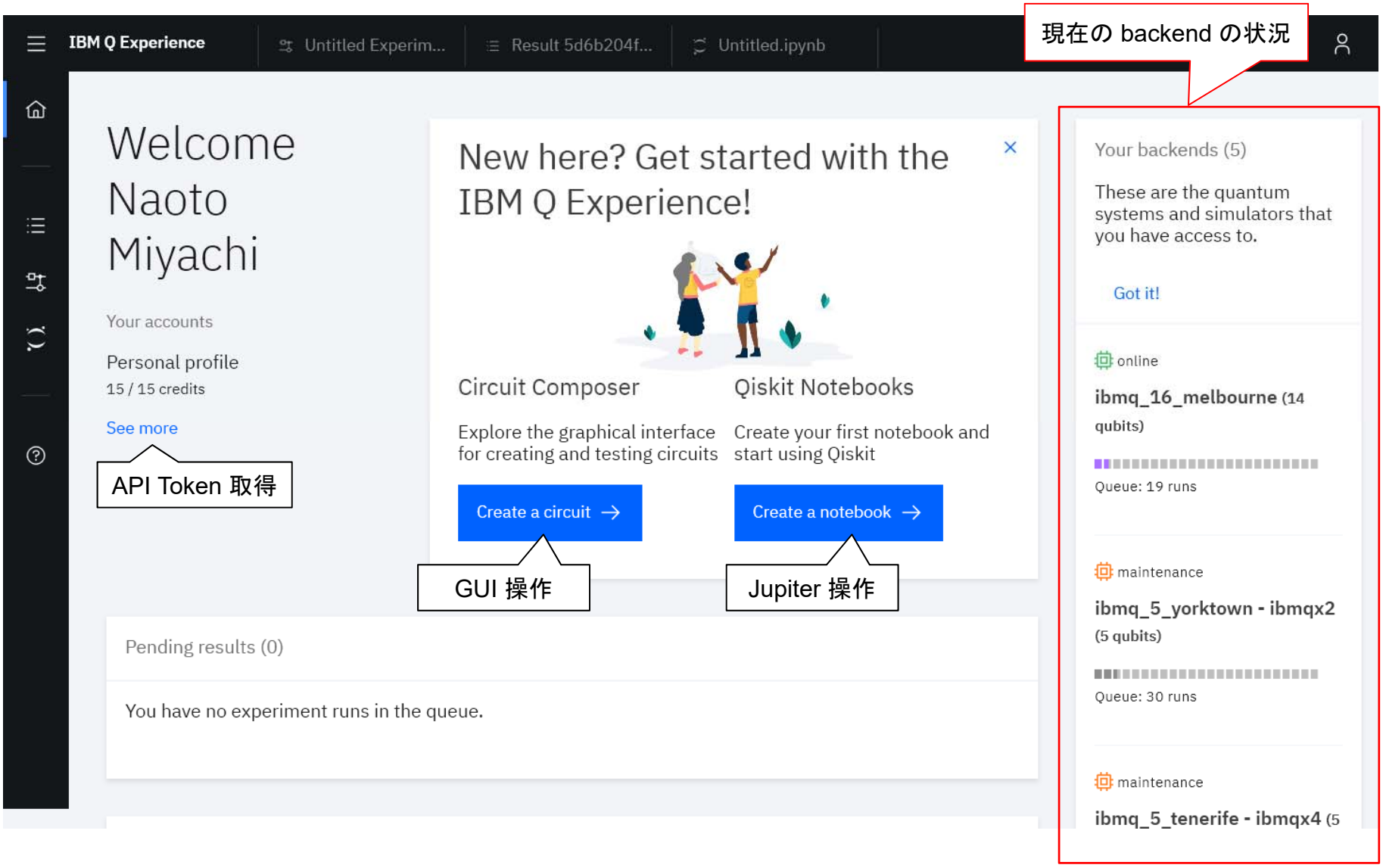
https://www.research.ibm.com/ibm-q/technology/experience/

サインインの為には登録（無料）が必要。
Linkedin/GitHub/Google/Twitterアカウントも利用可能

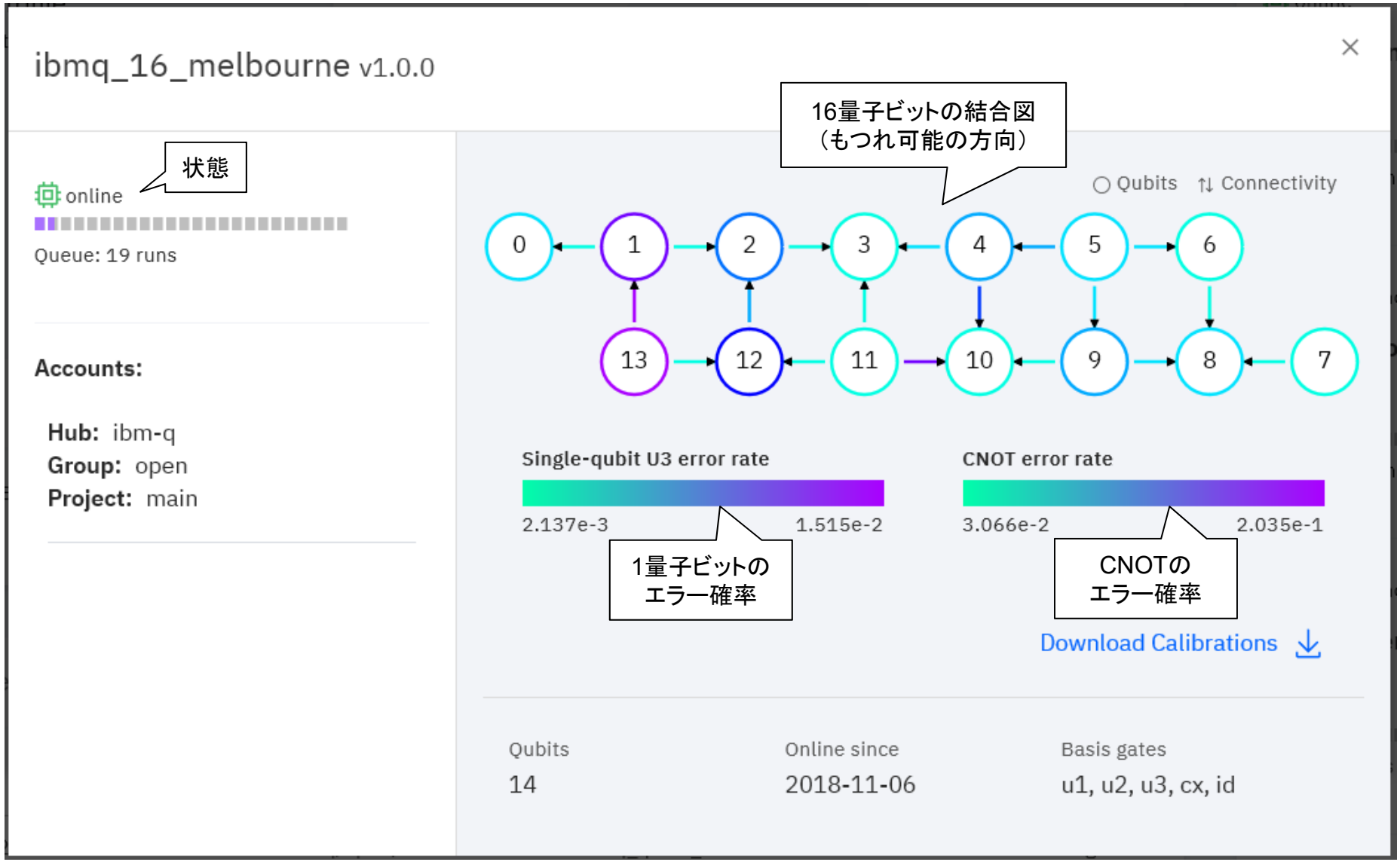
機能：

1. GUIを使って簡単な量子回路の編集が可能。
   - 実行時に以下の選択が可能：
     - A) 実機を使わない量子シミュレーション（Qiskitと同じ）
     - B) 5/16量子ビットの実機を使った量子計算（バッチ実行）
     - C) 過去に同じ量子回路の実機を使った結果の利用
2. Qiskitを使った実行（Jupiter環境）※ 新機能

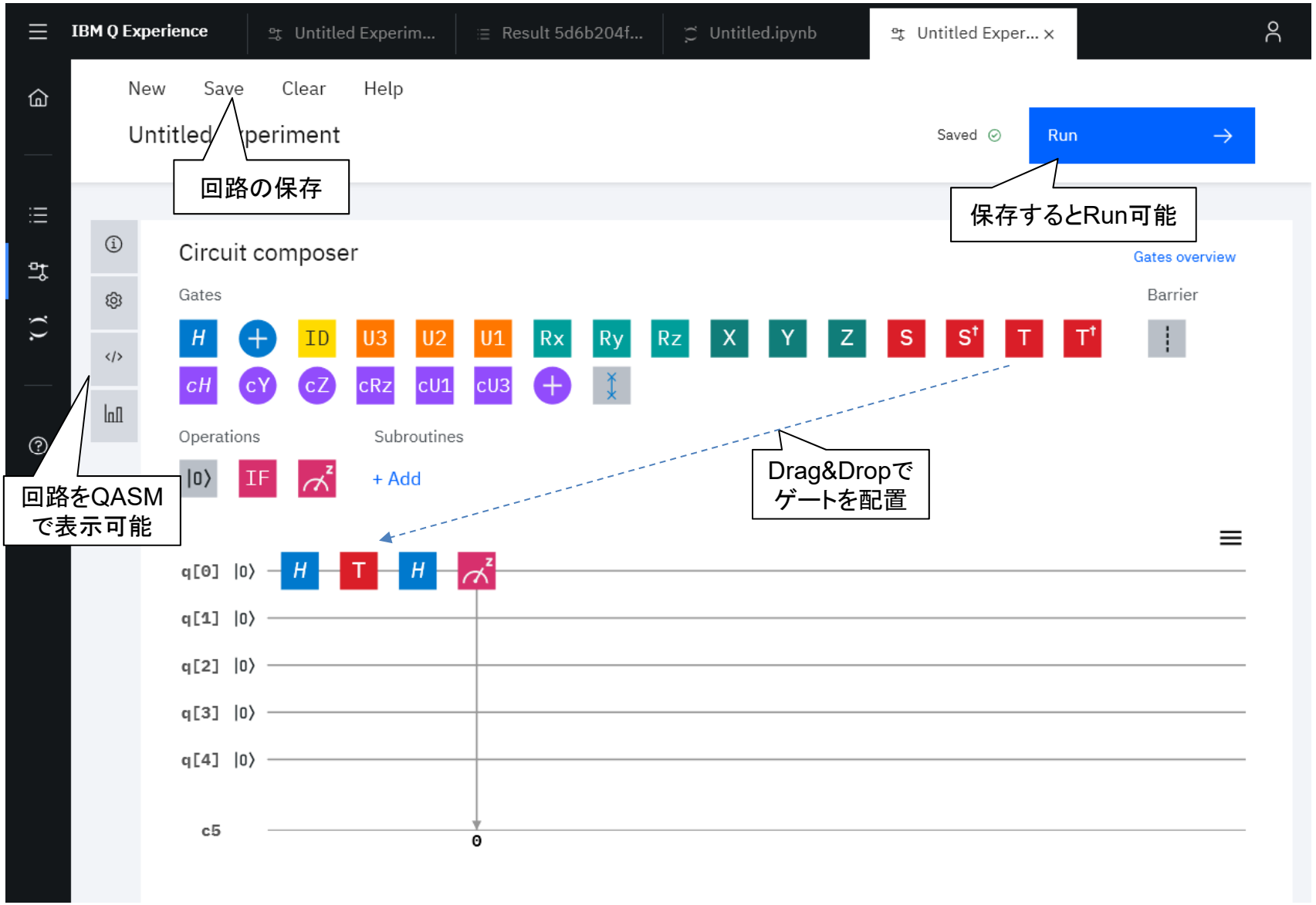
IBM Q Experience の Dashboard



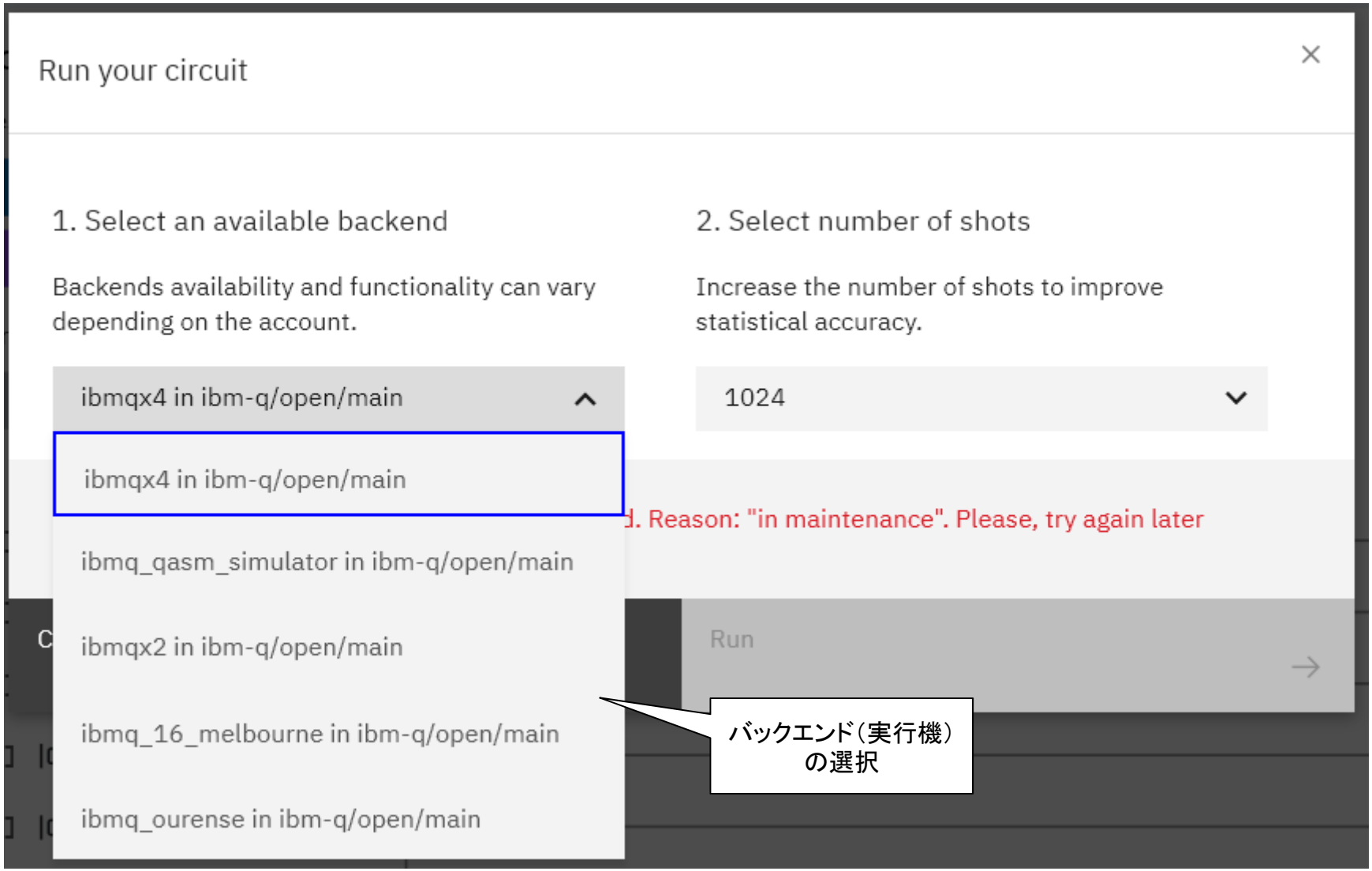
IBM Q 公開中16量子ビットシステム



IBM Q Experience の GUI 編集



IBM Q Experience 実行



IBM Q Experience 実行

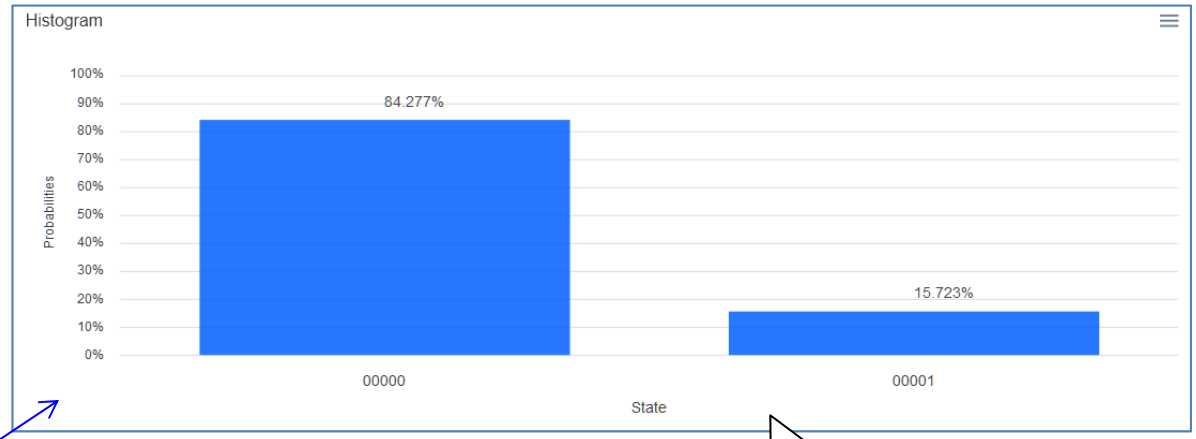
Pending results (1)

結果待ち

ibmq_16_melbourne

1024 shots

4 minutes ago



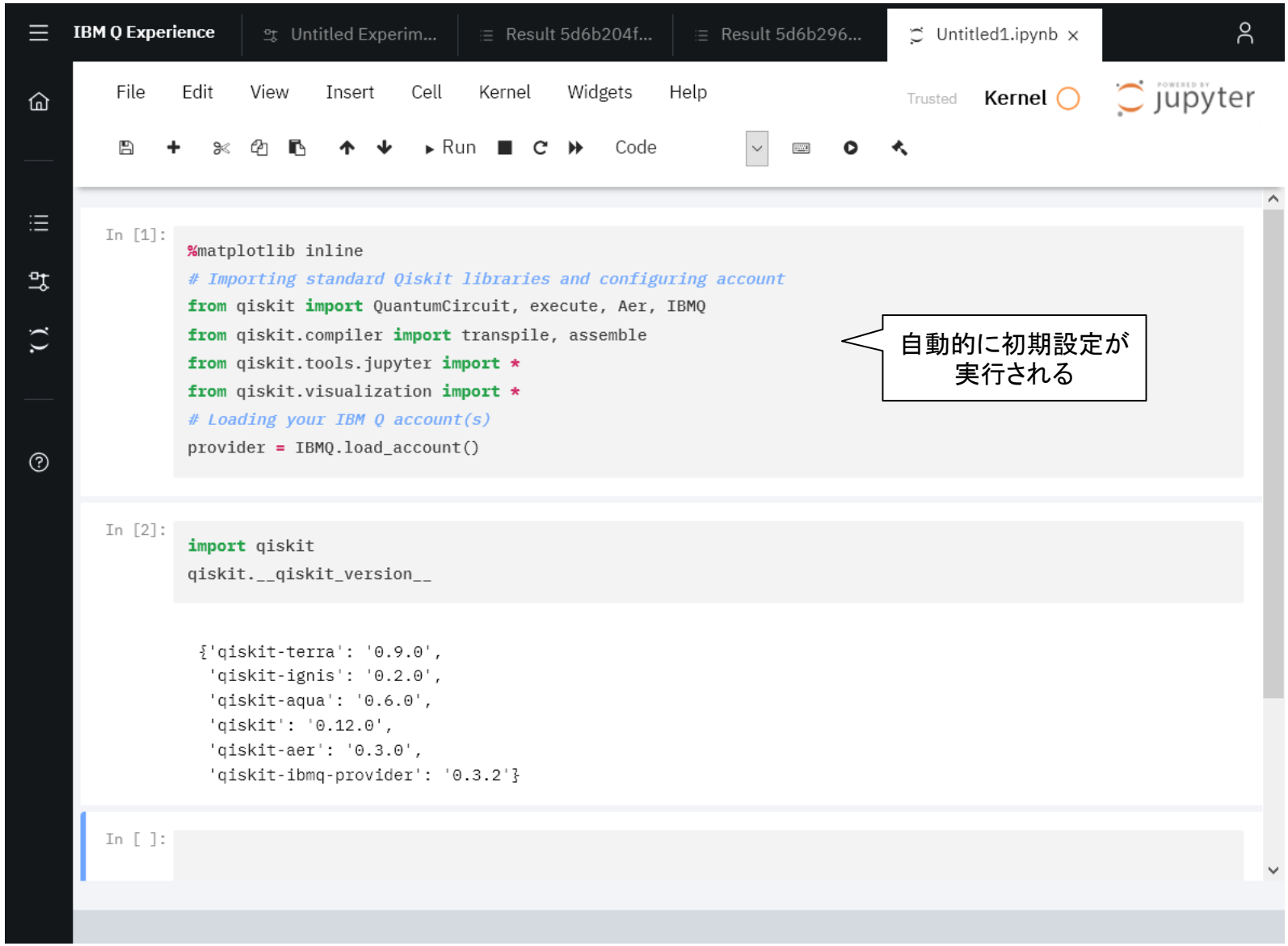
実行結果

Results (1)

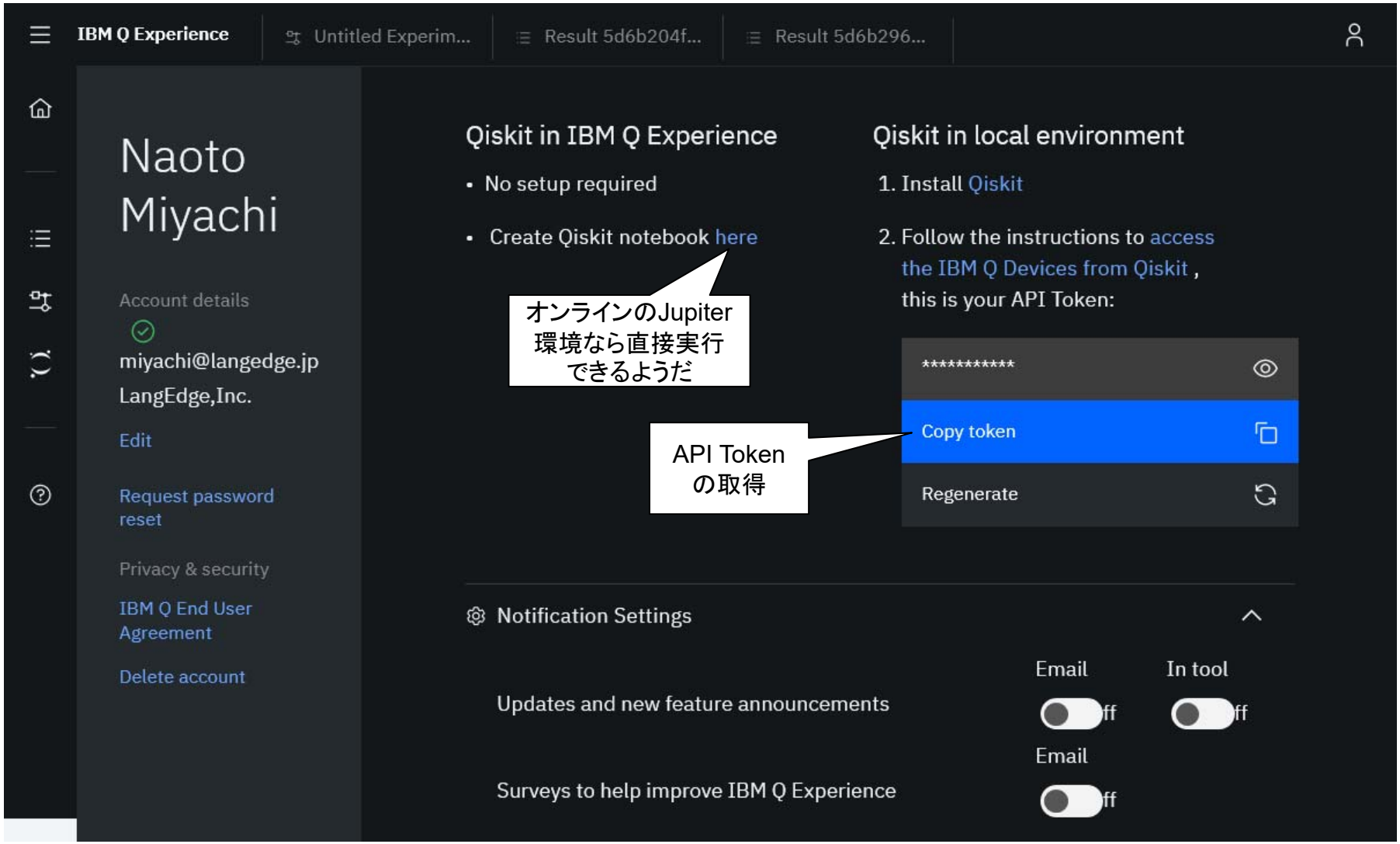
- ibmq_qasm_simulator - 1024 shots - a minute ago. Status: COMPLETED

完了済み

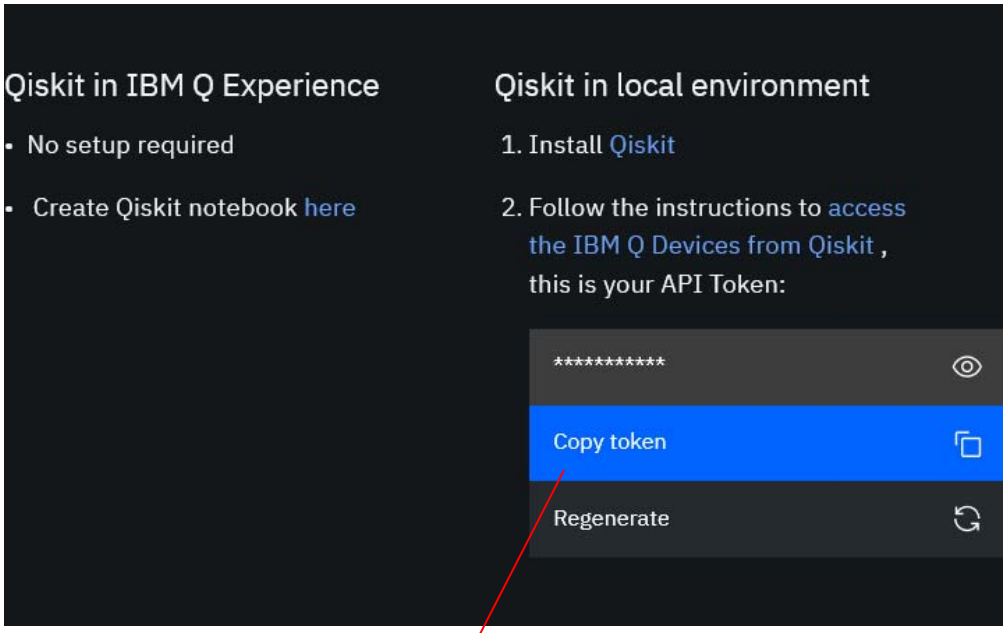
IBM Q Experience の notebook 画面



IBM Q Experience の API Token 取得



Local Qiskit で IBM Q 実機を使う(準備)



登録: 1回のみ	from qiskit import IBMQ IBMQ.save_account('MY_API_TOKEN')
読み込み: セッション毎	from qiskit import IBMQ prov = IBMQ.load_account()
指定:	from qiskit import IBMQ backend = prov.get_backend('ibmqx4')
バージョン:	import qiskit qiskit.__version__

.qiskit

```
[ibmq]
token = MY_API_TOKEN
url = https://quantumexperience.ng.bluemix.net/api
verify = True
```

ここまでが前準備。
OKなら次ページのプログラム実行。

Qiskit で IBM Q 実機を使う(実行)

```
from qiskit import *                                  # 量子計算用
from qiskit import IBMQ                               # 実機利用用
print("Start: Load accounts")
prov = IBMQ.load_account()                                  # 実機用にアカウントロード
backend = prov.get_backend('ibmq_ourense')                  # 実機指定：IBM Q 5 qubit
#backend = prov.get_backend('ibmq_qasm_simulator')          # 量子シミュレータ指定
q = QuantumRegister(1)          # 量子ビットを1つ用意
c = ClassicalRegister(1)        # 古典ビットを1つ用意
qc = QuantumCircuit(q, c)       # 量子回路に量子ビットと古典ビットをセット
qc.h(q[0])                      # 量子重ね合わせ（アダマール演算）
qc.measure(q[0], c[0])          # 量子ビットq[0]を観測し古典ビットc[0]へ
print("Run: Start")
r = execute(qc, backend, shots=100).result() # 回路を100回実行する
print("Run: End:")
rc = r.get_counts()             # 結果取得
print(rc)                       # 結果表示
```

この部分は実機でもシミュレータでも同じ。

```
Start: Load accounts
Run: Start
Run: End:
{'1': 48, '0': 52}
```

Run: Start 後に数分～10数分かかる場合があります(キュー実行の為)

IBM Q 実機での実行結果！

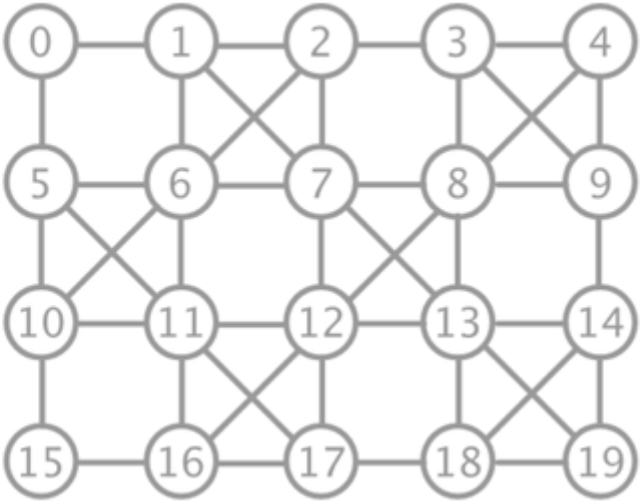
※ 実行状況は自分の Dashboard で確認できます。

IBM Q の 20量子ビット機

IBM Q 20 Tokyo

20

qubits



20量子ビットの結合図
やはり接続に制限があるが
5量子ビットより複雑だ
（現在は結合図未公開？）

※ IBM Q Network で利用可能

Availability & status

For IBM Q clients

● Online

Last calibration occured

2019-03-24 8:14:51 pm

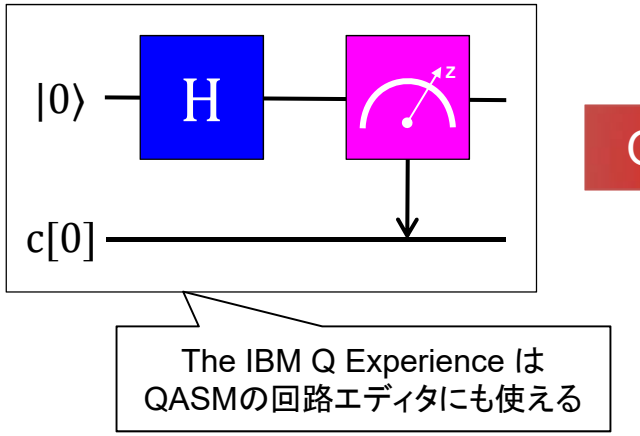
Average measurements

Frequency (GHz)	4.97
T1 (μs)	81.75
T2 (μs)	51.07
Gate error (10^{-3})	1.88
Readout error (10^{-2})	7.44

https://www.research.ibm.com/ibm-q/technology/devices/

参考：QASM（OpenQASM 2.0）

IBMが公開している量子回路アセンブラ言語。
Cirq（Google）、Q#（MS）、Blueqat（MDR）等のほぼ全ての量子プラットホームがサポートしているので相互運用ができる。
Visual Studio Code用の拡張も公開されている。
https://marketplace.visualstudio.com/items?itemName=qiskit.qiskit-vscode



QASM

```
include "qelib1.inc";
qreg q[1];
creg c[1];
h q[0];
measure q[0] -> c[0];
```

Part 2：量子ゲート型のプログラミング

複数の量子ビットを使った量子アルゴリズムを
使った量子ゲート型プログラミングを説明します。

GoogleのCirqを使う

環境：**Anaconda3**（**Python3**）

以下より環境に合わせてダウンロードとインストール

https://www.anaconda.com/distribution/

ライブラリ：**Cirq**（シルク）

Windows版：Anaconda Prompt

MacOS版：ターミナル

インストール

```
pip install cirq
```

バージョン指定インストール

```
pip install cirq=0.5.0
```

アンインストール

```
pip uninstall cirq
```

※ Cirqのバージョン確認：

In:	import cirq cirq.__version__
Out:	'0.5.0‘

本資料のソースは 0.5.0 と表示される環境にて確認しています。

Cirq アダマール演算（量子 Hello World!）

Jupiter Notebook から以下を実行(コピペで大丈夫です)。

```
import cirq                                    # cirq量子計算用
Q = cirq.LineQubit(0)                          # 量子ビットを1つ準備
qc = cirq.Circuit.from_ops(                    # 量子回路生成
  cirq.H(Q),                                   # 量子重ね合わせ（アダマール演算）
  cirq.measure(Q, key='m')                     # 量子ビットQを観測しkey名'm'へ.
)
print("Circuit:")
print(qc)                                      # 量子回路表示
qsim = cirq.Simulator()                        # 量子シミュレータ
result = qsim.run(qc, repetitions=1000)        # 回路を1000回実行する
print("Results:")
result.histogram(key='m')                      # key名'm'のヒストグラム表示
```

実行結果。

```
Circuit:
(0, 0): ———H———M('m')———
Results:
Counter({0: 494, 1: 506})
```

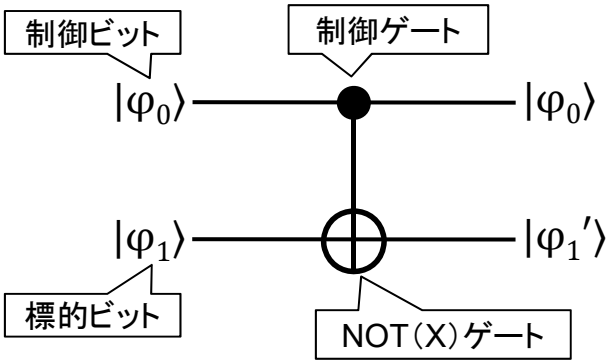
2-1：複数量子ビット操作

Part1 では1量子ビット操作の話をしました。
（ここまでは大丈夫ですか？）

Part2 は量子ゲート型の複数の量子ビット操作から説明して行きます。

制御反転 CNOT（CX）ゲート

重要!



CNOTゲートの演算は、制御（Controlled）ビットが $|1\rangle$ の時のみ標的（Targeted）ビットが反転する。

制御反転演算 CNOT(q0, q1) ＝ $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

CXとしても良い

$\|\varphi_0\rangle$	$\|\varphi_1\rangle$	$\|\varphi_0\rangle$	$\|\varphi_1'\rangle$
$\|0\rangle$	$\|0\rangle$	$\|0\rangle$	$\|0\rangle$
$\|0\rangle$	$\|1\rangle$	$\|0\rangle$	$\|1\rangle$
$\|1\rangle$	$\|0\rangle$	$\|1\rangle$	$\|1\rangle$
$\|1\rangle$	$\|1\rangle$	$\|1\rangle$	$\|0\rangle$

テンソル積

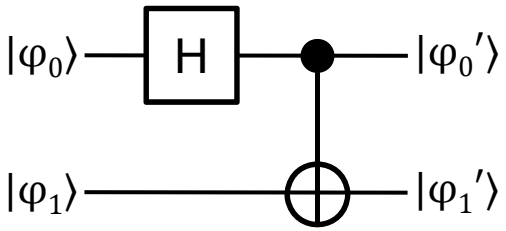
CNOT $|00\rangle = |00\rangle$
CNOT $|01\rangle = |01\rangle$
CNOT $|10\rangle = |11\rangle$
CNOT $|11\rangle = |10\rangle$
（反転）

出力 $|\varphi_1'\rangle$ だけ見ると XOR ゲートと言える

ベル状態（量子もつれ）

重要!

ベル状態とは、2つの量子ビット間に量子もつれを生じている状態であり、1つを観測するともう片方の値が決まる。
量子回路としてはアダマールとCNOTを使って実現可能。



ベル状態（量子もつれ）回路

$$|\varphi_0\varphi_1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|\varphi_0'\varphi_1'\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

入力：$|\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$, $|\varphi_1\rangle = |0\rangle$

出力：$|\varphi_0'\varphi_1'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \boxed{0|01\rangle + 0|10\rangle} + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$

$= 0\%$

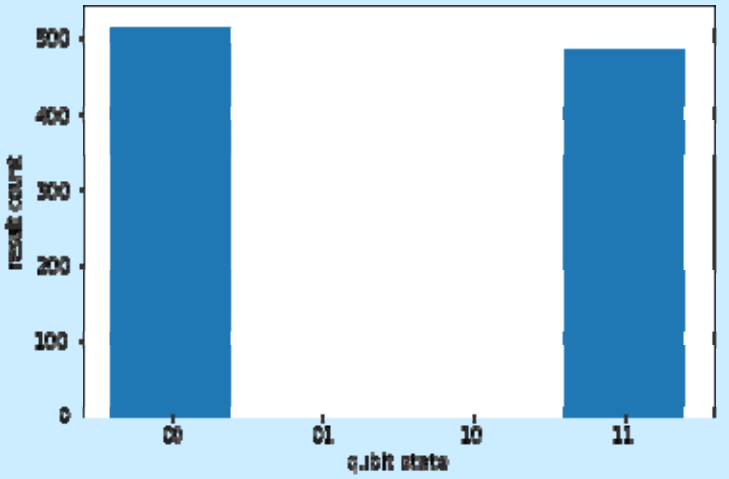
※ $|\varphi_0\rangle$が$|0\rangle$で観測されると$|\varphi_1'\rangle$も$|0\rangle$に、$|\varphi_0\rangle$が$|1\rangle$で観測されると$|\varphi_1'\rangle$も$|1\rangle$となる。

ベル状態回路の実行

```
import cirq
Q = [cirq.LineQubit(i) for i in range(2)]
qc = cirq.Circuit.from_ops(
  cirq.H(Q[0]),
  cirq.CNOT(Q[0],Q[1]),
  cirq.measure(Q[0], key='q0'),
  cirq.measure(Q[1], key='q1')
)
print("Circuit:")
print(qc)
qsim = cirq.Simulator()
result = qsim.run(qc, repetitions=1000)
print("Result:")
cirq.plot_state_histogram(result)
```

```
Circuit:
0: ──────H──────@──────M('q0')──────
                │
1: ─────────────X──────M('q1')──────
```

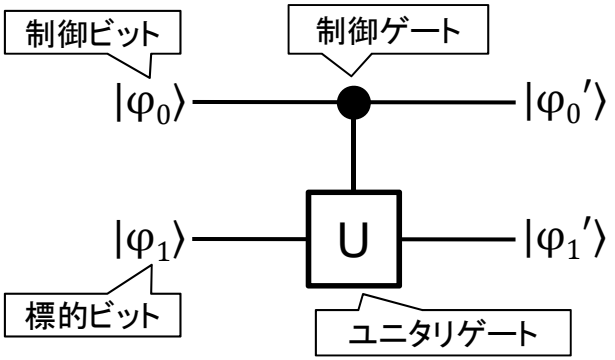
実行結果



array([516., 0., 0., 484.])

q0が0ならq1も0に、
q0が1ならq1も1になる。
01と10にはならない。
ベル状態（量子もつれ）
を確認できる。

制御ユニタリ CU ゲート



CX(CNOT)ゲートは標的ビット側をXゲートにしたが、YやZ,H,S等の任意ユニタリ演算も指定できる。

$$CU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_{00} & u_{01} \\ 0 & 0 & u_{10} & u_{11} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = Y \qquad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = Z$$

ここに任意のユニタリ演算行列を入れる

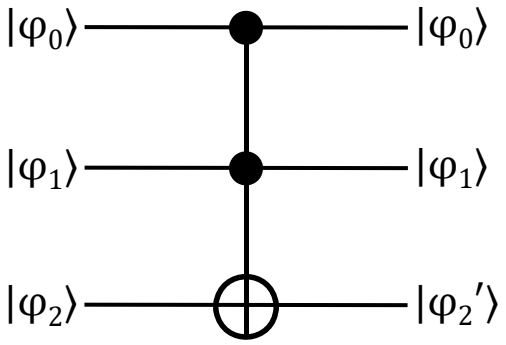
例）Zゲートの CZ(q0, q1) ベル演算結果：$\frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle$

```
cirq.H(Q0) / cirq.CZ(Q0,Q1)
Circuit:
0: ———H———@———
          |
1: ———————@———
```

CZゲートは上下を入れ替えても同じ。
回路ではどちらも“@”で表現される。

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

トフォリ CCNOT ゲート



CCNOT (Toffoli)

```
cirq.CCNOT(Q0, Q1, Q2)
Circuit:
0: ──────@──────
         |
1: ──────@──────
         |
2: ──────X──────
```

制御反転ゲートに対しもう1つ制御ビットを追加したCCNOTゲート。

トフォリ演算 CCNOT (q0, q1, q2) =

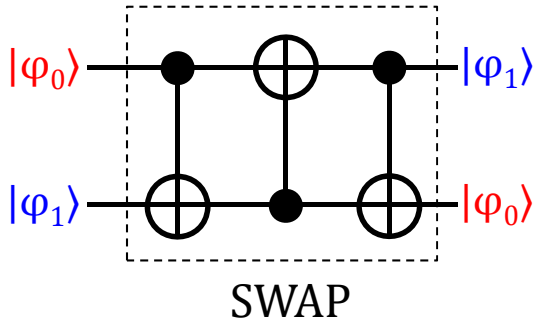
$$\begin{pmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&1&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&1&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&1&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&1 \\ 0&0&0&0&0&0&1&0 \end{pmatrix}$$

CSWAP $|000\rangle = |000\rangle$　CSWAP $|100\rangle = |100\rangle$
CSWAP $|001\rangle = |001\rangle$　CSWAP $|101\rangle = |101\rangle$
CSWAP $|010\rangle = |010\rangle$　CSWAP $|110\rangle = |111\rangle$
CSWAP $|011\rangle = |011\rangle$　CSWAP $|111\rangle = |110\rangle$

反転

※トフォリゲートはAND/OR/NOT等が実現可能な万能ゲートである。

交換 SWAP ゲート



=

```
cirq.SWAP(Q0, Q1)
Circuit:
0: ———×———
      |
1: ———×———
```

Xでは無い

CNOTゲートを3つ
交互に重ねると
量子ビットの値を
交換できる。

交換演算 $SWAP(q0, q1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

$SWAP\ |00\rangle = |00\rangle$
$SWAP\ |01\rangle = |10\rangle$
$SWAP\ |10\rangle = |01\rangle$
（反転）
$SWAP\ |11\rangle = |11\rangle$

計算過程：

$|\varphi_0\rangle\ |\varphi_1\rangle \rightarrow$

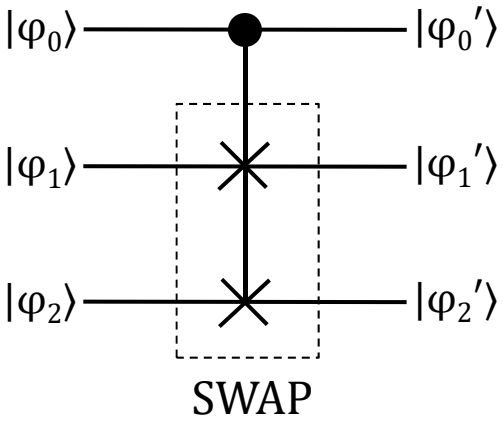
⊕ は XOR

$(CNOT_{01}) \rightarrow |\varphi_0\rangle\ |\varphi_1 \oplus \varphi_0\rangle$

$(CNOT_{10}) \rightarrow |\varphi_0 \oplus (\varphi_1 \oplus \varphi_0)\rangle\ |\varphi_1 \oplus \varphi_0\rangle = |\varphi_1\rangle\ |\varphi_1 \oplus \varphi_0\rangle \rightarrow$

$(CNOT_{01}) \rightarrow |\varphi_1\rangle\ |(\varphi_1 \oplus \varphi_0) \oplus \varphi_1\rangle = |\varphi_1\rangle\ |\varphi_0\rangle$

制御交換 CSWAP ゲート




```
cirq.CSWAP(Q0, Q1, Q2)
Circuit:
0: ———@———
      |
1: ———×———
      |
2: ———×———
```

交換ゲートに対し
制御ビットを追加
したCSWAPゲート。

制御交換演算 CSWAP(q0, q1, q2) =

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

CSWAP $|000\rangle = |000\rangle$　CSWAP $|100\rangle = |100\rangle$
CSWAP $|001\rangle = |001\rangle$　CSWAP $|101\rangle = |110\rangle$
CSWAP $|010\rangle = |010\rangle$　CSWAP $|110\rangle = |101\rangle$
CSWAP $|011\rangle = |011\rangle$　CSWAP $|111\rangle = |111\rangle$

反転

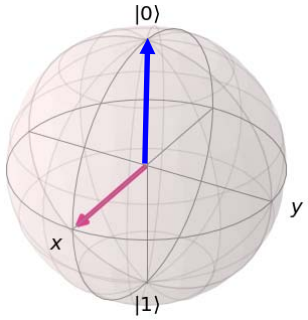
2-2: 量子アルゴリズムの基本

複数の量子ビットを使った演算も行えるようになりました。これをどう使えば量子計算ができるのかを疑問に思われているでしょう。

まず量子アルゴリズムの基本となる、位相に関係する仕組みを勉強します。

プラスケット $|+\rangle$ とマイナスケット $|-\rangle$

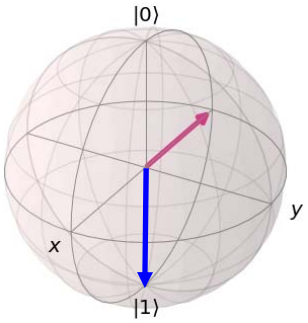
$|+\rangle$ は、$|0\rangle$ をアダマール変換した重ね合わせ状態。
$|+\rangle$ を再度アダマール変換すると $|0\rangle$ に戻る。



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

$$\mathrm{H}|+\rangle = |0\rangle$$

$|-\rangle$ は、$|1\rangle$ をアダマール変換した重ね合わせ状態。
$|-\rangle$ を再度アダマール変換すると $|1\rangle$ に戻る。
$|+\rangle$ と $|-\rangle$ は逆位相の関係。



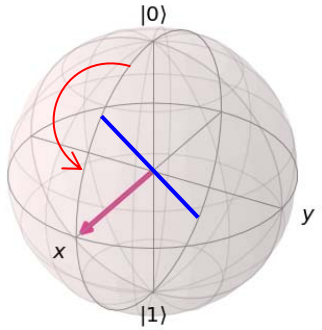
$$|-\rangle = \mathrm{H}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\mathrm{H}|-\rangle = |1\rangle$$

アダマール変換と位相

プラスケット $|+\rangle$ と マイナスケット $|-\rangle$ も考慮すると、
アダマール変換では、入力ケット（下の例では $|\varphi\rangle$）が、
位相に影響すると言う見方もできる。

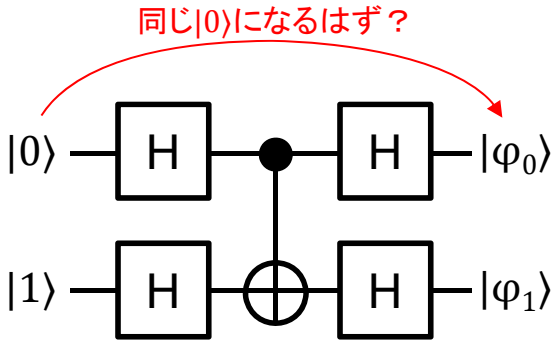
$$H|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + (-1)^{\varphi}\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$



重要!

アダマール変換は、
重ね合わせ状態の生成と同時に、
振幅（入力ベクトル）を位相に変換する。

制御反転 CNOTゲートと位相の反転



CNOTゲートの制御(Controlled)ビットは
同じ値が出力される…はず？
ではアダマールで重ね合わせした値
を入力するとどうなる？

答え：実行すると $|\varphi_0\rangle = |1\rangle$, $|\varphi_1\rangle = |1\rangle$ になる。
あれ？なぜ制御ビットの値が変化しているの？

$$|0\rangle \otimes |1\rangle \rightarrow (\mathrm{H}\otimes\mathrm{H}) \rightarrow |+\rangle \otimes |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)\otimes|-\rangle$$

$$\rightarrow (\mathrm{CNOT}) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}((-1)^{\mathrm{NOT}(0)}|0\rangle+(-1)^{\mathrm{NOT}(1)}|1\rangle)\otimes|-\rangle$$

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

$$\rightarrow (\mathrm{H}\otimes\mathrm{H}) \rightarrow |1\rangle \otimes |1\rangle$$

制御ビットの値は変化しない
が位相が反転する。

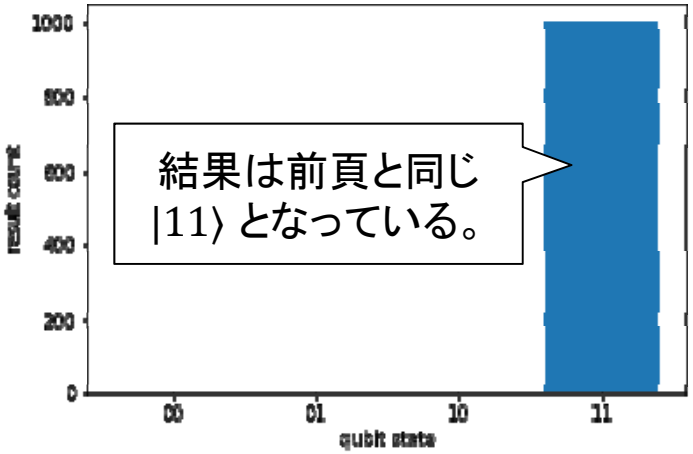
アダマールとCNOTの確認

Jupiter Notebook から以下回路を実行。

```
Q = [cirq.LineQubit(i) for i in range(2)]  # 2量子ビットを用意
qc = cirq.Circuit.from_ops(
  cirq.X(Q[1]),                          # Q1を反転して |1⟩にする
  cirq.H.on_each(*Q),                    # Q0/Q1にアダマール変換
  cirq.CNOT(Q[0],Q[1]),                  # CNOT適用
  cirq.H.on_each(*Q),                    # Q0/Q1にアダマール変換
  cirq.measure(Q[0], key='q0'),          # Q0を観測
  cirq.measure(Q[1], key='q1')           # Q1を観測
)
```

実行結果。

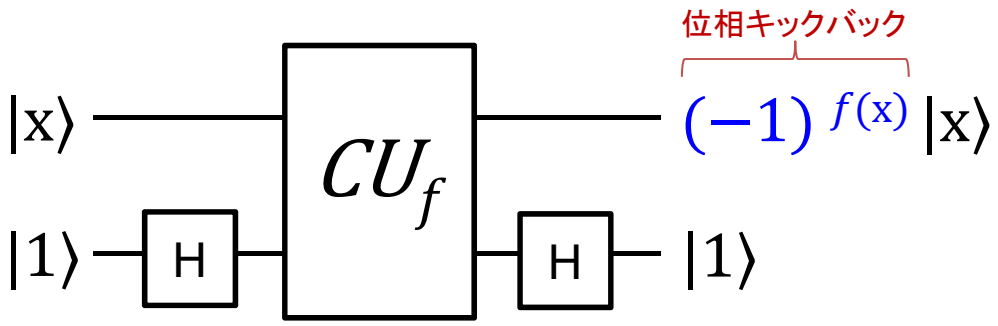
```
Circuit:
0: ———————H———@———H———M('q0')———
                |
1: ———X———H———X———H———M('q1')———
Results:
array([   0.,    0.,    0., 1000.])
```



位相キックバック（Phase kick back）

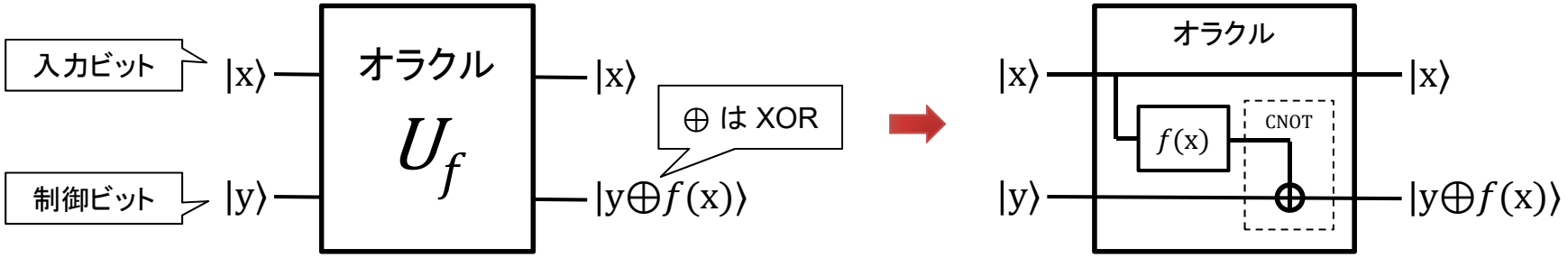
前頁のCNOT（CX）では位相が制御ビットに影響したが
これは一般的な制御ユニタリCUゲートにも適用可能。

CUゲートの動作を関数 $f(x)$ とすると、
関数を制御ビットの位相に反映する。
これを**位相キックバック**と呼ぶ。



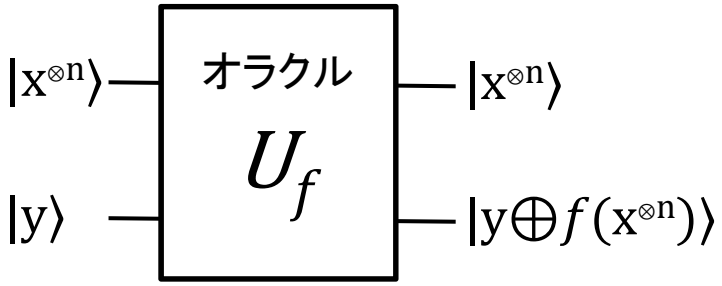
オラクル(Oracle:神託)ボックス

関数 $f(x)$ を計算するオラクル(神託)ボックス U_f を想定。



オラクルボックス U_f はユニタリ演算のブラックボックス。

入力は複数ビットに拡張できる。



2-3: ドイチェ アルゴリズム

位相キックバックとオラクルボックスが分かったところで、オラクルボックスを使う基本として、ドイチェアルゴリズムを見ます。

ドイチェ(Deutsch)問題

ドイチェ問題は**1ビット関数 $f(x)$ の性質(種類)を判定**。

性質A:一定(constant):出力は常に一定の値となる。
$f(0)=0$ かつ $f(1)=0$ 、または $f(0)=1$ かつ $f(1)=1$

性質B:均等(balanced):0 と 1 が均等(50%)の確率で出力される。
$f(0)=0$ かつ $f(1)=1$ 、または $f(0)=1$ かつ $f(1)=0$

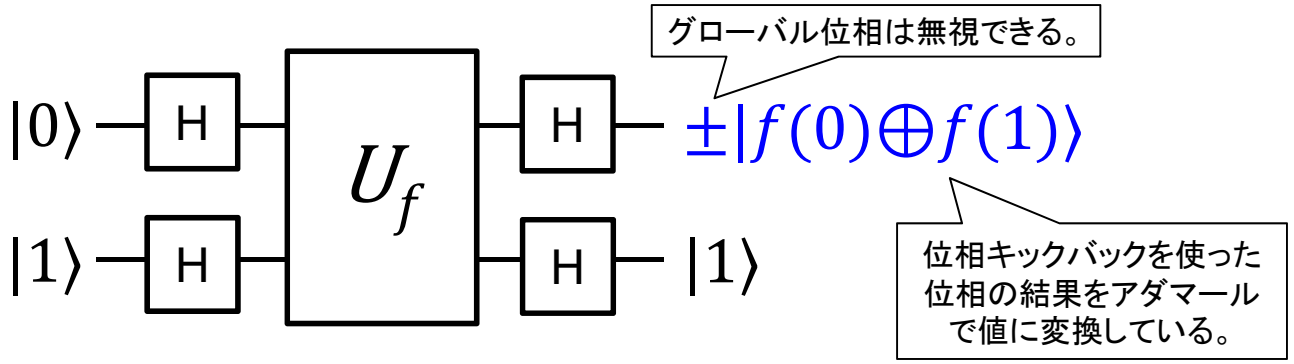
	性質A:一定(constant)		性質B:均等(balanced)	
$f(0)$	0	1	0	1
$f(1)$	0	1	1	0

古典アルゴリズムでは $f(0)$ と $f(1)$ の両方結果を取得しないと、どちらの性質(種類)か判定ができない。古典アルゴリズムでは $f(0)=0$ だったとしても $f(1)$ の結果を見る必要がある。

つまり**問い合わせが $f(0)$ と $f(1)$ の必ず2回必要**となる。

ドイチェ問題の量子計算

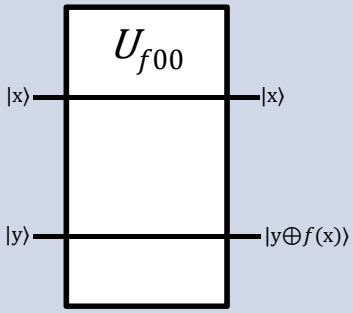
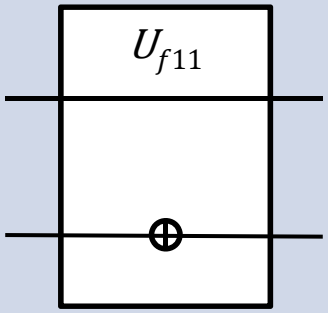
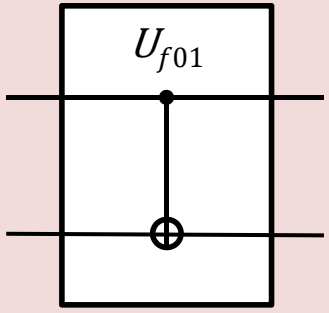
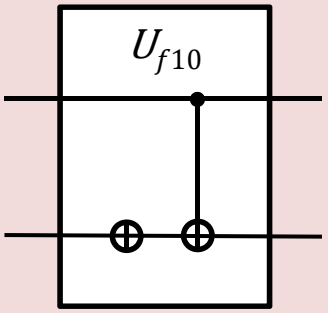
入力を $|0\rangle$ と $|1\rangle$ とする。
測定ユニタリの入出力にアダマールHを適用。
上位ビット出力は $f(0)$ と $f(1)$ の⊕(XOR)となる。



上位ビット出力 $f(0) \oplus f(1)$ を確認して判定。

一定(constant) : $f(0) \oplus f(1) = |0\rangle$
均等(balanced) : $f(0) \oplus f(1) = |1\rangle$

ドイチェ問題を計算する為の定義

	性質A：一定（constant）		性質B：均等（balanced）	
	$f_{00}(x)$	$f_{11}(x)$	$f_{01}(x)$	$f_{10}(x)$
$f(0)$	**0**	**1**	**0**	**1**
$f(1)$	**0**	**1**	**1**	**0**
f 変換	$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
U_f ゲート				
cirq	def oracle_f00(x, y_fx) return yield 何もしない	def oracle_f11(x, y_fx) yield X(y_fx)	def oracle_f01(x, y_fx) yield CNOT(x, y_fx)	def oracle_f10(x, y_fx) yield X(y_fx) yield CNOT(x, y_fx)

ドイチェ問題の計算

Jupiter Notebook から以下回路を実行(左右は連続)。

```
from cirq import *
# ユニタリ定義
def oracle_f00(x, y_fx):
    return
    yield
def oracle_f01(x, y_fx):
    yield CNOT(x, y_fx)
def oracle_f10(x, y_fx):
    yield X(y_fx)
    yield CNOT(x, y_fx)
def oracle_f11(x, y_fx):
    yield X(y_fx)
```

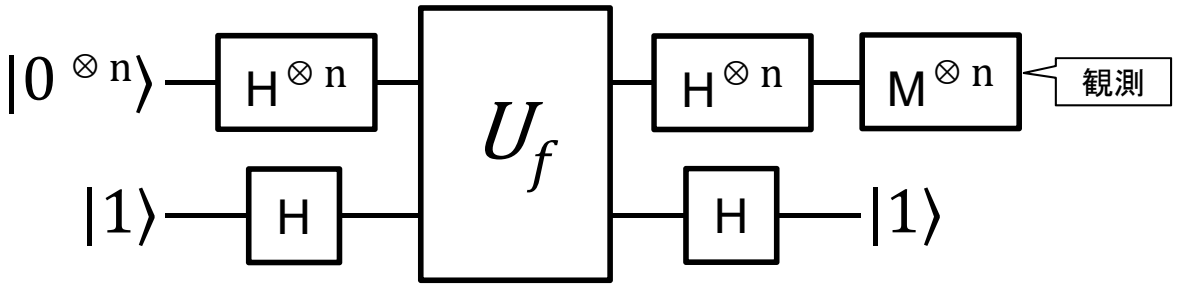
```
Q = [LineQubit(i) for i in range(2)]
qc = Circuit()
qc.append(X(Q[1]))
qc.append(H.on_each(*Q))
qc.append(oracle_f00(Q[0], Q[1]))
# qc.append(oracle_f01(Q[0], Q[1]))
# qc.append(oracle_f10(Q[0], Q[1]))
# qc.append(oracle_f11(Q[0], Q[1]))
qc.append(H.on_each(*Q))
qc.append(measure(Q[0], key='c'))
r = Simulator().run(qc)
print(r)
```

実行結果。

```
qc.append(oracle_f00(Q[0], Q[1]))  ⇒ (実行結果) ⇒  c=0  (constant)
qc.append(oracle_f01(Q[0], Q[1]))  ⇒ (実行結果) ⇒  c=1  (balanced)
qc.append(oracle_f10(Q[0], Q[1]))  ⇒ (実行結果) ⇒  c=1  (balanced)
qc.append(oracle_f11(Q[0], Q[1]))  ⇒ (実行結果) ⇒  c=0  (constant)
```

ドイチェ・ジョサ(Deutsch-Jozsa)問題

ドイチェ問題の入力を複数量子ビットにした問題。
2ビット以上だと一定・均等以外のケースもある。
例:2ビットの時に 0010 のように一定でも均等でも無いケースがあり得る。
この為に一定・均等いずれかであることを前提。



複数ビットに対しても適用可能とすることで、
ビット数が増えても演算は1回で済む。

2ビットのドイチェ・ジョサ問題

	一定（constant）		均等（balanced）					
	f_{C0}	f_{C1}	f_{B0}	f_{B1}	f_{B2}	f_{B3}	f_{B4}	f_{B5}
$f(00)$	0	1	0	0	0	1	1	1
$f(01)$	0	1	0	1	1	1	0	0
$f(10)$	0	1	1	0	1	0	1	0
$f(11)$	0	1	1	1	0	0	0	1

$f_{C0}(x1, x2) = 0$ ，　$f_{C1}(x1, x2) = 1$

$f_{B0}(x1, x2) = x1$ ，　$f_{B1}(x1, x2) = x2$

$f_{B2}(x1, x2) = x1 \oplus x2$ ，　$f_{B3}(x1, x2) = \mathrm{NOT}(x1)$

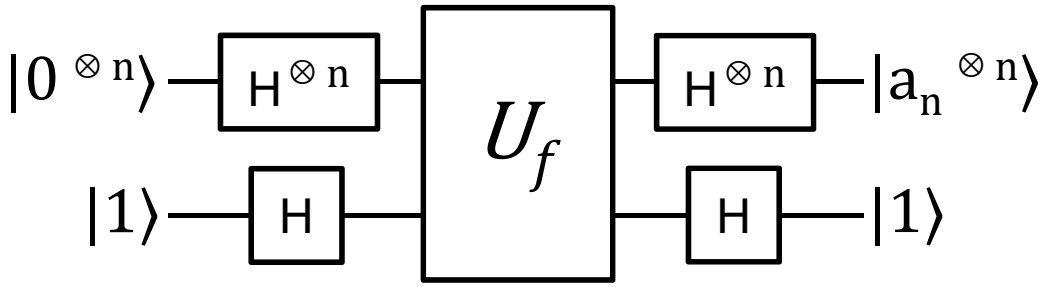
$f_{B4}(x1, x2) = \mathrm{NOT}(x2)$ ，　$f_{B5}(x1, x2) = \mathrm{NOT}(x1 \oplus x2)$

2ビットまではCNOT/NOTゲートで構成可能。
3ビット以上ではCCNOT（トフォリ）ゲートが必要。

その他の量子アルゴリズム問題

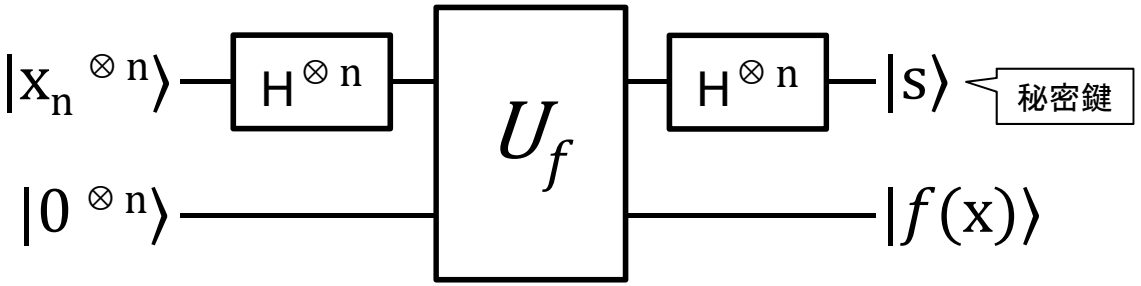
➢ ベルンシュタイン・ヴァジラニ(Bernstein-Vazirani)問題

nビットの変数xと定数aの内積を解とする関数$f(x)$がある時に定数aを求める。
$f(x)=x\cdot a=(x_0\cdot a_0)\oplus(x_1\cdot a_1)\oplus\ldots\oplus(x_n\cdot a_n)$



➢ サイモン(Simon)問題

nビット変数xと関数$f(x)$がある時に、$f(x)=f(x\oplus s)$となる秘密鍵sを得る問題。
ただしs≠0とする。古典では2^n回かかるが量子ではn回で済む。



ドイチェ系 量子アルゴリズム

1. アダマールゲートによる重ね合わせを作る。
   - 複数の入力状態を同時に実現する。
   - 振幅(値)を位相に変換する。
2. ブラックボックスにて位相キックバックを使う。
   - 内容が分からないユニタリ変換関数の性質を得る問題用。
   - 関数を使ったオラクルボックスを設定する。
   - 関数の内容を位相にキックバックさせる。
3. アダマールゲートにより位相を振幅に戻す。
   - 位相を振幅(値)に変換する。

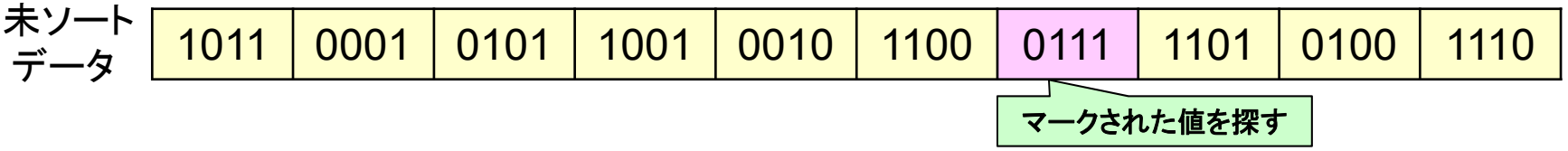
※ 量子アルゴリズムを使うことで、対象となるビット数が増えても1回の問合せで済む。これらの問題では確率的な解にはならず決定的な解となる。

2-4: グローバー検索（量子検索）

検索を高速化する重要な量子アルゴリズムが、
グローバー検索です。

グローバー(Grover)検索問題

n個の未ソート(ランダム)状態のデータがある時、
解となる特定の値xを検索する問題である。



古典的な計算ではn回の検索が必要となるが、
グローバー(量子)検索では$\sqrt{n}$回の検索で済む。
※ 量子検索でも1回では検索できないが充分早い。

検索と言っているが、関数 $y=f(x)$ がある時に、
特定の解 y を与える x が存在するかどうかを、
判断する逆関数の導出問題である。

振幅増幅手法

欲しい解の確率振幅をマイナスにマーキングして、全確率振幅の平均値で逆転させる計算手法で、グローバー検索で利用。

問題: $|\varphi\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle+|01\rangle+|10\rangle+|11\rangle)$ がある時に、
この中から $|10\rangle$ を探す（2量子ビットにおける検索例）。

手順1: 解 $|10\rangle$ の確率振幅（位相）をマイナスにマーキングする。

$$|\varphi\rangle_{\text{marked}} = \frac{1}{2}(|00\rangle+|01\rangle-|10\rangle+|11\rangle)$$

手順2: 全確率振幅の平均値を求める。

$$\langle a\rangle = \left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\right)/4 = \frac{1}{4}$$

平均値の周りで逆転する為に、
平均値から確率振幅を引いた後で平均値を足す

手順3: 全確率振幅の平均値の周りで反転させる。

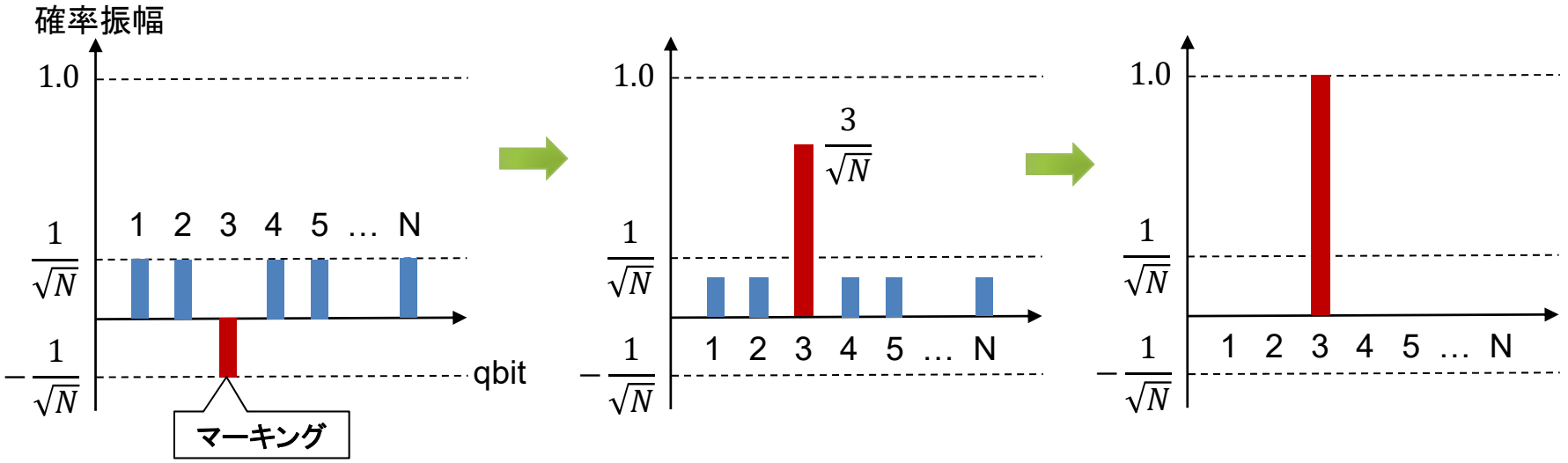
$$|\varphi\rangle'_{\text{marked}} = \left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\right)|00\rangle + \left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\right)|01\rangle + \left(\frac{1}{4}+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\right)|10\rangle + \left(\frac{1}{4}-\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\right)|11\rangle = |10\rangle$$

求める $|10\rangle$ が
見つかった

振幅増幅のイメージ

N量子ビットある時の各量子ビットの確率振幅は $\frac{1}{\sqrt{N}}$ となる。

振幅増幅を繰り返すことでマーキングされた量子ビットの値のみ増幅され、他の量子ビットは減衰されて行き、ある回数を繰り返した時にマーキングされた量子ビットの振幅確率が $\frac{1}{\sqrt{1}} = 1$ となるが、更に繰り返すと減衰される（後述）。

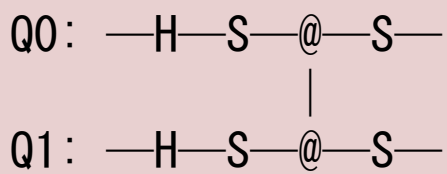
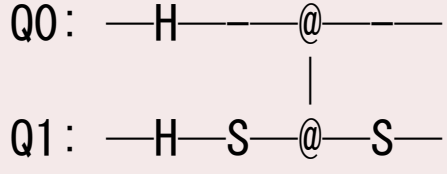
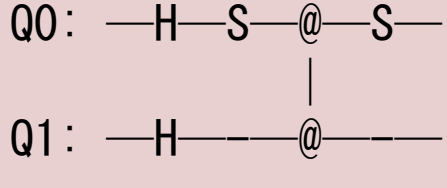
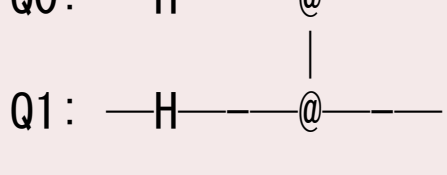


|10⟩ のマーキング実行

```
from cirq import *
import numpy as np          # 結果表示にnumpyを使う
Q = [LineQubit(i) for i in range(2)]
qc = Circuit()
qc.append(H.on_each(*Q))    # 均等な重ね合わせ状態を作る
qc.append(S(Q[0]))
qc.append(CZ(*Q))
qc.append(S(Q[0]))
print("Circuit:")
print(qc)
r = Simulator().simulate(qc)     # 位相を見る
print(np.around(r.final_state, 3))  # 丸めて結果表示
```

```
Circuit:
0: ———H———S———@———S———
               |
1: ———H———————@———————
[ 0.5+0.j  0.5+0.j -0.5+0.j  0.5-0.j]
```

2量子ビット確率分布(位相)マーキング

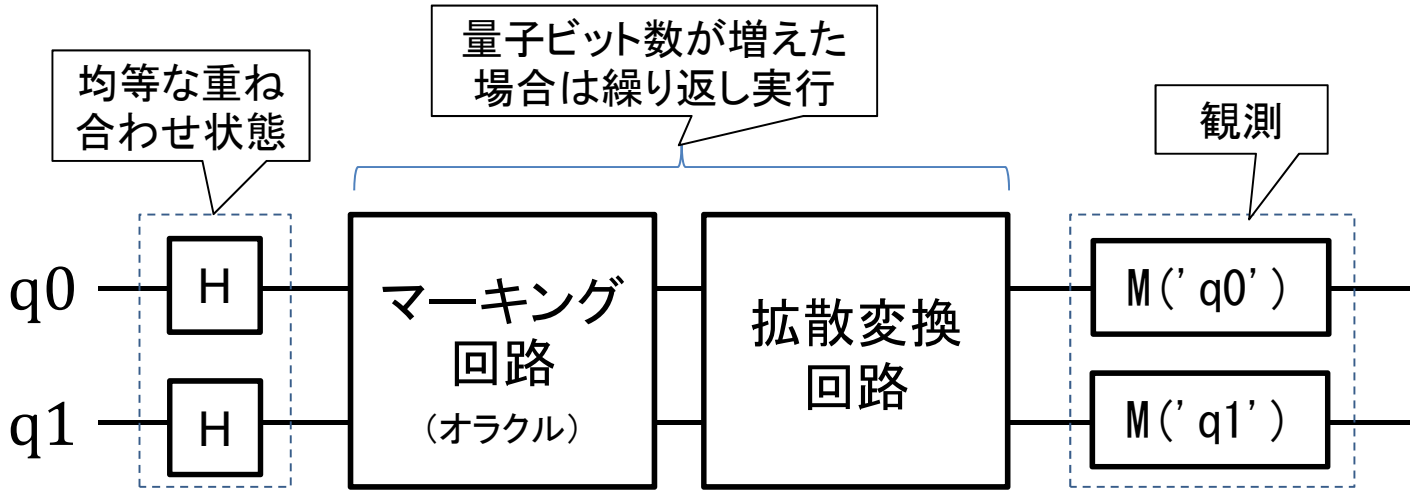
対象	回路	回路ソース	実行結果
|00⟩		H.on_each(*Q) S.on_each(*Q) CZ(*Q) S.on_each(*Q)	[0.5+0.j -0.5+0.j -0.5+0.j -0.5+0.j]
|01⟩		H.on_each(*Q) S(Q[1]) CZ(*Q) S(Q[1])	[0.5+0.j -0.5+0.j 0.5+0.j 0.5-0.j]
|10⟩		H.on_each(*Q) S(Q[0]) CZ(*Q) S(Q[0])	[0.5+0.j 0.5+0.j -0.5+0.j 0.5-0.j]
|11⟩		H.on_each(*Q) CZ(*Q)	[0.5+0.j 0.5+0.j 0.5+0.j -0.5+0.j]

平均値の周りで反転（拡散変換）

```
0: ―H―X―@―X―H―
          |
1: ―H―X―@―X―H―
```

平均値の周りで反転させる（拡散変換）回路

グローバー検索の回路

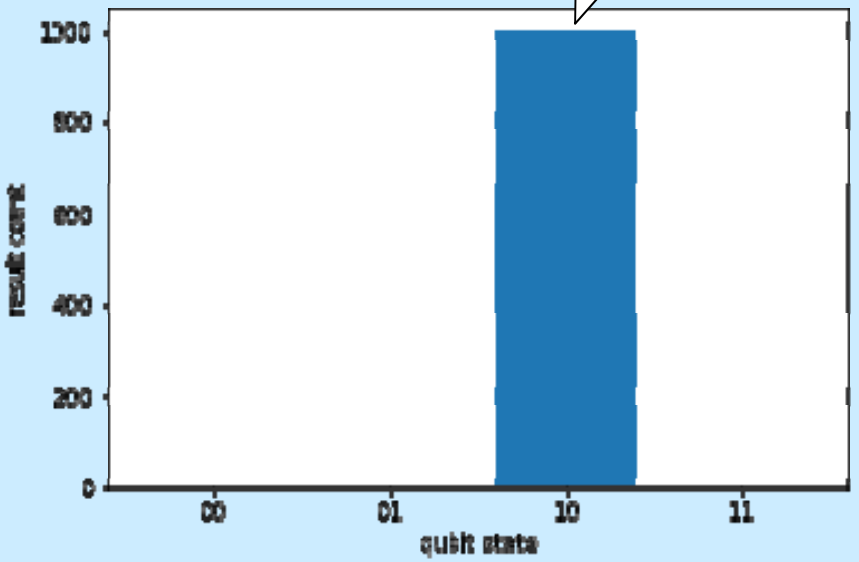


2量子ビットのグローバー検索の実行

```
from cirq import *
Q = [LineQubit(i) for i in range(2)]
qc = Circuit()
# 均等な重ね合わせ状態を作る
qc.append(H.on_each(*Q))
# マーキング |10>
qc.append(S(Q[0]))
qc.append(CZ(*Q))
qc.append(S(Q[0]))
# 平均値の周りで反転 （拡散変換）
qc.append(H.on_each(*Q))
qc.append(X.on_each(*Q))
qc.append(CZ(*Q))
qc.append(X.on_each(*Q))
qc.append(H.on_each(*Q))
# 観測（結果）
qc.append(measure(Q[0], key='q0'))
qc.append(measure(Q[1], key='q1'))
# 実行と結果表示
r = Simulator().run(qc, repetitions=1000)
plot_state_histogram(r)
```

解として|10⟩ が出力された

実行結果



array([0., 0., 1000., 0.])

繰り返し数の最適回数

今回は2量子ビットの問題を解いたので1回の拡散変換で結果が出たが、量子ビット数が増えると繰り返して拡散変換を実行する必要がある。なお最適回数をオーバーすると結果が悪くなる。

繰り返し数の最適回数Kは以下の式となる。

$$\text{最適回数 K} = \frac{\pi}{4}\sqrt{N} - \frac{1}{2}$$

N	計算結果	K
2^2=4	1.070796327…	1
2^3=8	1.721441469…	2
2^4=16	2.641592654…	3
2^5=32	3.942882938…	4
2^6=64	5.783185307…	6

N	計算結果	K
2^8=256	12.06637061…	12
2^{10}=1024	24.63274123…	25
2^{12}=4096	49.76548246…	50
2^{14}=16384	100.0309649…	100
2^{16}=65536	200.5619298…	201

グローバー検索の応用例

➢ 充足可能性（SAT：SATisfiability）問題

一つの命題論理式が与えられたとき、それに含まれる変数の値を偽 (False) あるいは真 (True) にうまく定めることによって全体の値を‘真’にできるか、という問題である。オラクルUを解きたいSATに合わせてセットすることで解ける。

SAT例題：$(x_1 \vee x_2) \wedge (\bar{x}_1 \vee x_2) \wedge (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2)$ の時
解：x_1＝False, x_2＝True にすると全体が True になる。

➢ 素数探索問題

|i⟩がある時に i が素数かどうかを判定するオラクルをグローバーのアルゴリズムを使って用意し、量子フーリエ変換と組み合わせて素数の探索を行う。

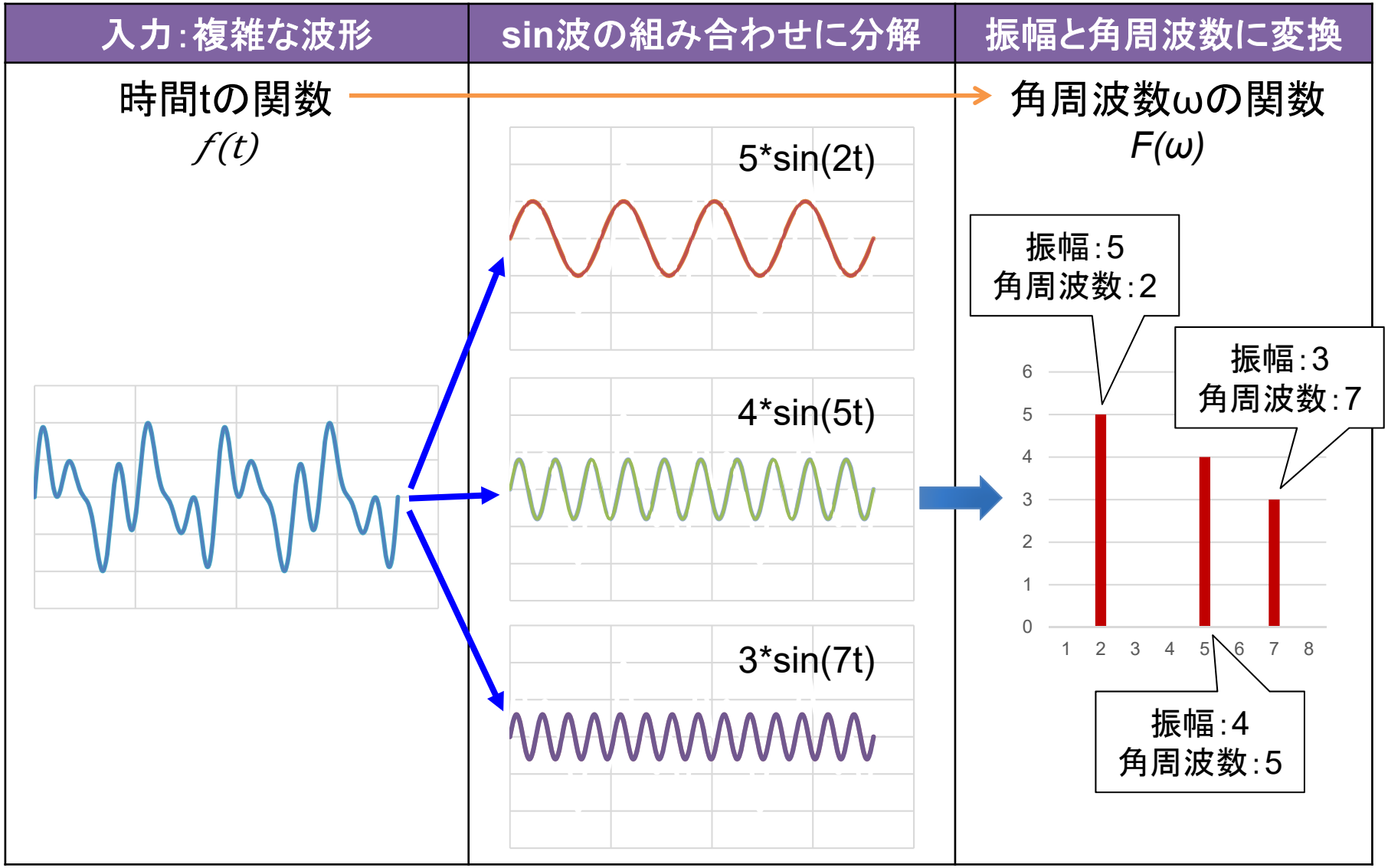
Jose I. Latorre, German Sierra
Quantum Computation of Prime Number Functions,
arXiv:1302.6245 [quant-ph] (2013)
https://arxiv.org/abs/1302.6245

※ グローバーのアルゴリズムを使った論文は多く、応用性の高いアルゴリズムです。

2-5: 量子フーリエ変換

アナログ計算であるフーリエ変換は量子計算と相性が良いアルゴリズムです。また可逆性よりフーリエ変換が可能なら逆フーリエ変換の量子回路も可能となります。

フーリエ変換（波形を振幅と角周波数に分解）



アダマールは 1量子ビット フーリエ変換

※ アダマール変換は2回適用すると元に戻るが位相が逆の逆フーリエ変換でもある。

Step1: アダマール変換を量子フーリエ変換的に解く。

$$\mathrm{H}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + (-1)^x \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + (-1)^x|1\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{y=0}^{1}(-1)^{x\cdot y}|y\rangle$$

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

$x = 1 : \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$

Step2: N(2^n)数の量子フーリエ変換($\mathrm{QFT_N}$)に拡張する。

$$\mathrm{QFT_N}\,|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathrm{N}}}\sum_{y=0}^{\mathrm{N}-1}\omega^{x\cdot y}|y\rangle$$

$$\omega = \exp\left(\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}\right)$$

ωの例：アダマールH(N=2)の時 $\omega = \exp(\pi i) = 180°$

※ 組み合わせ数(N=$2^{\text{nビット}}$)が増えると角度(位相)は半分ずつ減って行く。

制御位相回転ゲート cRn

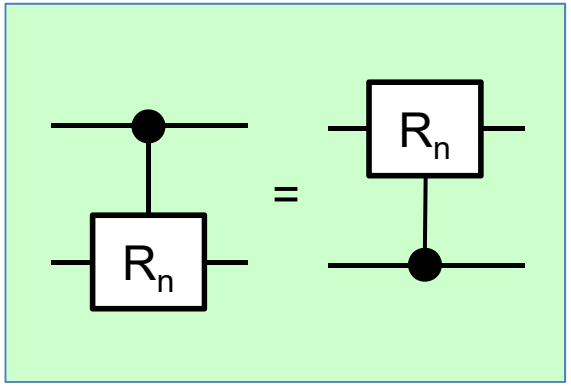
量子フーリエ変換は位相 $\exp\left(\frac{2\pi i}{2^n}\right)$ 計算が必要。

制御付きの位相回転ゲートRx の $x = 2^n$ として、

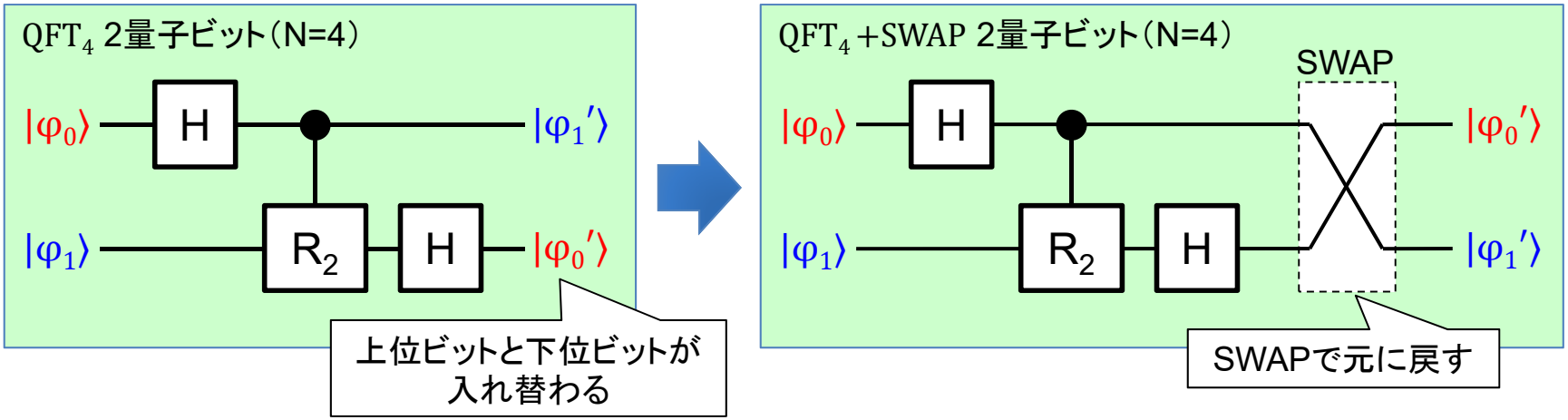
$cR_1 = CZ$, $cR_2 = CZ^{0.5}$, $cR_3 = CZ^{0.25}$,… $cR_n = CZ^{1/2^{n-1}}$

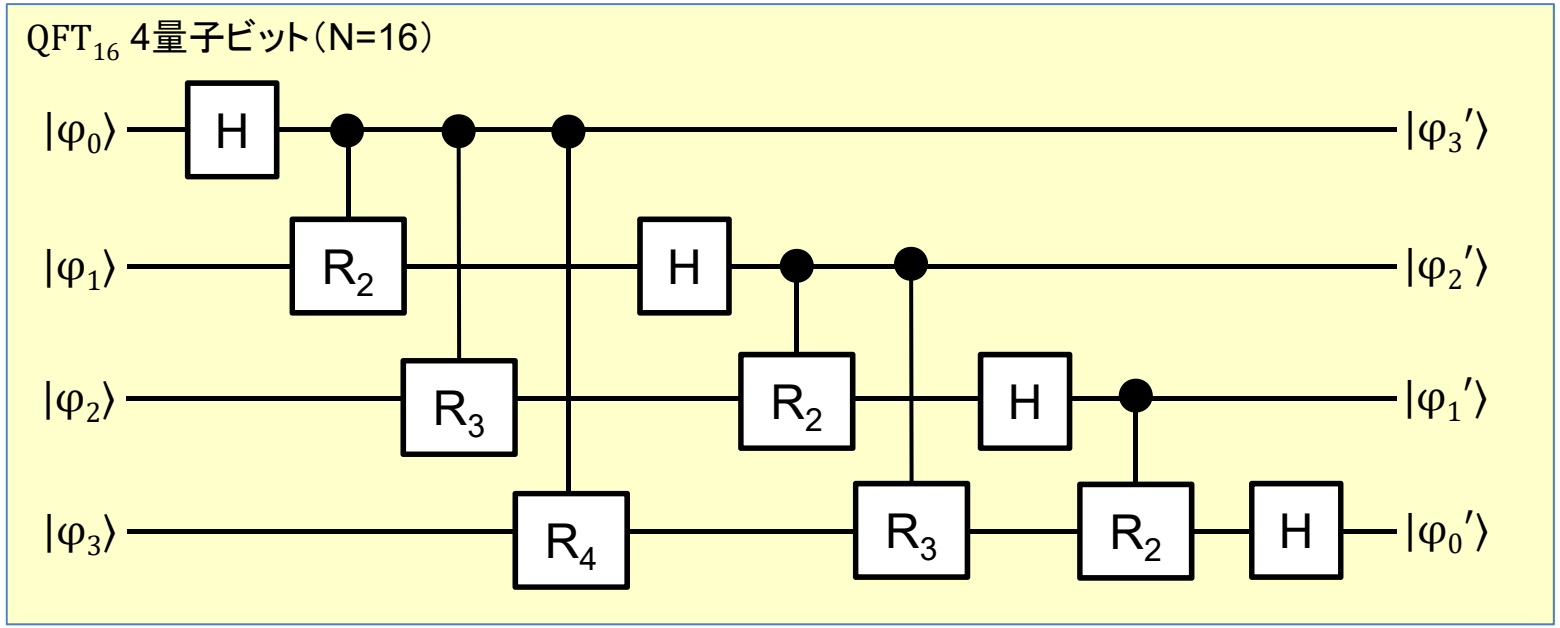
となる。Cirqでは $cR_2 = CZ^{0.5} = CZ(q)**0.5$ とする。

$$cRn = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (-1)^{1/2^{n-1}} \end{pmatrix} = CZ^{1/2^{n-1}}$$



n量子ビットの量子フーリエ変換 QFT_N





2量子ビットの量子フーリエ変換 計算

1. 入力が振幅(入力ベクトル)なら位相に変換して出力

$$\mathrm{QFT}_4 |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_{y=0}^{3} \omega^{0 \cdot y} |y\rangle$$

$$= \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle) = \mathrm{H} |00\rangle$$

2. 入力が位相なら振幅(入力ベクトル)に変換して出力

$$\mathrm{QFT}_4 \, \mathrm{H} |00\rangle = \frac{1}{4} \left(\sum_{y=0}^{3} \left(\sqrt{i}\right)^{0 \cdot y} |y\rangle + \sum_{y=0}^{3} \left(\sqrt{i}\right)^{1 \cdot y} |y\rangle \right.$$

$$\left. + \sum_{y=0}^{3} \left(\sqrt{i}\right)^{2 \cdot y} |y\rangle + \sum_{y=0}^{3} \left(\sqrt{i}\right)^{3 \cdot y} |y\rangle \right)$$

$$= |00\rangle$$

量子干渉効果で打ち消し

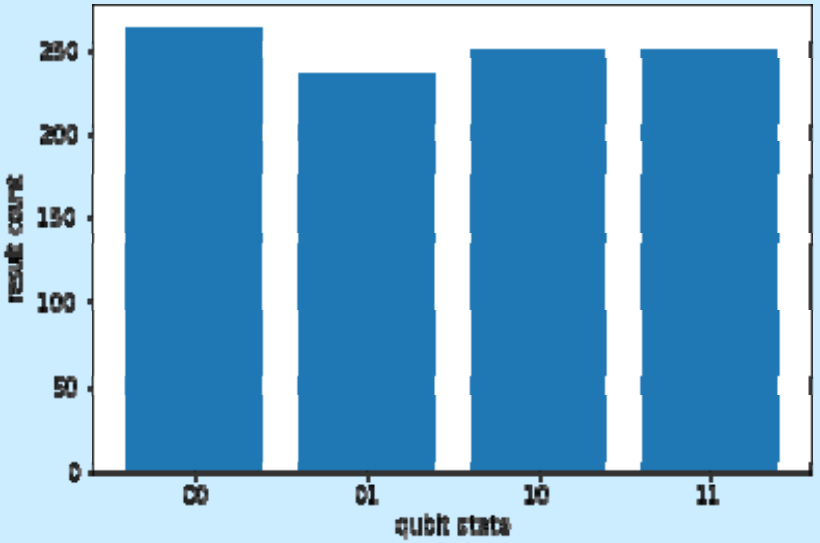
※ $|00\rangle$ を使った場合は、2量子ビットのアダマール変換と同じ。

2量子ビットの量子フーリエ変換 実行1

```
from cirq import *
Q = [LineQubit(i) for i in range(2)]
qc = Circuit()
# 量子フーリエ変換
qc.append(H(Q[0]))
qc.append(CZ(*Q)**0.5)
qc.append(H(Q[1]))
# 上位と下位のビット入れ替え
qc.append(SWAP(Q[0],Q[1]))
# 観測（結果取得）
qc.append(measure(Q[0], key='q0'))
qc.append(measure(Q[1], key='q1'))
print("Circuit:")
print(qc)
# 実行と結果表示
r = Simulator().run(qc, repetitions=1000)
plot_state_histogram(r)
```

```
Circuit:
0: ─H─@─────────×─M('q0')─
      │         │
1: ───@^0.5─H─×─M('q1')─
```

実行結果



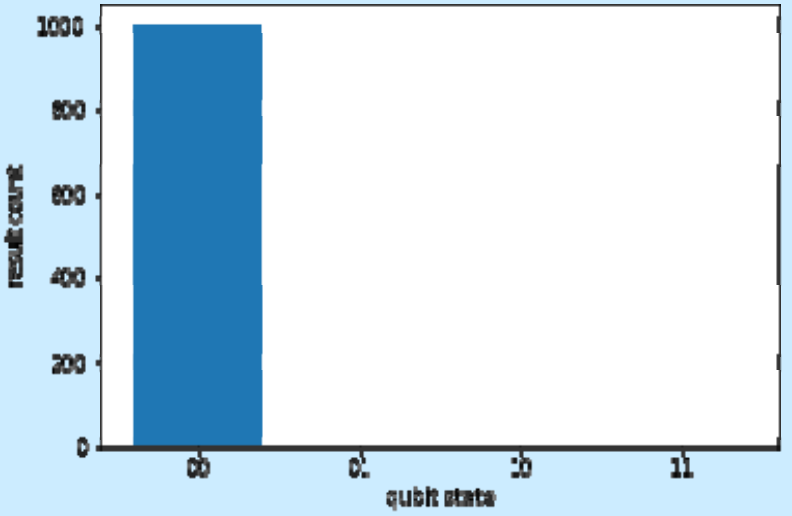
array([264., 237., 250., 249.])

振幅（値）を
位相に変換

2量子ビットの量子フーリエ変換 実行2

```
from cirq import *
Q = [LineQubit(i) for i in range(2)]
qc = Circuit()
# 重ね合わせ状態を入力
qc.append(H.on_each(*Q))
# 量子フーリエ変換
qc.append(H(Q[0]))
qc.append(CZ(*Q)**0.5)
qc.append(H(Q[1]))
# 上位と下位のビット入れ替え
qc.append(SWAP(Q[0],Q[1]))
# 観測（結果取得）
qc.append(measure(Q[0], key='q0'))
qc.append(measure(Q[1], key='q1'))
# 実行と結果表示
r = Simulator().run(qc, repetitions=1000)
plot_state_histogram(r)
```

実行結果



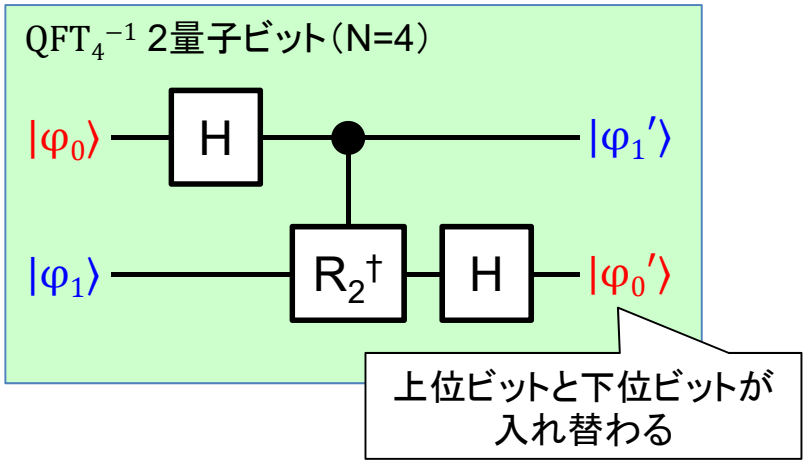
array([1000., 0., 0., 0.])

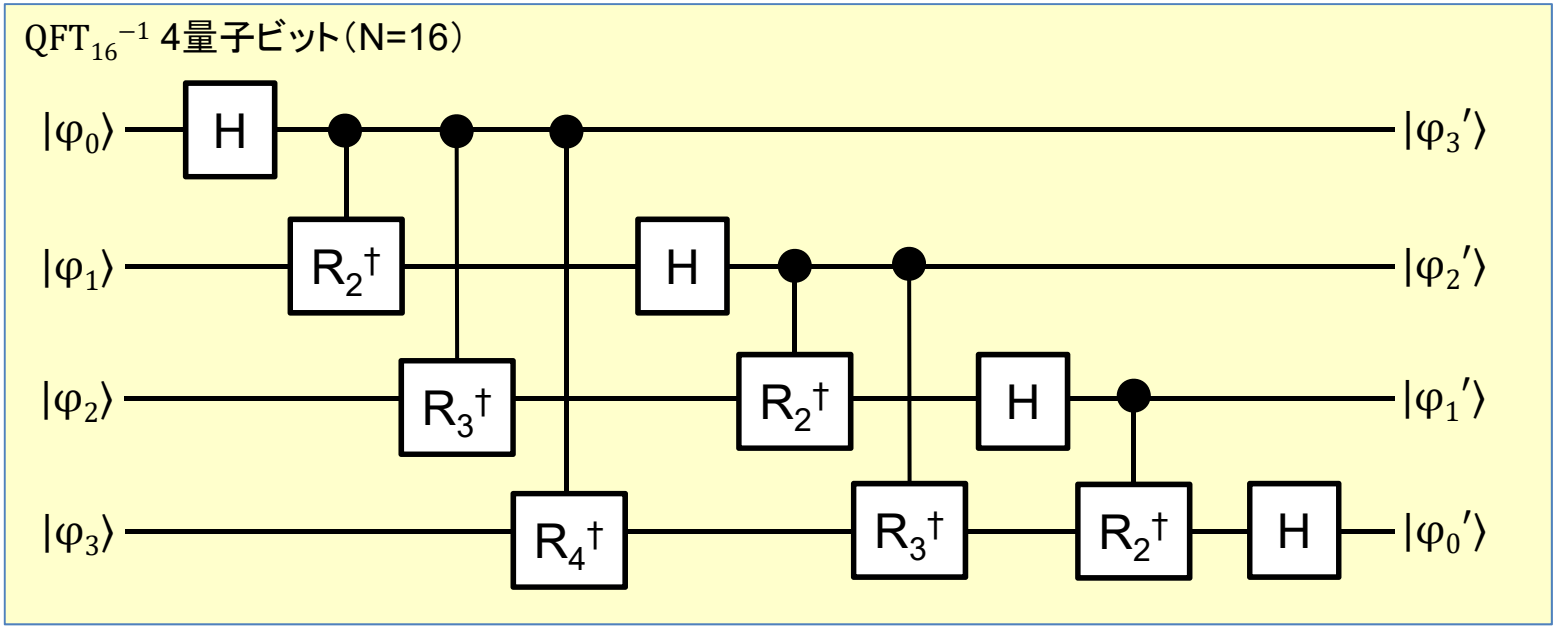
位相を振幅（値）に変換

- 量子干渉効果により重ね合わせ状態が打ち消されている。よく利用される変換。

n量子ビットの逆量子フーリエ変換 QFT_N^{-1}

逆量子フーリエ変換は
位相の向きを逆にする。
R_n を $R_n^{\dagger}$ に変更する。
※ アダマールは反転だった。

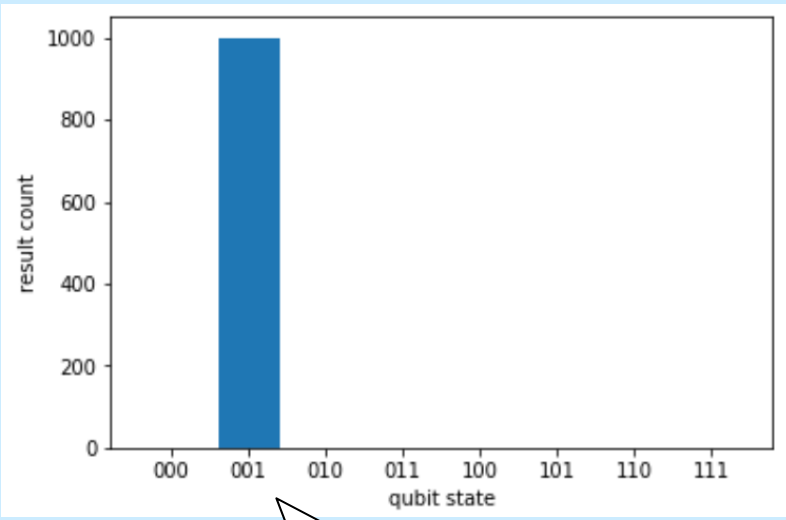




量子フーリエ変換・逆量子フーリエ変換

```
from cirq import *
# 量子フーリエ変換 定義 (inv=-1なら逆変換)
def qft(Q,n,inv):
    for i in range(n):
        for j in range(i):
            yield CZ(Q[i],Q[j])**(inv*1/2**(i-j))
        yield H(Q[i])
# 前準備
n = 3     # 3量子ビット(qbit)
Q = [LineQubit(i) for i in range(n)]
qc = Circuit()
# 入力として最後の量子ビットを反転して |001> に
qc.append(X(Q[2]))
# 量子フーリエ変換 inv = 1
qc.append(qft(Q,n,1))
qc.append(SWAP(Q[0],Q[2]))  # Q[1]は入れ替え不要
# 逆量子フーリエ変換 inv = -1
qc.append(qft(Q,n,-1))
qc.append(SWAP(Q[0],Q[2]))  # Q[1]は入れ替え不要
# 観測 (結果取得)
qc.append(measure(Q[0], key='q0'))
qc.append(measure(Q[1], key='q1'))
qc.append(measure(Q[2], key='q2'))
# 実行と結果表示
r = Simulator().run(qc, repetitions=1000)
plot_state_histogram(r)
print(r)
```

実行結果



初期値の
|001⟩ に
戻っている

2-6: ショアのアルゴリズム

素因数分解を行うショアのアルゴリズムにより
公開鍵暗号が破れると言う注目をされました。

実際には必要なスケールを持つ量子ハードを
実現できないのですが正しく恐れる為に、
アルゴリズムを学びましょう。

素因数分解問題

ある正の整数を、素数の積の形で表わすこと。
ここでは正の整数の入力から、2つの素因数の積に分解する(2つの異なる素因数を得る)問題と考える。

※ 素因数:整数の因数である約数のうち素数であるもの。

例1:15 = 3 × 5　　(入力:15、出力:3と5)
例2:221 = 13 × 17　　(入力:221、出力:13と17)
例3:21631 = 97 ×223 (入力:21631、出力:97と223)

古典計算にて安直に解くには順番に素数を掛けて試して行く。
例2なら、221÷2、221÷3、221÷5、...、221÷13=17(正解!)とすることで解けるが元の整数が大きくなると指数的に困難になる。

※ RSA暗号は素因数分解が困難であることを前提とした暗号方式である。

ショア(Shor)のアルゴリズム

1994年にIBMのピーター・ショアが発表した、**素因数分解アルゴリズム**。(25年前なので結構古い)

全てを量子計算する訳では無く、位数発見部を量子計算する(他は古典計算する)ことで、多項式時間(n個の計算を n^c 回で計算、c は定数)で計算可能とする。

※ 古典解法では指数時間(n個の計算を c^n 回で計算)が必要だった。

量子と古典の両方の計算を使う、**ハイブリッド計算**が必要になるのでPythonによる計算は適している。

※ 素因数分解は可能だがビット数が増えると必要な量子ビット数が増える。この為、**実用にはハードウェアの進歩が必要。**

ショアのアルゴリズムの手順

ショアの計算では以下の3ステップが必要。

Step1：前処理（古典計算）

- 入力された整数 N から任意の数 a を選択。
- N と a は互いに素である必要がある。

Step2：周期発見（量子計算）

- 数 a を使って量子的に位数発見問題を解く。
- 位相の数から位数 r（周期T）を得る。

Step3：後処理（古典計算）

- 位数 r をチェックして正しくなければStep1へ、
  位数 r を使い2つの素因数を計算して終了。

参考: フェルマー(Fermat)テスト

古典計算

互いに素:

2つの整数の最大公約数が1である。
2つの整数 a, b の**最大公約数 gcd(a, b) が 1** となる。

フェルマーの小定理:

p が素数の時に互いに素な整数 a に以下が成り立つ。

$a^p \equiv a \pmod p \Rightarrow a^{p-1} \equiv 1 \pmod p$

フェルマーテスト(素数判定):

a と p が互いに素の時。
フェルマーの小定理の対偶を使うと以下が言える。

$a^{p-1} \not\equiv 1 \pmod p$ なら **p は素数ではない。**

Step1：前処理（古典計算）

入力値NからNより小さく互いに素な因数aを選択する。

Nと互いに素な素因数aの見つけ方：

1. Nより小さい整数aを選ぶ。
2. Nとaの最大公約数 gcd(N,a) が1ならaは素因数（※）。
3. 最大公約数が1以外なら別の整数aを選びやり直す。

※「ユークリッドの互除法」により最大公約数が1なら「互いに素」となる。

例：入力値N＝15が与えられた場合

解：互いに素な値 a は、2, 4, 7, 8, 11, 13, 14 となる。

```
import math             # gcdを使う為にmathを利用
N = 15                  # 入力値N
for i in range(2,N):    # 1は除くので2からNまで
    r = math.gcd(N,i)   # 最大公約数の計算
    if r == 1:          # rが1なら互いに素
        print(i)        # 互いに素な値a表示
```

古典計算

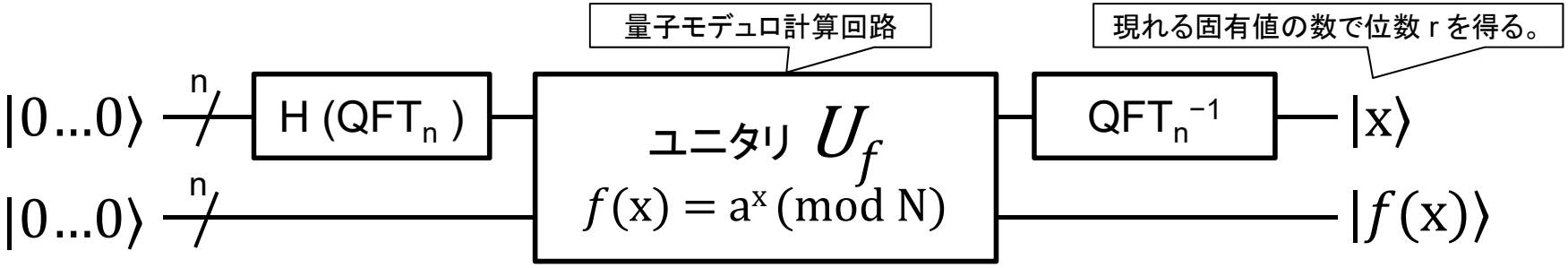
実行

```
2
4
7
8
11
13
14
```

Step2：周期(位数)発見（量子計算）

入力値NとStep1で計算した値aから位数を計算。

適切なユニタリ回路を組み、位数発見問題を解く。



※ 量子フーリエ変換は全ビットをアダマール変換すれば良く、逆量子フーリエ変換は既出である。

例：入力値N=15の場合に、a=4と7を試してみる。

解：次ページ以降に記載の量子回路を実行する。

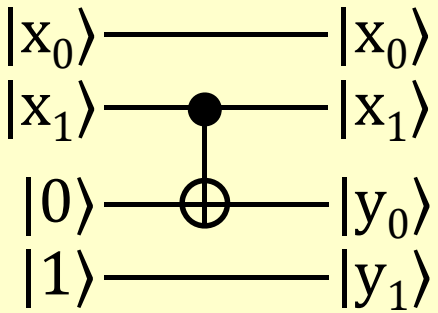
N=15, a=4 の場合の位数 r = 2 を得る

N=15, a=7 の場合の位数 r = 4 を得る

簡易: 位数発見問題のユニタリ回路1

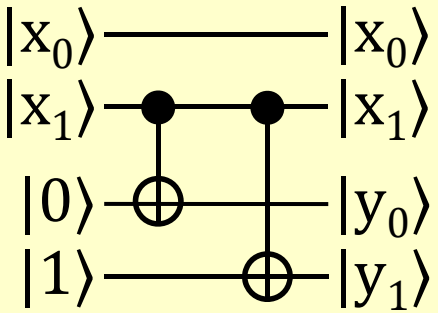
関数 $y = f(x) = a^x \bmod N$ (x=0,1,2,...) のユニタリ回路が必要。
まともにやるのは大変なので真理値表から作って試験する。

$f(x) = 3^x \pmod 8$



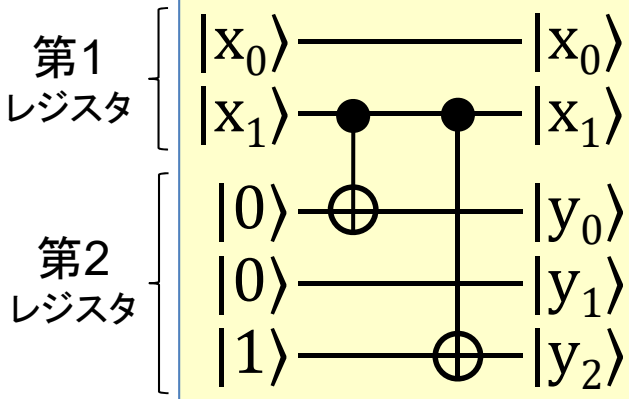
x_0	x_1	y_0	y_1
0	0	0	1
0	1	1	1
1	0	0	1
1	1	1	1

$f(x) = 2^x \pmod 3$



x_0	x_1	y_0	y_1
0	0	0	1
0	1	1	0
1	0	0	1
1	1	1	0

$f(x) = 4^x \pmod{15}$



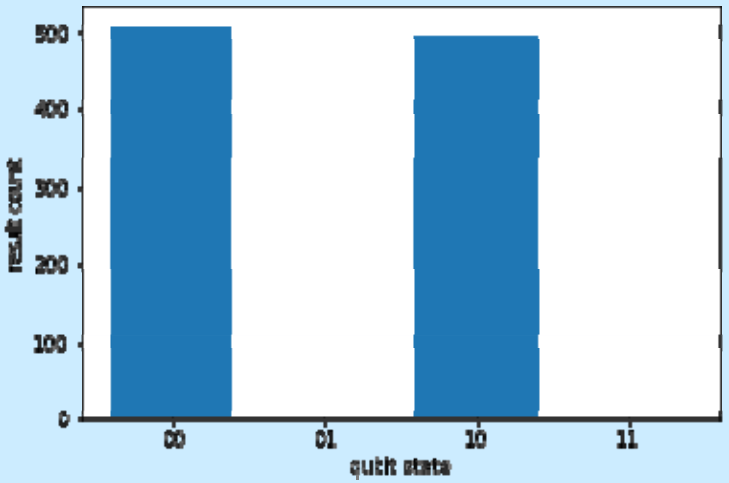
x_0	x_1	y_0	y_1	y_2
0	0	0	0	1
0	1	1	0	0
1	0	0	0	1
1	1	1	0	0

簡易方法では位数rを発見する回路の為に全ケースを先に計算(位数rは明確)をしているので実用的では無いが最小量子ビット数で回路を実現できるので学習用として利用されている。

周期発見 N=15, a=4 の実行

```
from cirq import *
# 量子フーリエ変換 定義 (inv=-1なら逆変換)
def qft(Q,n,inv):
    for i in range(n):
        for j in range(i):
            yield CZ(Q[i],Q[j])**(inv*1/2**(i-j))
        yield H(Q[i])
# 前準備
n = 3        # yは3qbit (入力N=15なので充分)
Qx = [GridQubit(0,i) for i in range(n-1)] # xは2qbit
Qy = [GridQubit(1,i) for i in range(n)]
qc = Circuit()
# 計算用Qxを重ね合わせ状態にする
qc.append(H.on_each(*Qx))
# オラクル計算
qc.append(X(Qy[n-1]))
qc.append(CNOT(Qx[1], Qy[0]))
qc.append(CNOT(Qx[1], Qy[2]))
# Qxを逆量子フーリエ変換 inv = -1
qc.append(qft(Qx,n-1,-1))
qc.append(SWAP(Qx[0],Qx[1]))
# Qxの観測 (結果取得)
qc.append(measure(Qx[0], key='q0'))
qc.append(measure(Qx[1], key='q1'))
# 実行と結果表示
r = Simulator().run(qc, repetitions=1000)
plot_state_histogram(r)
```

実行結果



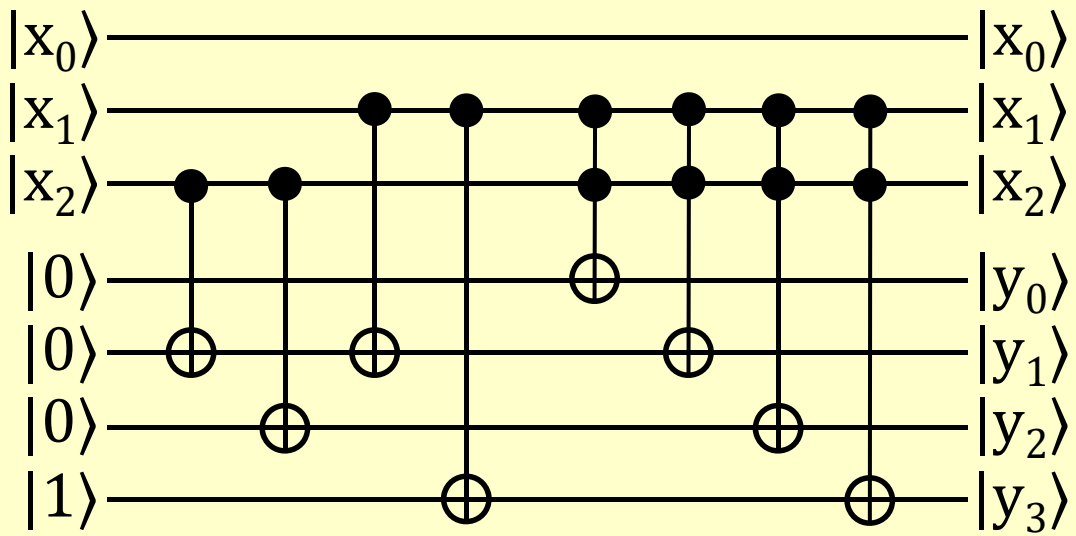
array([506., 0., 494., 0.])

値が出るのは、
00, 10 の2通りなので
r=2

簡易: 位数発見問題のユニタリ回路2

$f(x) = 7^x \pmod{15}$ だとこんなに複雑に...

$f(x) = 7^x \pmod{15}$



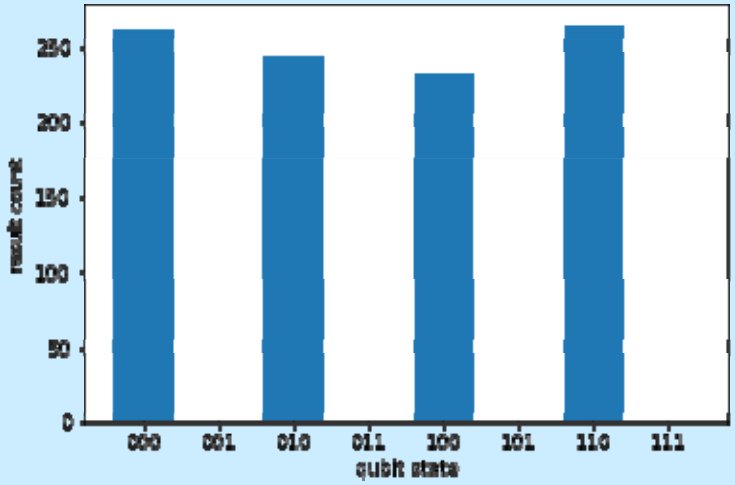
x_0	x_1	x_1	y_0	y_1	y_2	y_3
0	0	0	0	0	0	1
0	0	1	0	1	1	1
0	1	0	0	1	0	0
0	1	1	1	1	0	1
1	0	0	0	0	0	1
1	0	1	0	1	1	1
1	1	0	0	1	0	0
1	1	1	1	1	0	1

この程度でも汎用的な位数発見回路が必要と思える。
しかしまともにやると必要となる量子ビット数が増える…

周期発見 N=15, a=7 の実行

```
from cirq import *
# 量子フーリエ変換 定義 (inv=-1なら逆変換)
def qft(Q,n,inv):
    for i in range(n):
        for j in range(i):
            yield CZ(Q[i],Q[j])**(inv*1/2**(i-j))
        yield H(Q[i])
# 前準備
n = 4        # yは4qbit (入力N=15なので充分)
Qx = [GridQubit(0,i) for i in range(n-1)] # xは3qbit
Qy = [GridQubit(1,i) for i in range(n)]
qc = Circuit()
# 計算用Qxを重ね合わせ状態にする
qc.append(H.on_each(*Qx))
# オラクル計算
qc.append(X(Qy[n-1]))
qc.append(CNOT(Qx[2], Qy[1]))
qc.append(CNOT(Qx[2], Qy[2]))
qc.append(CNOT(Qx[1], Qy[1]))
qc.append(CNOT(Qx[1], Qy[3]))
qc.append(CCX(Qx[1], Qx[2], Qy[0]))
qc.append(CCX(Qx[1], Qx[2], Qy[1]))
qc.append(CCX(Qx[1], Qx[2], Qy[2]))
qc.append(CCX(Qx[1], Qx[2], Qy[3]))
# Qxを逆量子フーリエ変換 inv = -1
qc.append(qft(Qx,n-1,-1))
qc.append(SWAP(Qx[0],Qx[2]))
# Qxの観測 (結果取得)
qc.append(measure(Qx[0], key='q0'))
qc.append(measure(Qx[1], key='q1'))
qc.append(measure(Qx[2], key='q2'))
# 実行と結果表示
r = Simulator().run(qc, repetitions=1000)
plot_state_histogram(r)
```

実行結果



array([261., 0., 243., 0., 232., 0., 264., 0.])

値が出るのは、
000, 010, 100, 110
の4通りなので r=4

Step3：後処理（古典計算）

Step2で計算された位数 r を使って以下をチェック。

1. 位数rが奇数ならば、Step1から別のaでやり直し。
2. 位数rが偶数かつ、$a^{r/2}\pm1$とNが互いに素であれば、
   Step1から別のaでやり直し。
3. 周期Tが偶数で、$a^{r/2}\pm1$とNが互いに素で無ければ、
   以下の計算により2つの素因数が得られる。

$$\text{素因数 P1} = \gcd(a^{r/2}+1, N)$$
$$\text{素因数 P2} = \gcd(a^{r/2}-1, N)$$

例：N=15, a=7, r=4（r/2=2）の時、

$$\text{素因数 P1} = \gcd(7^2+1, 15) = \gcd(50, 15) = 5$$
$$\text{素因数 P2} = \gcd(7^2-1, 15) = \gcd(48, 15) = 3$$

解：15 の素因数は 5 と 3 である（5×3=15 なので正しい）。

補足: 素因数を得る為の計算

$f(x) = f(x+r)$ から、
$a^x \bmod N = a^{x+r} \bmod N$ となる。
これより $a^r \bmod N = 1$ が導かれる。

$a^r \bmod N = 1$ で位数 r が偶数なら、
$(a^{r/2}-1)(a^{r/2}+1) \bmod N = 0$ となり、
最大公約数 $\gcd(a^{r/2}\pm 1, N)$ により、
因数が高い確率(50%以上)で計算できる。

※ N と $a^{r/2}\pm 1$ が互いに素の場合は計算に失敗する。

N=15, a=2,4,7,8,11,13,14 の周期表

関数 $f(x) = a^x \bmod 15$ の計算結果：

$a^{r/2} \pm 1$とNが互いに素ならNGとする。

a	^1	^2	^3	^4	^5	^6	^7	^8	^9	^10	^11	^12	r	chk
2	2	4	8	1	2	4	8	1	2	4	8	1	4	OK
4	4	1	4	1	4	1	4	1	4	1	4	1	2	OK
7	7	4	13	1	7	4	13	1	7	4	13	1	4	OK
8	8	4	2	1	8	4	2	1	8	4	2	1	4	OK
11	11	1	11	1	11	1	11	1	11	1	11	1	2	NG
13	13	4	7	1	13	4	7	1	13	4	7	1	4	OK
14	14	1	14	1	14	1	14	1	14	1	14	1	2	NG

a=2, r=4 : $P1 = \gcd(2^2+1, 15) = \gcd(5, 15) = 5$ / $P2 = \gcd(2^2-1, 15) = \gcd(3, 15) = 3$

a=4, r=2 : $P1 = \gcd(4^1+1, 15) = \gcd(5, 15) = 5$ / $P2 = \gcd(4^1-1, 15) = \gcd(3, 15) = 3$

a=7, r=4 : $P1 = \gcd(7^2+1, 15) = \gcd(50, 15) = 5$ / $P2 = \gcd(7^2-1, 15) = \gcd(48, 15) = 3$

a=8, r=4 : $P1 = \gcd(8^2+1, 15) = \gcd(65, 15) = 5$ / $P2 = \gcd(8^2-1, 15) = \gcd(63, 15) = 3$

a=11, r=2 : $P1 = \gcd(11^1+1, 15) = \gcd(12, 15) = 12$ / $P2 = \gcd(11^1-1, 15) = \gcd(10, 15) = 10$

a=13, r=4 : $P1 = \gcd(13^2+1, 15) = \gcd(170, 15) = 5$ / $P2 = \gcd(13^2-1, 15) = \gcd(168, 15) = 3$

a=14, r=2 : $P1 = \gcd(14^1+1, 15) = \gcd(15, 15) = 0$ / $P2 = \gcd(14^1-1, 15) = \gcd(13, 15) = 13$

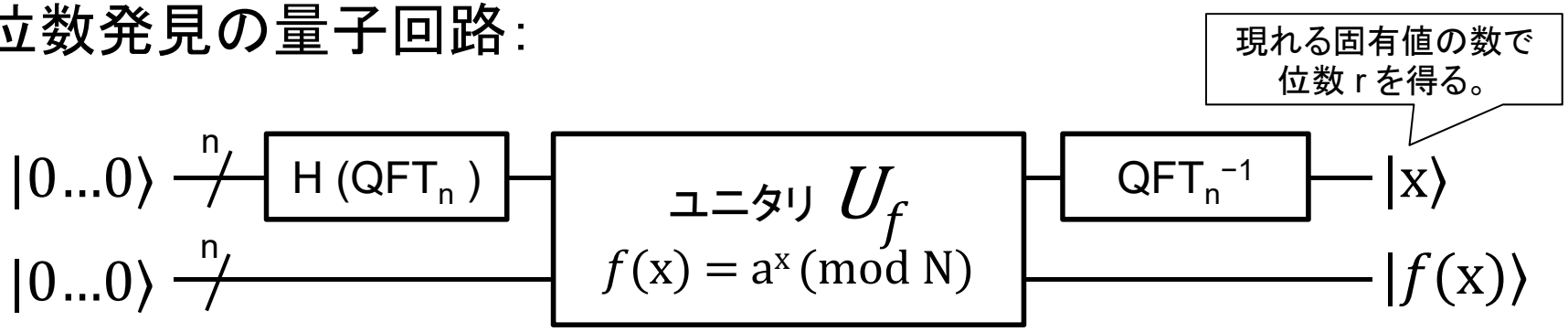
Re: 位数(周期)発見問題

関数 $f(x) = a^x \pmod N$ において、
$f(x) = f(x+r)$ となる位数 r を発見する。

※ 位相が分かればその数から位数が高確率で取得できる。

⇒ (逆)量子フーリエ変換を使い、位数を発見する事が可能。

位数発見の量子回路:



※ 量子フーリエ変換は全ビットをアダマール変換すれば良く、逆量子フーリエ変換は既出である。

関数 $f(x) = a^x \pmod N$ の汎用ユニタリ回路が必要。

位数(周期)発見の汎用回路：$a^x \pmod N$

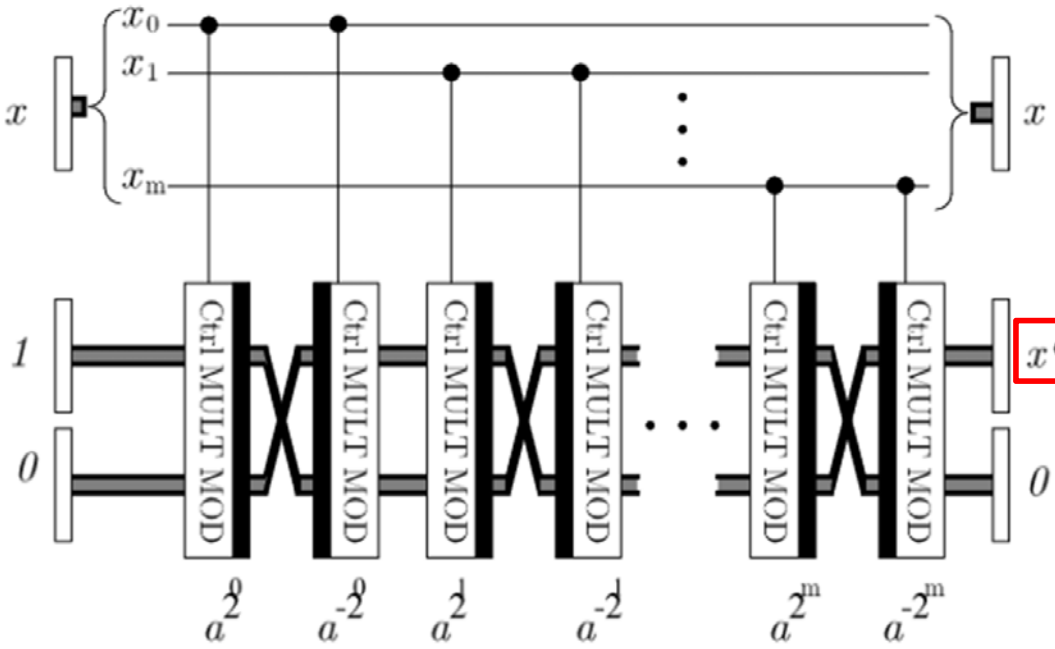
入力：整数 N と任意の数 a を入力。← 2入力
出力：位数 r を得る。← 1出力
実現：位数発見の汎用的モジュロ回路が必要！

推薦資料「Shorのアルゴリズム」
加藤 拓己*, 湊 雄一郎*, 中田 真秀**（*MDR株式会社, **理化学研究所）
https://speakerdeck.com/gyudon/shorfalsearugorizumu

参考資料「量子計算機の到来を正しく恐れたい」
國廣 昇（東京大学）：NICTサイバーセキュリティシンポジウム2019発表資料
※ 本資料の疑問への答えが、上記の「Shorのアルゴリズム」と言える。
https://www2.nict.go.jp/csri/plan/H31-symposium/pdf/kunihiro.pdf

以上の資料が参考になる。

$x^a \bmod N$ を計算する量子ゲート回路



入力ビット数(L)に対し:
- 量子ビット数 → 3L+2 qbit
  L=2048bit なら 6146 qbit
- 量子ゲート数 → L^3 ゲート
  L=2048bit なら $2048^3 = 10^9$

量子ビット数を減らす場合:
- 量子ビット数 → 2L+2 qbit
  L=2048bit なら 4098 qbit
- 量子ゲート数 → L^4 ゲート
  L=2048bit なら $2048^4 = 10^{13}$

Figure 6)
V. Vedral, A. Barenco and A. Ekert

V. Vedral, A. Barenco, A. Ekert,
Quantum Networks for Elementary Arithmetic Operation,
arXiv:quant-ph/9511018 (1995)
https://arxiv.org/abs/quant-ph/9511018

「いちばんやさしい量子コンピュータで暗号を解くshorのアルゴリズム概要」
Blueqatを使ったモジュロ演算の実装例　@YuichiroMinato（MDR）
https://qiita.com/YuichiroMinato/items/5f98c467c006d7cb902c

現在のRSA暗号は解けるのか？

※ 現在2048～4096ビットのRSA暗号が使われている。

2048ビット（L=2048）を解こうとした場合：

- 量子ビット数：$2048 \times 3 + 2 = 6146$（エラー無し）
- 量子ゲート数：$2048^3 = 86$億（持続時間に影響）

が必要となる（量子ゲート数は古典だとステップ数に相当）。

エラー無しの6148量子ビットの実現：

エラー訂正ありだと10億量子ビットと言われている

- 量子ビット数もだがエラー無しハードルは高い。

86億ゲートを実現する重ね合わせ持続時間の実現：

- 量子重ね合わせ状態維持もハードルが高い。

正直言って実現することはかなり難しい？

続:現在のRSA暗号は解けるのか？

2019年5月に出たべき剰余の効率化に関する論文

「2,000万のノイズ量子ビットを使用して8時間で2048ビットのRSA整数を解く方法」
"How to factor 2048 bit RSA integers in 8 hours using 20 million noisy qubits"
Craig Gidney (Google), Martin Eker (スウェーデン王立工科大学)
https://arxiv.org/abs/1905.09749

RSA 2048ビットを解く為に必要なリソース:

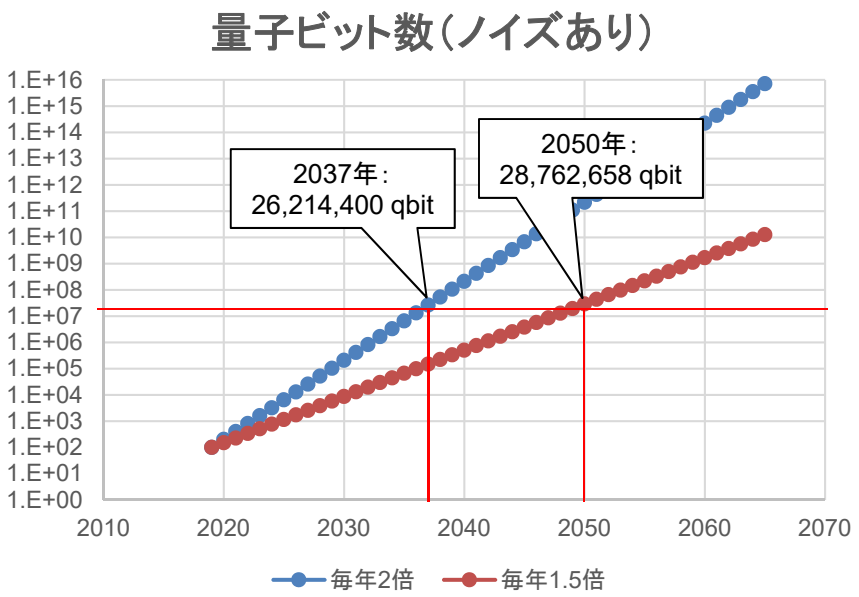
量子ビット数:**2000万**（※エラー有りで良い！）
計算時間:**8時間**（※量子ゲート数だと30億か？）

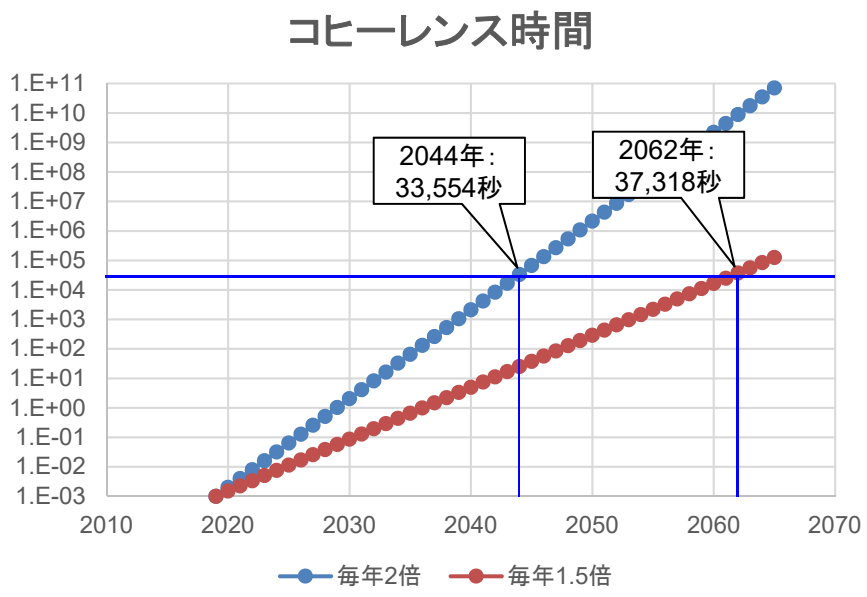
前頁比、量子ビット数は2桁減、計算時間は数分の1になっている。

- ノイズ（エラー）有りでも良い点は画期的。
- エラー有りとは言えまだ2000万量子ビットのハードルは高い。
- 問題は計算時間（コヒーレンス時間）かもしれない（現在はミリ秒）。

RSA 暗号を解くハードはいつ頃実現？

	2019年現在	RSA2048bitを解く為に必要な予想
量子ビット数	100 qbit	20,000,000 qbit（2000万）
コヒーレンス時間	0.001 sec	28,800 sec（8時間）





- ムーアの法則と異なり技術的な実現方式も変わるはずなのでそもそも無理筋な予想。
- 量子アルゴリズムの進歩で少ない量子ビットと時間で解ける可能性に注意が必要。
- NIST耐量子暗号標準化が2024年予定で普及に10年かかると2034年には移行完了。

2-7：エラー訂正問題

量子ゲート型の量子コンピュータの課題は、
量子ビット数を増やすこととエラー訂正である。

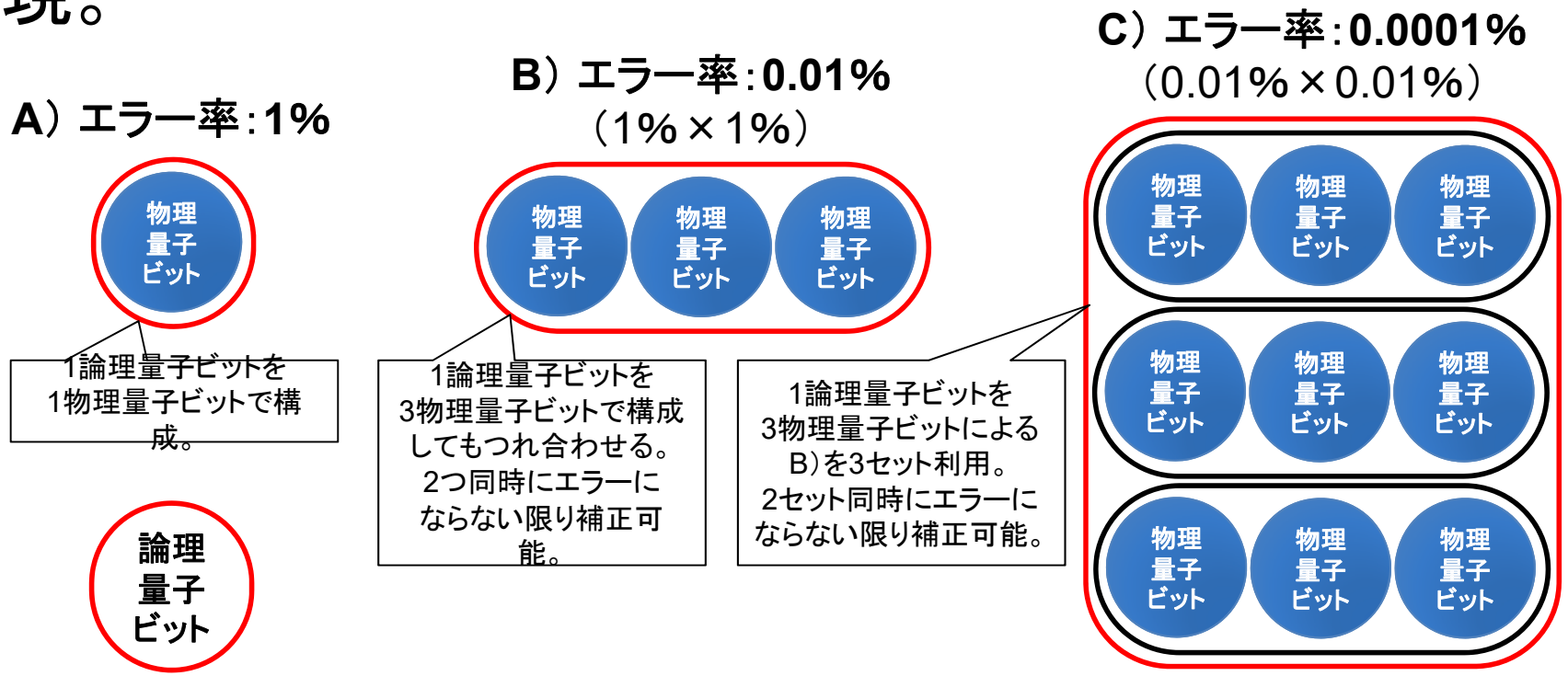
量子ビットエラー訂正の難しさ

古典計算での1ビットエラーは反転しかない。
0→1 になるか、1→0 になるかのどちらかのみ。
※もちろん古典計算でも複数ビットへの影響の可能性はある。

- **量子計算1ビットエラーはX/Y/Zの3種類がある。**
  - ビット反転 X(q) エラー
  - 位相ビット反転 Y(q) エラー
  - 位相反転 Z(q) エラー
- **量子計算の途中でエラー訂正する必要がある。**
  - 重ね合わせ状態の量子ビットを測定することなく訂正する。
  - ショアのエラー訂正アルゴリズム以前は不可能と言われた。

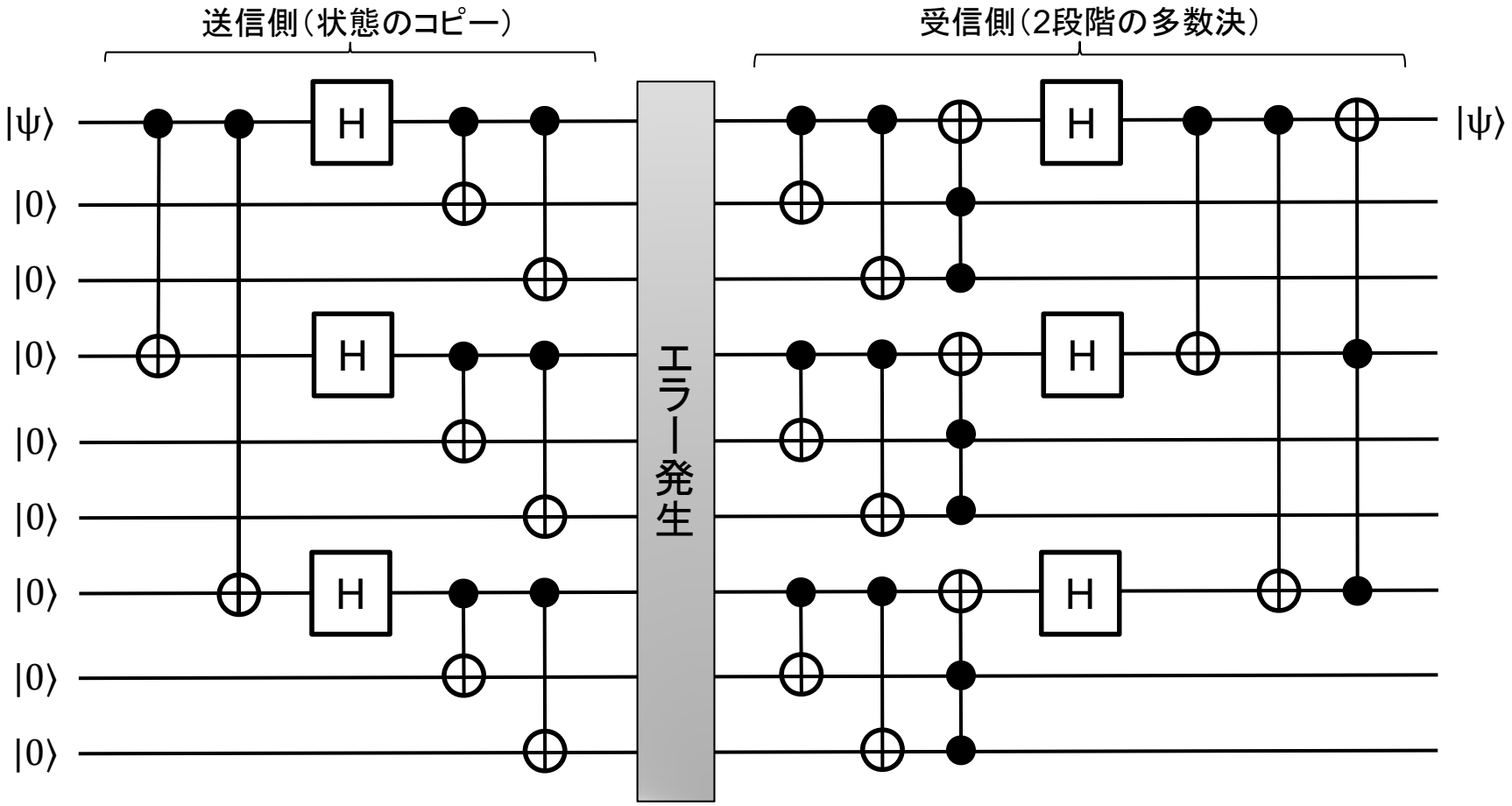
物理量子ビットと論理量子ビット

必要なのは量子計算に利用するエラー訂正された**論理**量子ビットである。**論理**量子ビットは複数の**物理**量子ビットを組み合わせてエラー訂正して実現。



量子ビット(ショア)のエラー訂正回路

ショアは量子パリティビットを導入して解決の道を示したが、
必要となる量子ビット数は増大する(この場合9量子ビットが必要)。



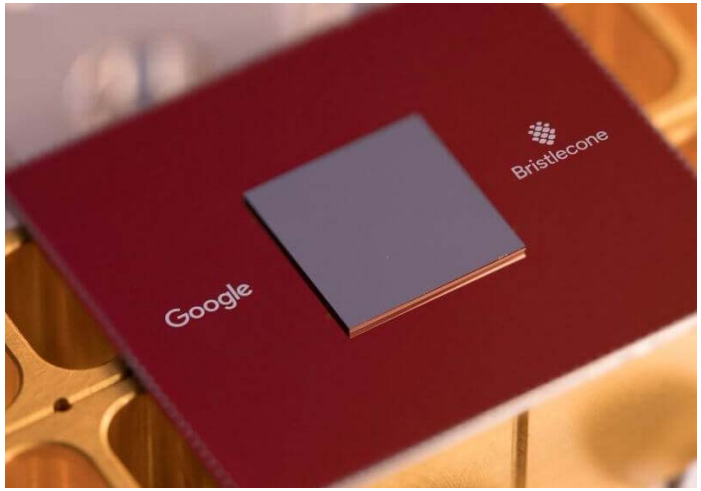
2-8：Cirq（Google）・Blueqat（MDR）

本資料ではGoogleのCirqを使って来たが少し
Cirqの補足説明をする。

また日本発の量子計算フレームワークとして
Blueqatが公開されており、簡単に紹介する。

Google 量子コンピュータへの取り組み

Googleは、2019年9月20日、
53量子ビット量子プロセッサ
Sycamore（シカモア）を使って
量子超越性を得たと発表。



2018年7月18日にはNISQ用の
フレームワーク Cirq を公開済み。

Sycamore は極低温の超伝導状態で動作するタイプの
量子計算用チップ。Googleは1チップにまとめることで
低エラーの達成と実用を目指す。

Sycamore 以外にイオントラップ方式のIonQにも投資中
（Amazonも投資）で、色々手を打っている。

cirq.Simulator の run と simulate

- cirq.Simulator.simulate(qc)
  - 重ね合わせ状態のまま、値を取得できる量子シミュレータ。
  - ノイズ無しの理論値（確率振幅）を取得できる。
  - 計算途中の重ね合わせ状態の確認時に利用する。
- cirq.Simulator.run(qc,...)
  - ノイズあり（NISQ用）の量子シミュレータ。
  - 観測しないと結果の取得はできない。

※ cirq.google.Bristlecone
  - おそらく実機 Bristlecone（72量子ビット）実行用

Blueqatを使う（MDR）

本来Blueqatはゲート型計算用のSDKですがアニーリング計算も可能。

環境：Anaconda3（Python3）

以下より環境に合わせてダウンロードとインストール

https://www.anaconda.com/distribution/

ライブラリ：Blueqat（ブルーキャット）

Windows版：Anaconda Prompt

MacOS版：ターミナル

インストール

```
pip install blueqat
```

バージョン指定インストール

```
pip install blueqat=0.3.9
```

アンインストール

```
pip uninstall blueqat
```

※ Blueqatのバージョン確認：

In:	import blueqat blueqat.__version__
Out:	'0.3.9‘

本資料のソースは 0.3.9 と表示される環境にて確認しています。

Blueqat 超入門（量子 Hello World!）

アダマールゲートHの実行

```
from blueqat import *
Circuit().h[0].m[:].run(shots=1000)
```

量子回路生成　アダマール　観測　実行（1000ショット）

同じ

実行結果：

```
Counter({'1': 488, '0': 512})
```

```
from blueqat import *
qc = Circuit(1)   # 1qbit指定
qc.h[0].m[:]      # 回路
r = qc.run(shots=1000) # 実行
print(r)          # 表示
```

複数ビット操作：

```
Circuit().z[1:3] # Z on 1,2
Circuit().x[:3]  # X on (0, 1, 2)
Circuit().h[:]   # H on all qubits
Circuit().x[1,2] # 1qubit gate
```

ローテーション操作：

```
Circuit().rz(math.pi/4)[0] # Z rotate pi/4
```

短い!

Blueqat 便利機能:ユニタリ行列表示

回路(ビット反転)指定してユニタリ行列を表示:

```
from blueqat import *
Circuit().x[0].run(backend="sympy_unitary")
```

実行結果(x[0]):

```
Matrix([
[0, 1],
[1, 0]])
```

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

実行結果(アダマール h[0]):

```
Matrix([
[1/sqrt(2),  1/sqrt(2)],
[1/sqrt(2), -sqrt(2)/2]])
```

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

表現が違うが値は正しい

回路(複数ゲート)指定してユニタリ行列を表示:

```
from blueqat import *
Circuit().h[0].x[0].h[0].run(backend="sympy_unitary")
```

実行結果(HXHなのでZゲートと同じ):

```
Matrix([
[1,  0],
[0, -1]])
```

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

複数ゲートでも
使えるので便利。

Blueqat で GPU を利用（QGATE）

インストール：要 Blueqat 0.3.9 以降

```
pip install numba
```

- numba（QGATE）を使った計算時間：run時のバックエンドで指定

```
from blueqat import Circuit
import numba
import time
start = time.time()
Circuit().h[20].x[:].y[:].z[:].h[:].h[:].h[:].run(backend='numba', shots=1000)
print(time.time() - start)
```

```
3.1740002632141113
```

※ Intel Core i7-6700 CPU @ 3.40GHz / NVIDIA GeForce GTX 950 - 4GB

- 比較の為に標準（GPU未使用）の計算時間：

```
from blueqat import Circuit
import time
start = time.time()
Circuit().h[20].x[:].y[:].z[:].h[:].h[:].h[:].run(shots=1000)
print(time.time() - start)
```

```
9.470999956130981
```

※ Intel Core i7-6700 CPU @ 3.40GHz / NVIDIA GeForce GTX 950 - 4GB

※ 非力なGPUでも3倍速い。高価なGPUボードなら桁違いに速いらしい。

2-9: 量子ゲート編 付録

付録1：Cirq/Qiskit/Blueqat対応表（基本編）

Gate	Cirq	Qiskit	Blueqat
恒等演算		iden	i
ビット反転演算	X	x	x
位相ビット反転演算	Y	y	y
位相反転演算	Z	z	z
アダマール演算	H	h	h
$\frac{\pi}{4}$位相シフト演算	S	s	s
$\frac{\pi}{8}$位相シフト演算	T	t	t
$-\frac{\pi}{4}$位相シフト演算	inverse(S)	sdg	sdg
$-\frac{\pi}{8}$位相シフト演算	inverse(T)	tdg	tdg
測定	measure	measure	m, measure
制御反転演算	CNOT	cx	cx, cnot
交換演算	SWAP	swap	swap
トフォリ演算	CCX, TOFFOLI	ccx	ccx, toffoli

付録2：Cirq/Qiskit/Blueqat対応表（拡張編）

Gate	Cirq	Qiskit	Blueqat
X軸任意回転演算	Rx	rx	rx
Y軸任意回転演算	Ry	ry	ry
Z軸任意回転演算	Rz	rz	rz
制御位相ビット反転演算		cy	
制御位相反転演算	CZ	cz	cz
トフォリ位相反転演算	CCZ		ccz
制御交換演算	CSWAP	cswap	
指定角λ演算		u1	u1
指定角φ,λ演算		u2	u2
指定角θ,φ,λ演算		u3	u3
制御指定角λ演算		cu1	cu1
制御指定角φ,λ演算		cu2	cu2
制御指定角θ,φ,λ演算		cu3	cu3
量子コンピュータ実機	Google（予定）	IBM	MDR（予定）

Part 3：量子アニーリング型のプログラミング

アニーリング計算にも数学的な考え方が必須。
ただし量子ゲート型と全く異なるプログラミングになりますので一度頭をリセットして読みましょう。

※ アニーリングは本来量子を使わない計算です。

組み合わせ最適化問題

様々な制約の下で多くの選択肢の中から、指標(コスト)を最も良くする結果(組み合わせ)を得る問題が、組み合わせ最適化問題。

例:巡回セールスマン問題

複数都市を1回ずつ訪問するセールスマンの最適(最短距離)な巡回順番を求める問題。
各都市間の距離がコストとして与えられる。

組み合わせ爆発

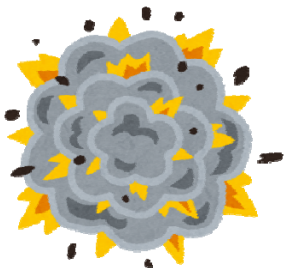
巡回セールスマン問題において、n 都市を巡回する経路の全組み合わせは $(n-1)!$ 個あるが、逆方向は同じとして半分の $(n-1)!/2$ 個となる。

$$n! = n \times (n-1) \times (n-2) \times (n-3) \times \ldots \times 2 \times 1$$

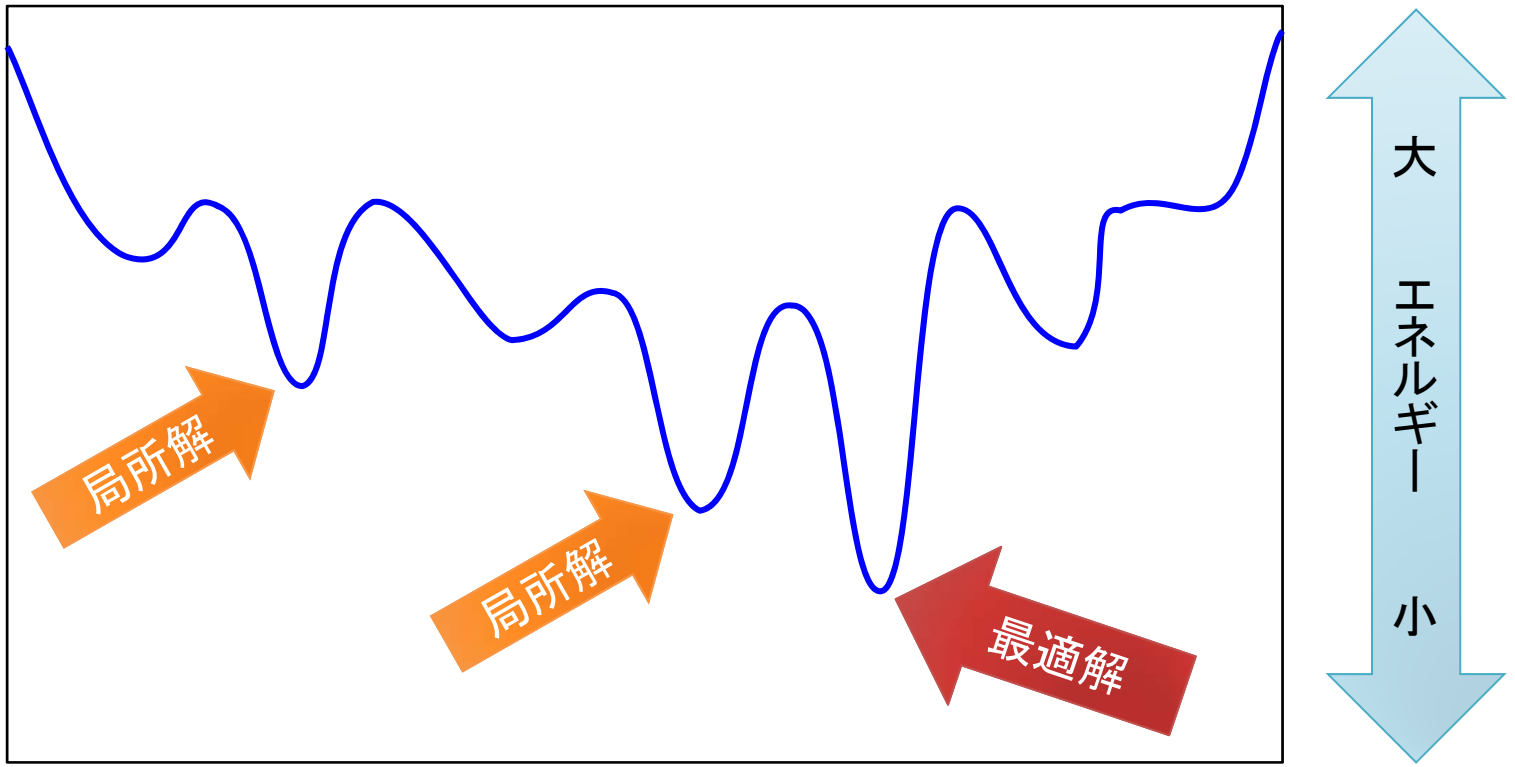
4都市だと $(4-1)\times(3-1)\div 2=3$ 通り、
20都市では 6.0×10^{16} 通り、
40都市では 1.0×10^{46} 通りとなり、
組み合わせ数が爆発的に増加する。

都市数	経路数
4	3
5	12
:	:
20	6.0E16
40	1.0E46
80	4.5E116

$(n-1)!/2 =$



最適解と局所解

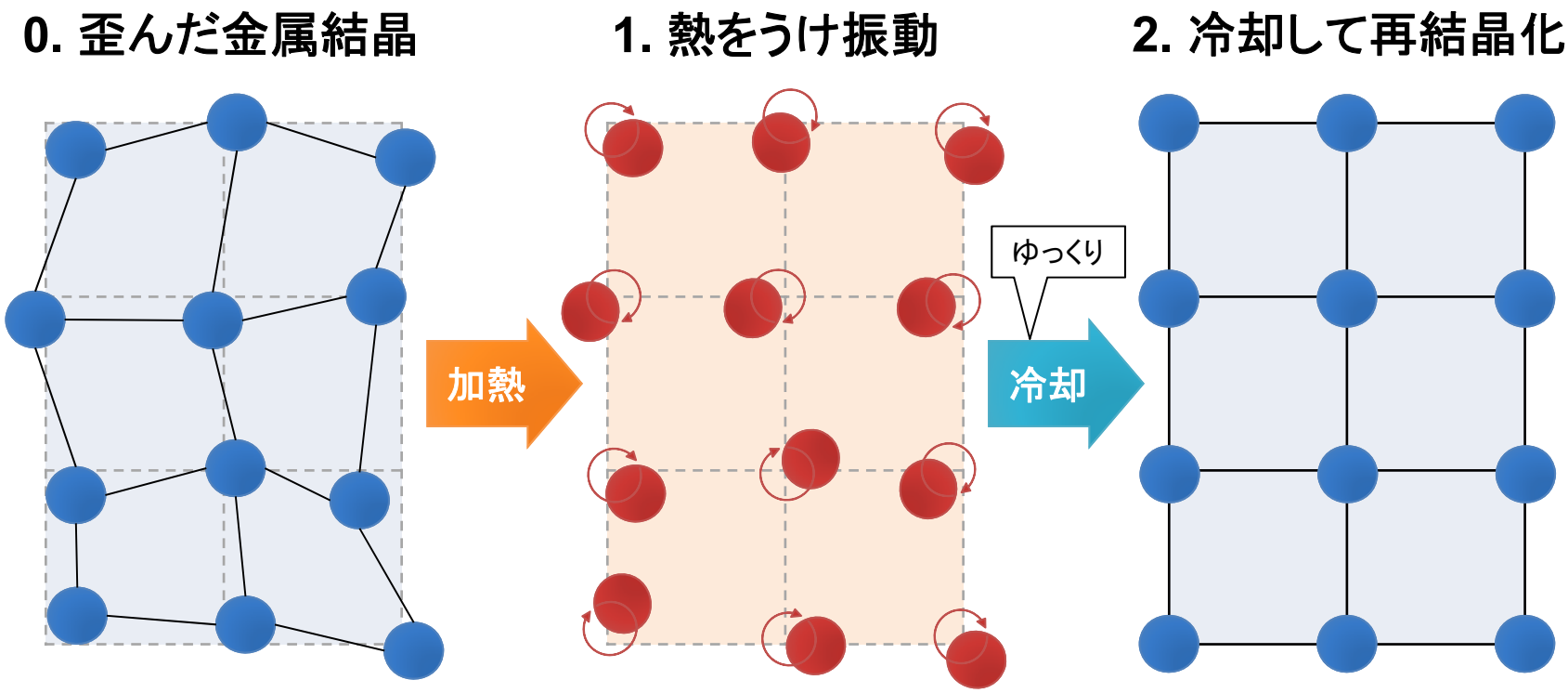


最適解：最も条件を満たした解。上例では最小エネルギーの箇所。
局所解：局所的に最も条件を満たした解。他に最適解がある。

※ 問題によっては局所解で良い場合もある。
※ アニーリング計算で必ず最適解が出るわけでもない。

アニーリング（Annealing）：焼きなまし

焼きなましは、金属材料を加熱後に徐々に冷やすことで、原子の**内部エネルギーが極小になる**状態（欠陥が減る）を得る手法。急冷すると焼き入れになってしまい揃わない。



アニーリング計算

ソフトウェアによりアニーリング（焼きなまし）の状態変化をシミュレーションすることで、エネルギーが最も低い最適解を得る方法がアニーリング計算。

※ 問題に合わせて事前に初期設定（QUBO等）が必要。

- **シミュレーテッドアニーリング（SA）法**
  古典計算によりアニーリング計算を行う（非量子）。
- **量子アニーリング法**
  量子マシン（シミュレータ）によりアニーリング計算を行う。

※ 最近ではシミュレーテッド分岐（SB）法も出てきている。

3-1：ハミルトニアンとQUBO

アニーリングではハミルトニアン（全エネルギー）を最小化（or最大化）する計算を行います。

まずバイナリ変数を使った上三角QUBO行列を用意して入力します。

ハミルトニアン（Hamiltonian）

ハミルトニアンとは、物理学における**エネルギー**に対応する**物理量**である。

※ ある状態にある時の全エネルギーと言っても良い。

古典力学：Hをハミルトニアン、Tを運動エネルギー、Vをポテンシャルエネルギー（例：位置エネルギー）として、全エネルギーを、$\boldsymbol{H = H(q, p; t) = T + V}$（一般化座標=$q$ / 一般化運動量=p / 時間=t ）、によって表した関数となる。

量子力学：ハミルトニアンは、系の全エネルギーを表す演算子として示される。Hをハミルトニアン行列、Eをエネルギー固有値とした場合に、時間発展しないシュレディンガー方程式を使い、$\boldsymbol{H\varphi(x) = E\varphi(x)}$ の固有値問題として表すことができる。

ハミルトニアンの計算例（総当たり計算）

例題：以下ハミルトニアン式が最小値を取る x_1 と x_2 を求めよ。

$$H = 4x_1^2 - 2x_2^2 + 2$$

※ x_1 と x_2 は 0 or 1 のバイナリ変数

計算：ここでは全てのケースの計算表を作成して確認。

x_1	x_2	H
0	0	2
0	1	0
1	0	6
1	1	4

アニーリングで計算することが最終目標ですが、
ここでは計算をイメージする為に手計算します。

$(x_1, x_2) = (0, 1)$ の時に、
最小値 $H = 0$ となっている。

答：$x_1 = 0$ と $x_2 = 1$ の時に最小値 $H = 0$（最適解）となる。

Blueqat でアニーリング計算（Wildqat）

Wildqat：アニーリング計算用のSDK（MDR社）
https://github.com/Blueqat/Wildqat

現在は**Blueqat**に組み込まれている。

```
from blueqat import opt     # Wildqatの機能
```

ドキュメント（日本語）：
https://wildqat.readthedocs.io/ja/latest/

- QUBOによるアニーリング計算が可能。
- D-Wave への接続も可能。

QUBOによるハミルトニアン計算

例題：以下ハミルトニアン式のQUBO行列から解を求めよ。

$$H = 4x_1^2 - 2x_2^2 + 2$$

x_1 と x_2 の2次式なので
QUBO行列が計算可能

※ x_1 と x_2 は 0 or 1 のバイナリ変数

全体にかかる係数
や倍数は省略可能

$$= \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}}_{\text{QUBO行列}} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} + 2$$

Blueqatによるアニーリング計算

計算：

```
from blueqat import opt                    # Wildqatのオプションインポート
q = opt.Opt().add([[4,0],[0,-2]])          # QUBO行列（２次元配列）のセット
print(q.run())                             # アニーリング計算の実行と表示
```

```
[0, 1]
```

総当たりの計算結果と同じ

答：$x_1 = 0$ と $x_2 = 1$ の時に最小値（最適解）となる。

QUBO によるアニーリング計算

QUBO: Quadratic Unconstrained Binary Optimization
（2次制約なし2値最適化）

QUBO化可能なハミルトニアン式の条件：

- バイナリ変数：変数が取る値は0または1のみ
- 2次式：変数の最高次数が2である多項式

※ 多項式：「＋」または「－」の記号によって2つ以上の項を結びつけた式。

○ 可能	$H = A^2 + 2AB + B^2 + 1$	$H = A + 2AB - 4BC + C - 2$
× 不可	$H = A^3 + 2A^2B + B + 1$	$H = 2A^4 - 3A^2 + B^3 - 4$

- 2体問題：1つの項が2変数間の関係まで

※ ただし多体問題を制約により2体問題に変換できれば計算可能となる（後述）。

○ 可能	$H = A^2 + 2AB + B + 1$	$H = A + 2AB - 4CD + 3BE$
× 不可	$H = A^2 - ABC + BC + 1$	$H = 2BCE - ABCD - 4$

ハミルトニアン式とQUBOの一般化

1．2体問題の一般式として以下が成り立つ。

$$H = \sum_{i,j} Q_{ij} x_i x_j$$

2．以下変換により（上）三角行列化できる。

$$Q'_{ij} = \begin{cases} Q_{ij} + Q_{ji} & (i < j) \\ Q_{ij} & (i = j) \\ 0 & (i > j) \end{cases}$$

3．上三角行列化により一般化されたQUBOの式。

$$H = \sum_{i<j} Q_{ij} x_i x_j + \sum_{i} Q_{ii} x_i$$

QUBO の上三角行列化

重要!

1. 2体問題の一般式

$$H = \sum_{i,j} Q_{ij} x_i x_j$$

4×4の場合

$Q_{00}x_0x_0$	$Q_{01}x_0x_1$	$Q_{02}x_0x_2$	$Q_{03}x_0x_3$
$Q_{10}x_1x_0$	$Q_{11}x_1x_1$	$Q_{12}x_1x_2$	$Q_{13}x_1x_3$
$Q_{20}x_2x_0$	$Q_{21}x_2x_1$	$Q_{22}x_2x_2$	$Q_{23}x_2x_3$
$Q_{30}x_3x_0$	$Q_{31}x_3x_1$	$Q_{32}x_3x_2$	$Q_{33}x_3x_3$

2. 変換

$$Q'_{ij} = \begin{cases} Q_{ij} + Q_{ji} & (i < j) \\ Q_{ij} & (i = j) \\ 0 & (i > j) \end{cases}$$

$Q'_{ij} = Q_{ij} + Q_{ji}$ $\quad x_i = x_i^2$

$$H = \sum_{i<j} Q'_{ij} x_i x_j + \sum_i Q_{ii} x_i^2$$

$x_i x_j = x_j x_i$

$Q_{00}x_0^2$	$(Q_{01}+Q_{10})x_0x_1$	$(Q_{02}+Q_{20})x_0x_2$	$(Q_{03}+Q_{30})x_0x_3$
0	$Q_{11}x_1^2$	$(Q_{12}+Q_{21})x_1x_2$	$(Q_{13}+Q_{31})x_1x_3$
0	0	$Q_{22}x_2^2$	$(Q_{23}+Q_{32})x_2x_3$
0	0	0	$Q_{33}x_3^2$

3. 上三角行列に一般化化されたQUBO。

QUBOを使った計算例

例題：以下式をハミルトニアン式とQUBO行列を作成して解け。

$$x_1 + x_2 = 1$$ （※ x_1 と x_2 は 0 or 1 のバイナリ変数）

ハミルトニアン式：条件を満たす時に0（最小値）になるようにする。

$$H = (1 - (x_1 + x_2))^2$$

定式化

$$= -x_1^2 - x_2^2 + 2x_1x_2 + 1$$

変換詳細は次頁

QUBO行列による式：

$$H = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

条件を満たしたハミルトニアン式はQUBO化できる

計算：

```
from blueqat import opt                 # Wildqatのオプション
q = opt.Opt().add([[-1,2],[0,-1]])      # QUBOのセット
print(q.run(shots=8))                   # アニーリング計算を8回実行
```

```
[[1, 0], [0, 1], [0, 1], [1, 0], [1, 0], [0, 1], [1, 0], [0, 1]]
```

(x_1, x_2) が $(0,1)$ と $(1,0)$ の確率50%で発生している

参考:前頁ハミルトニアン式の変形

$$H = (1 - (x_1 + x_2))^2$$
$$= 1 - 2(x_1 + x_2) + (x_1 + x_2)^2$$
$$= 1 - 2x_1 - 2x_2 + x_1^2 + x_2^2 + 2x_1x_2$$
$$= 1 - 2x_1^2 - 2x_2^2 + x_1^2 + x_2^2 + 2x_1x_2$$
$$= -x_1^2 - x_2^2 + 2x_1x_2 + 1$$

バイナリ変数なので
1乗＝2乗（$0^2=0$, $1^2=1$）
とできるので、
$2x_1 = 2x_1^2$ / $2x_2 = 2x_2^2$

※ 変数が4つの場合の例:

$$H = (1 - (x_1 + x_2 + x_3 + x_4))^2$$
$$= 1 - 2(x_1 + x_2 + x_3 + x_4) + (x_1 + x_2 + x_3 + x_4)^2$$
$$= 1 - 2x_1 - 2x_2 - 2x_3 - 2x_4 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2$$
$$+2x_1x_2 + 2x_1x_3 + 2x_1x_4 + 2x_2x_3 + 2x_2x_4 + 2x_3x_4 + 1$$
$$= 1 - 2x_1^2 - 2x_2^2 - 2x_3^2 - 2x_4^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2$$
$$+2x_1x_2 + 2x_1x_3 + 2x_1x_4 + 2x_2x_3 + 2x_2x_4 + 2x_3x_4 + 1$$
$$= -x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 - x_4^2$$
$$+2x_1x_2 + 2x_1x_3 + 2x_1x_4 + 2x_2x_3 + 2x_2x_4 + 2x_3x_4 + 1$$

参考:前頁ハミルトニアン式のQUBO

$$H = (1 - (x_1 + x_2))^2$$

$$\text{QUBO} = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$H = (1 - (x_1 + x_2 + x_3))^2$$

$$\text{QUBO} = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$H = (1 - (x_1 + x_2 + x_3 + x_4))^2$$

$$\text{QUBO} = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$x_1 x_2 x_3 x_4$
のうち1つだけ
1になるQUBO

ハミルトニアンとQUBOのまとめ

- ハミルトニアンは全エネルギーを示す。
- ハミルトニアン式からQUBO行列を得ることができる。
  変数は0か1のバイナリ変数となる。

  実はバイナリ変数なので1乗＝2乗（$0^2=0$, $1^2=1$）とできる。

  例: $\boldsymbol{H = 5x^2 - 2x + 2}$

  $\boldsymbol{= 5x^2 - 2x^2 + 2 = 3x^2 + 2}$

重要!

- QUBOモデルは以下の式に一般化できる。

$$H = \sum_{i<j} Q_{ij} x_i x_j + \sum_i Q_{ii} x_i$$

内部でイジングモデルへの変換が必要（後述）

- QUBO行列で最小値状態をアニーリング計算可能。

Ocean SDKを使う（D-Wave）

環境：**Anaconda3**（**Python3**）

以下より環境に合わせてダウンロードとインストール

https://www.anaconda.com/distribution/

ライブラリ：**D-Wave Ocean**（オーシャン）

Windows版：Anaconda Prompt

MacOS版：ターミナル

インストール

```
pip install dwave-ocean-sdk
```

アンインストール

```
pip uninstall dwave-ocean-sdk
```

バージョン確認

```
pip show dwave-ocean-sdk
```

※ Oceanのバージョン：
本資料のソースは
Version: 1.4.0
環境にて確認しています。

Ocean：QUBOで最適化問題を解く

例題：以下式をハミルトニアン式とQUBO行列を作成して解け。

$$x_1 + x_2 = 1 \qquad H = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + 1$$

オフセット値

Oceanのdimod（SAシミュレーテッドアニーリング）による計算：

```
from dimod import *                                          # dimodインポート
Q = {(0, 0):-1, (0, 1):2, (1, 1):-1}                         # QUBO行列(dict)
b = BinaryQuadraticModel.from_qubo(Q, 1.0)                   # QUBO設定(オフセット値は1)
r = SimulatedAnnealingSampler().sample(b, num_reads=8)       # SAを8回実行
print(r)                                                     # 結果表示
```

省略時：10回

```
   0  1 energy num_oc.
0  0  1    0.0       1
2  1  0    0.0       1
3  1  0    0.0       1
4  0  1    0.0       1
5  0  1    0.0       1
6  0  1    0.0       1
7  0  1    0.0       1
1  1  1    1.0       1
['BINARY', 8 rows, 8 samples, 2 variables]
```

エネルギーの低い順に出力される
$E = 0.0$ の時は $(0,1)$ と $(1,0)$ が
ほぼ確率50%で発生している
1回目の $(1,1)$ 等では $E = 1.0$

3-2：イジングモデル

イジングモデルとは2つの状態を持つ格子点の近接点同士の相互作用を考慮する格子モデル。

アニーリング計算はイジングモデルにより最小のハミルトニアン状態を得る計算方式である。

イジング(Ising)モデル

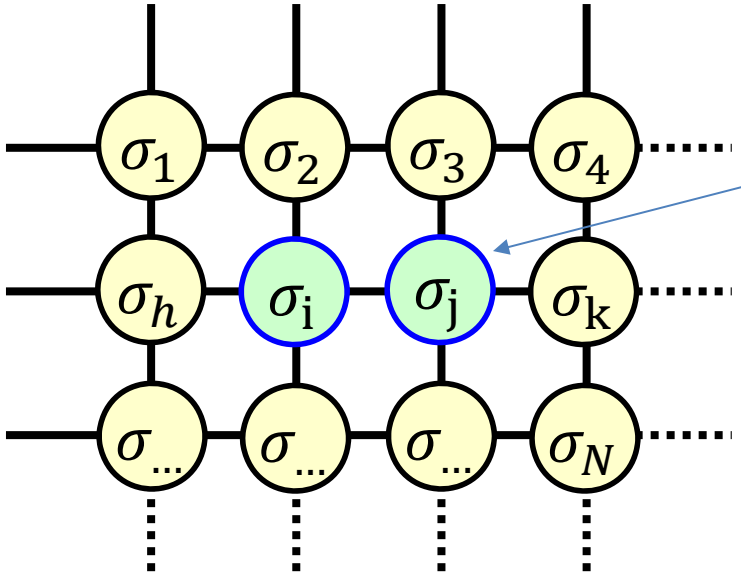
磁性体ではイジング変数はイジングスピンとなる。

イジング変数 σ：+1 または −1 のどちらかの値を取る。
イジングモデル：複数のイジング変数で構成するモデル。

$$\boldsymbol{\sigma_i = \pm 1 \quad (i = 1, 2, 3, \ldots, N)}$$

σ：シグマ

格子上にイジング変数を配置した2次元イジングモデル：



各 σ_i の持つエネルギーは $-h_i\sigma_i$ である。

左図において隣あった i と j は
最接近格子点である。

格子点間には相互作用がある2次元モデル。
I と j は積 $\sigma_i\sigma_j$ が相互作用を示す。
相互作用エネルギーは $-J_{ij}\sigma_i\sigma_j$ となる。

※ なお h_i と J_{ij} はそれぞれ定数(パラメータ)。

イジングモデルの次元

1次元イジングモデル：隣合った間の相互作用

$$H = -\sum_i J_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \sum_i h_i \sigma_i$$

2次元イジングモデル：2体間の相互作用

$$H = -\sum_{i<j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i$$

アニーリング計算では任意の2体間の相互作用を扱う**2次元イジングモデル**となる。

※ 3体間以上の問題には適用できない（QUBOモデルと同じ）。

2次元イジングモデルのハミルトニアン

イジング変数 $\sigma_i = \pm 1$ （$i = 1,2,3,\ldots,N$）の時、
イジングモデルのハミルトニアン（全エネルギー）は、
以下の式で求められる。

$$H = -\sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i\sigma_i$$

最小化と最大化は方向（符号）が異なるだけなので以下と書ける。

全エネルギー

$$\boldsymbol{H = \sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum_i h_i\sigma_i}$$

QUBOモデルの
ハミルトン式と
同じになった！

自分自身への相互作用は
無いので $i \neq j$ である。
また ij と ji は同じなので
$i < j$ として重複を避ける。

相互作用エネルギー
（2体間のエネルギー）

局所磁場エネルギー
（1体にかかるエネルギー）

※ J_{ij} と h_i は係数（パラメータ）。

QUBOモデルとイジングモデル

重要!

QUBOモデル: x は 0 or 1 のバイナリ変数

$$H = \sum_{i<j} Q_{ij} x_i x_j + \sum_i Q_{ii} x_i$$

イジングモデル: σ は －1 or ＋1のどちらかの値

$$H = \sum_{i<j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_i h_i \sigma_i$$

違いは変数が 0/1 か -1/+1 かだけ、以下変換式で変換が可能。

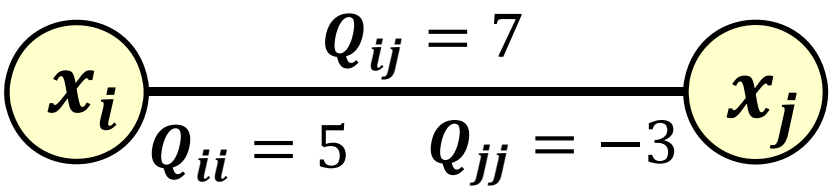
$$x_i = \frac{\sigma_i + 1}{2} \quad (x = 0 \text{ なら } \sigma = -1 \,/\, x = 1 \text{ なら } \sigma = +1)$$

ゆえにQUBOモデルとイジングモデルは相互変換が可能である。

係数（coefficient）

モデル	1次係数 （Linear Coefficient）	2次係数 （Quadratic Coefficient）	変数 （Variable）
QUBO	Q_{ii}	Q_{ij}	x_i (Binary:0/1)
イジング	h_i	J_{ij}	σ_i (Spin:−1/+1)

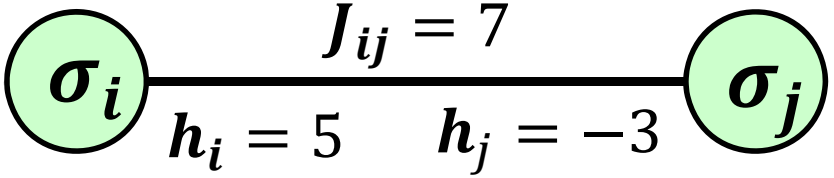
QUBO例：$H = 5x_i + 7x_ix_j - 3x_j$



$Q_{ii} = 5$	$Q_{ij} = 7$
0	$Q_{jj} = -3$

意味は異なる

イジング例：$h = 5\sigma_i - 3\sigma_j$ ，$J = 7\sigma_i\sigma_j$



$h_i = 5$	$J_{ij} = 7$
0	$h_j = -3$

イジングマシン

※ イジングマシンはイジングモデルを解くシステム。

シミュレーテッド アニーリング（SA）	既存コンピュータ上のシミュレータ（遅い）	古典汎用機による計算
量子アニーリングマシン	量子イジング専用機 （実機により実証実験中）	D-Wave NEC 等
量子ゲート型コンピュータ	量子断熱計算 （計算可能だが小規模）	IBM Q Google 等
半導体アニーリングマシン	既存技術で高速化 （実機により実証実験中）	富士通 日立
コヒーレントイジングマシン （光量子コンピュータ）	光子を使った計算 （実装に向けた実験中）	東大・NTT・NII
シミュレーテッド分岐（SB） SBM: Simulated Bifurcation Machine	並列計算可能マシン （GPU利用やFPGA化も可）	東芝デジタルソリューションズ

3-3：グラフ理論

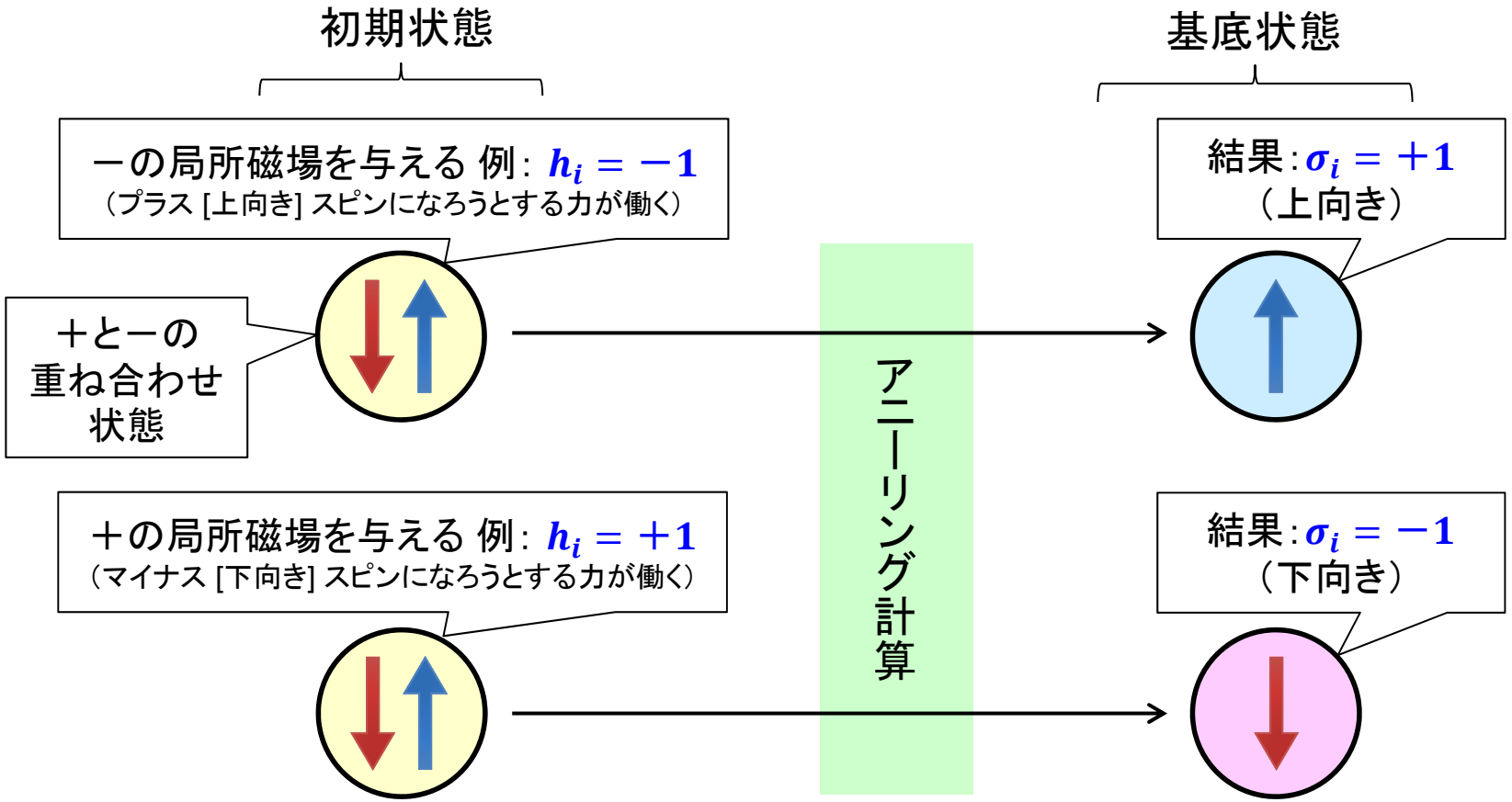
QUBOモデルやイジングモデルを使って問題を解く為に問題をグラフ化する。

グラフは、ノード（スピンや量子ビット）と、エッジ（2点間の相互作用）で構成される。

スピンの局所磁場（1体のみ影響する係数）

$$H = \sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum_i h_i\sigma_i$$

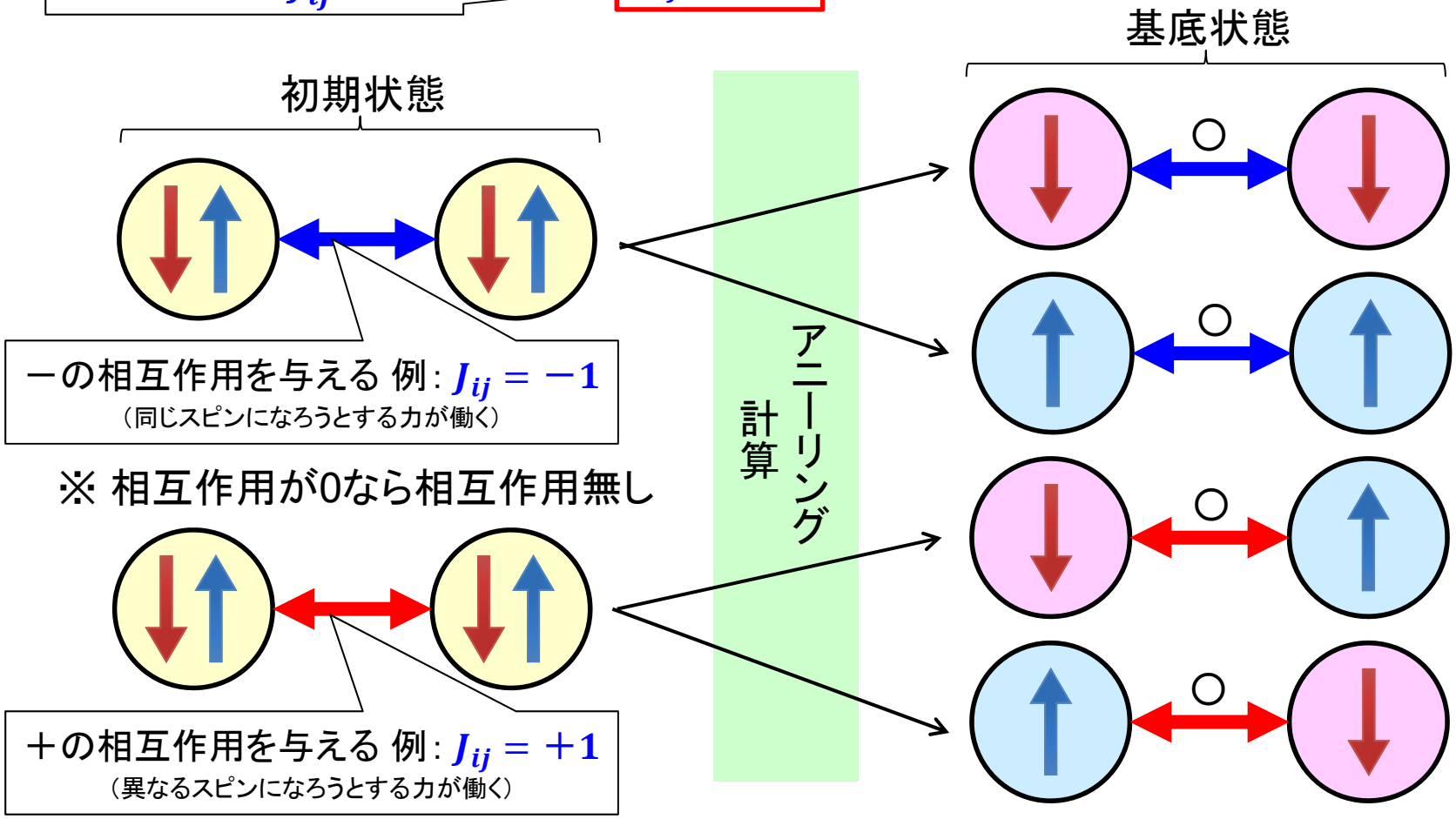
この部分の h_i 係数



2スピンの相互作用（2体間の係数）

$$H = \sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum_i h_i\sigma_i$$

この部分の J_{ij} 係数



イジング(Ising)で2スピン相互作用を解く

例題:2スピン間の相互作用がプラス(反発)の時の結果を得る。

$$h_0 = 0, h_1 = 0 \ / \ J_{01} = 1, (J_{10} = 0)$$

$h_0 = 0$	$J_{01} = 1$
0	$h_1 = 0$

Oceanのdimod(SA シミュレーテッドアニーリング)による計算:

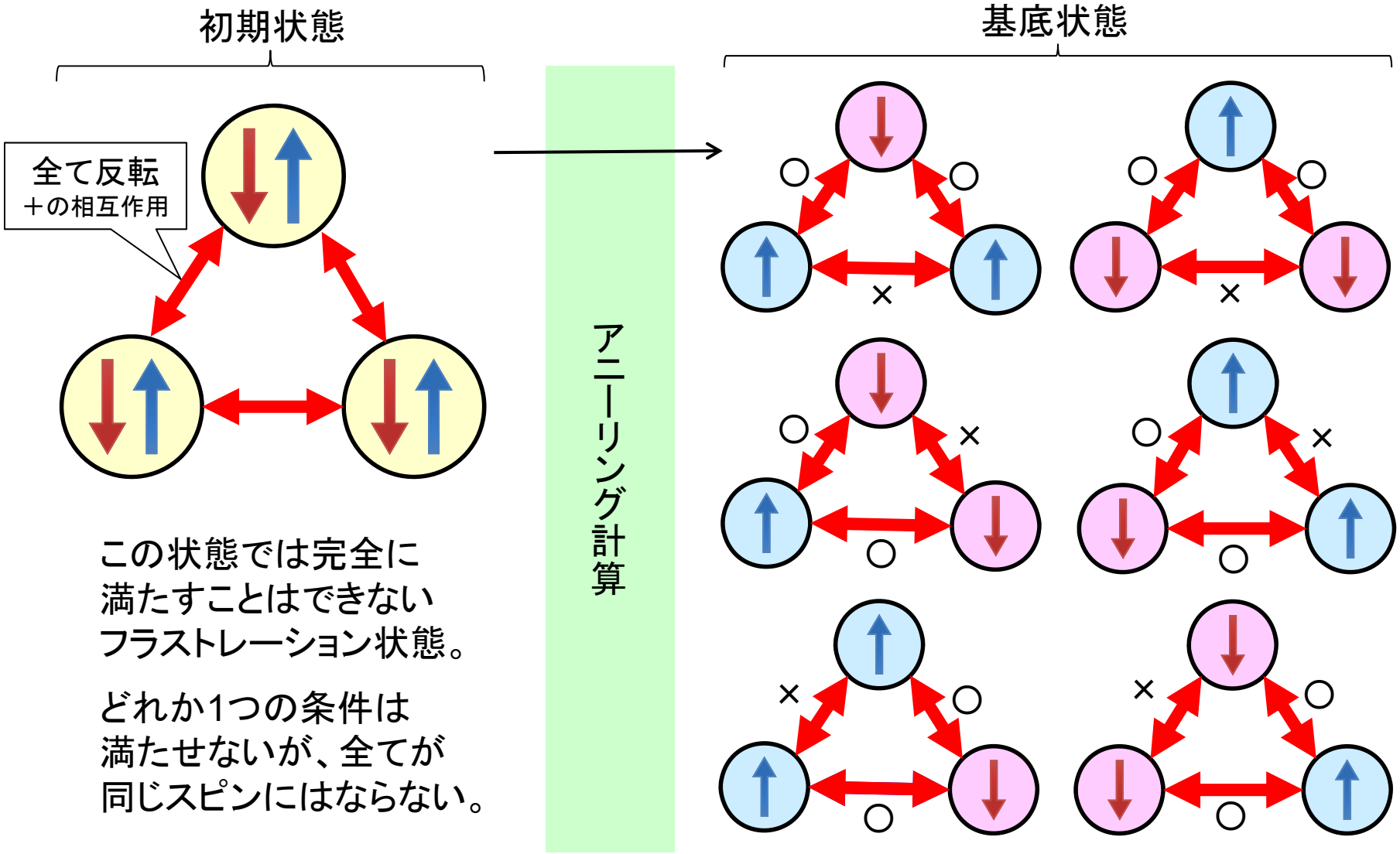
```
from dimod import *                                          # dimodインポート
h = {0:0, 1:0}                                               # h1/h2の設定、空辞書 {} も可
J = {(0, 1): 1}                                              # J12をマイナスに設定
b = BinaryQuadraticModel.from_ising(h, J, 0.0)               # Ising設定(オフセット値は0)
r = SimulatedAnnealingSampler().sample(b, num_reads=8)       # SAを8回実行
print(r)
```

Isingでセットする場合は h と J と offset を与える

```
   0  1 energy num_oc.
0 -1 +1   -1.0       1
1 +1 -1   -1.0       1
2 +1 -1   -1.0       1
3 +1 -1   -1.0       1
4 -1 +1   -1.0       1
5 -1 +1   -1.0       1
6 -1 +1   -1.0       1
7 +1 -1   -1.0       1
['SPIN', 8 rows, 8 samples, 2 variables]
```

−1 と +1 か、+1 と −1 のいずれか同じ値にはならい

3スピン(2体間)のフラストレーション



イジング(Ising)で3スピン相互作用を解く

例題：3スピン間の各相互作用がプラス(反発)の時の結果を得る。

$$h_0 = h_1 = h_2 = 0 \ / \ J_{01} = J_{02} = J_{12} = 1$$

$h_0 = 0$	$J_{01} = 1$	$J_{02} = 1$
0	$h_1 = 0$	$J_{12} = 1$
0	0	$h_2 = 0$

Oceanのdimod（SAシミュレーテッドアニーリング）による計算：

```
from dimod import *                                          # dimodインポート
h = {}                                                       # h1/h2/h3の設定
J = {(0, 1): 1, (0, 2): 1, (1, 2): 1}                        # J12/J13/J23をマイナスに設定
b = BinaryQuadraticModel.from_ising(h, J, 0.0)               # Ising設定(オフセット値は0)
r = SimulatedAnnealingSampler().sample(b, num_reads=8)       # SAを8回実行
print(r)                                                     # 結果表示
```

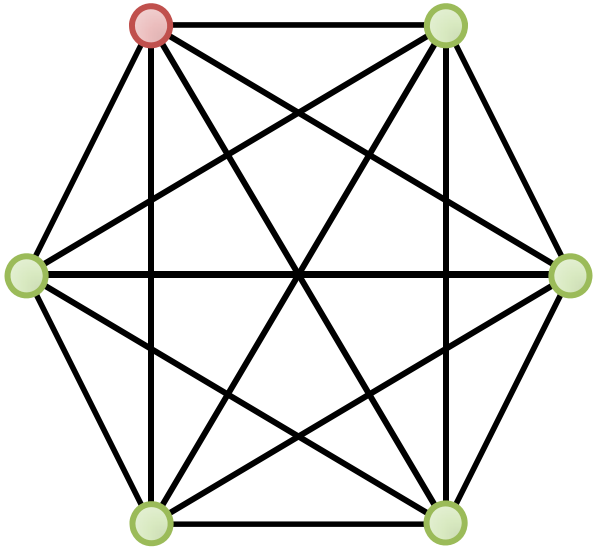
```
   0  1  2 energy num_oc.
0 -1 +1 -1   -1.0       1
1 -1 +1 -1   -1.0       1
2 +1 +1 -1   -1.0       1
3 -1 +1 +1   -1.0       1
4 +1 -1 -1   -1.0       1
5 +1 -1 -1   -1.0       1
6 +1 -1 -1   -1.0       1
7 +1 +1 -1   -1.0       1
['SPIN', 8 rows, 8 samples, 3 variables]
```

実行をする度に結果が異なっているが、
どれか1つが反転する結果となっていて、
全て −1 と +1 の組み合わせは無い

理想的な結合方式:完全グラフ

重要!

6スピンの完全グラフ



11	12	13	14	15	16
21	22	23	24	25	26
31	32	33	34	35	36
41	42	43	44	45	46
51	52	53	54	55	56
61	62	63	64	65	66

完全グラフ:全スピン間を結合する。

左例は6スピンだがこの関係を示す為
6×6の行列(下図)が必要となる。
スピン数が増えると量子コンピュータの
接続数が増える為に難易度が高くなる。

接続方向性は無いので12と21の接続が
同じとなる為に、下三角行列 $Q_{ij}(i > j)$
の部分は使われない。

上三角行列が $Q_{ij}(i < j)$ を示す。

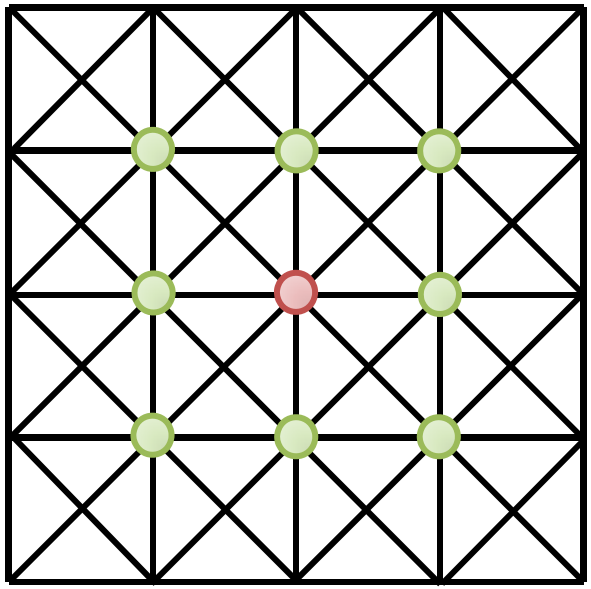
対角 11、22…等が $Q_{ij}(i = j)$ を示す。

※ 完全グラフはQUBO/イジングモデルの利用が容易。

キンググラフとキメラグラフ

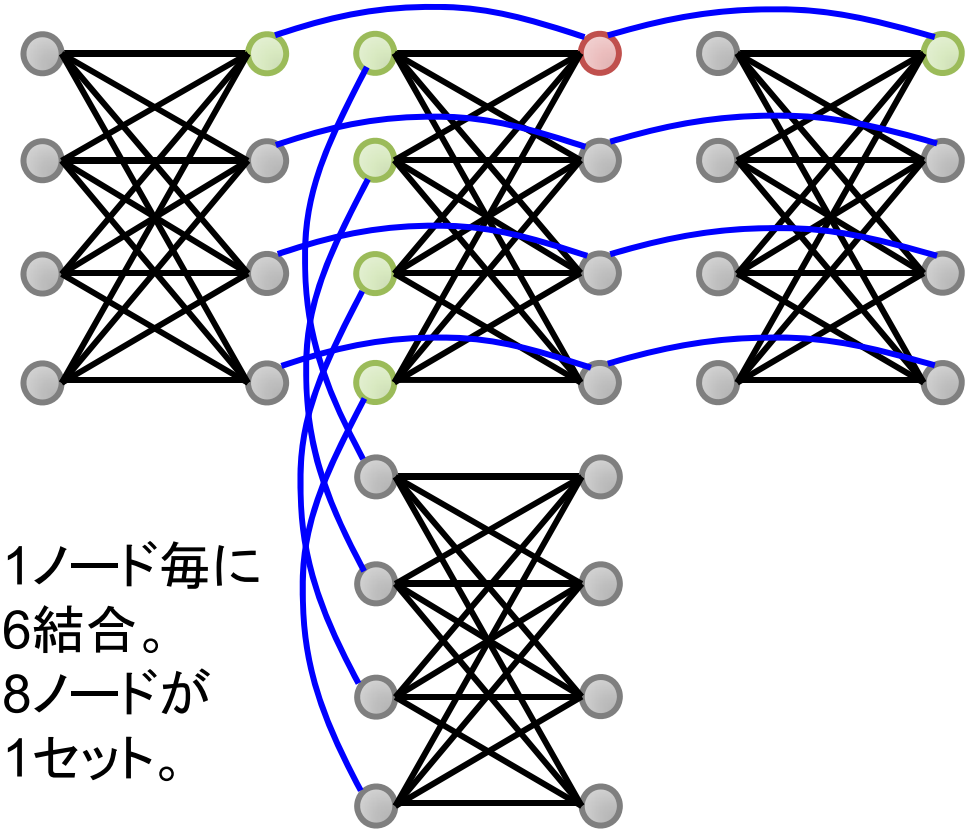
完全グラフの実現が困難 or 問題に依存。

キンググラフ



1ノード毎に8結合。
チェスのキングの動きと同じ
縦横斜めの隣のスピンへの
接続がされている。

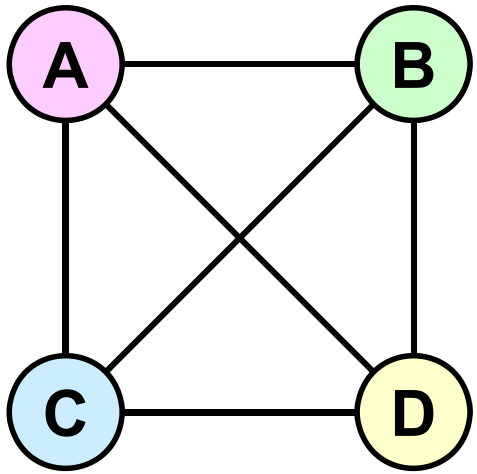
キメラグラフ

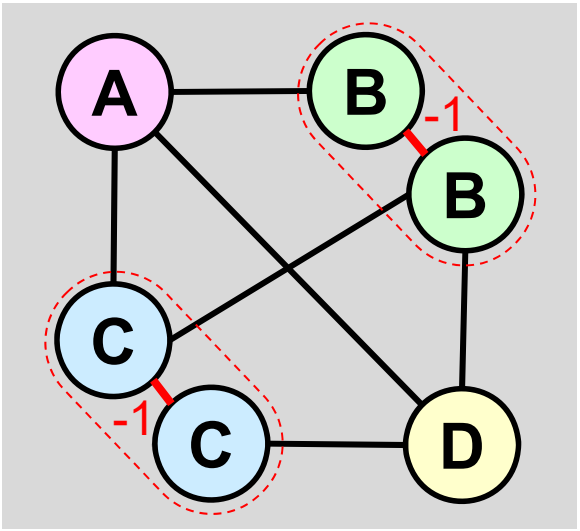


1ノード毎に
6結合。
8ノードが
1セット。

キメラグラフから完全グラフへの変換

4スピンの完全グラフ（理想）

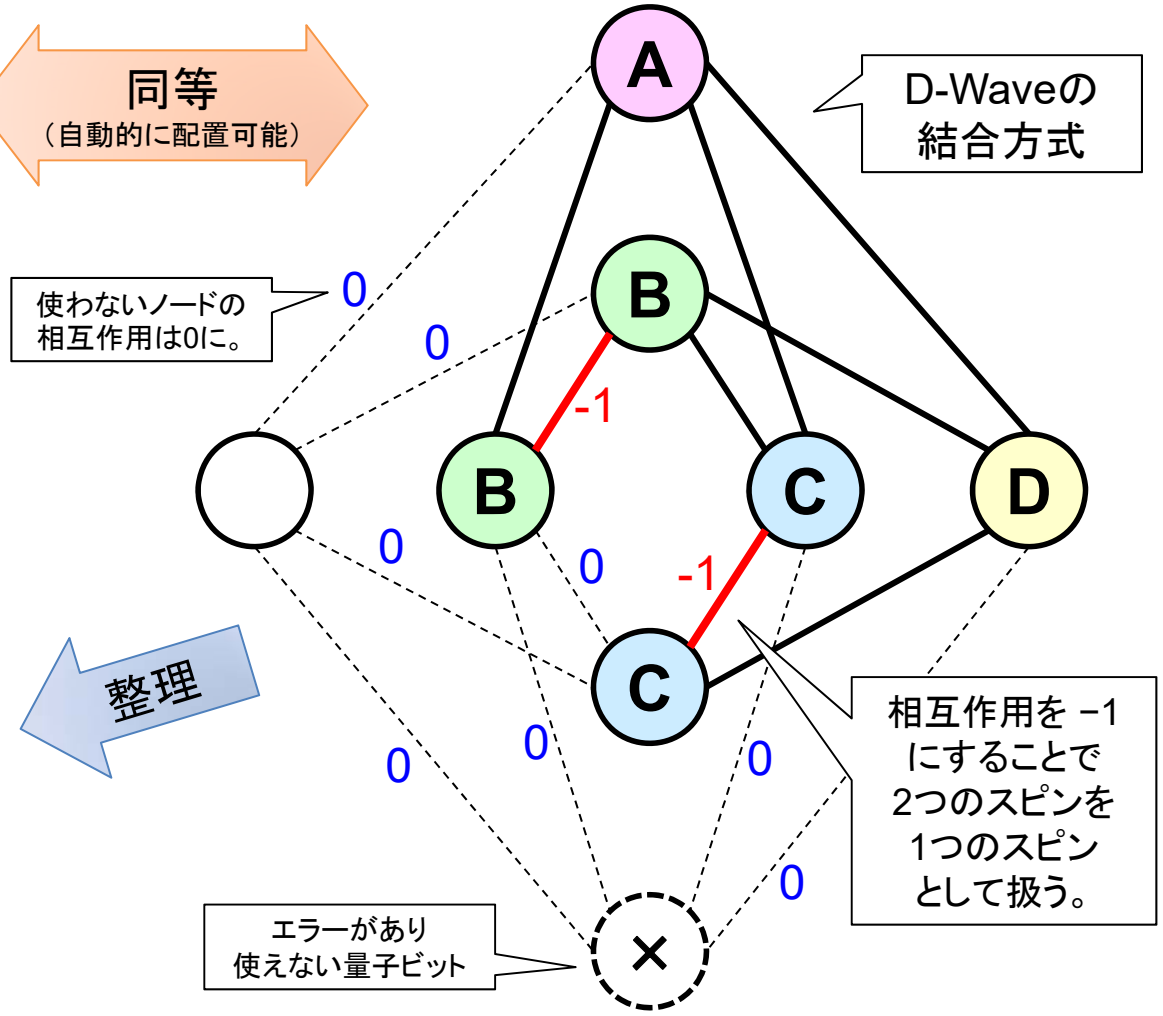




同等
（自動的に配置可能）

整理

4スピンの完全グラフと
同等のキメラグラフ



2019年現在の主なイジングマシン比較

	D-Wave 2000Q	日立 CMOSアニーラ	富士通 デジタルアニーラ	東芝DS SBM
方式	量子	非量子	非量子	非量子
グラフ	キメラグラフ（6結合）	キンググラフ（8結合）	完全グラフ（全結合）	完全グラフ（全結合）
スピン数（ビット数）	2048（ただし欠損あり）	2500 (50×50)	1024	10000 公開中（実証中）
諧調（係数）	4～5 bits（16～32諧調）	8 bits（256諧調）	16 bits（65536諧調）	64 bits ？（ソフトウェア）
補足	次世代 スピン数：5000 ペガサスグラフ（15結合）	現行機：3諧調 正式販売前	次世代 スピン数：8192 諧調：64 bits	FPGA版にて10万スピンの実績もある？ クラウドサービス化予定

アニーリング計算の手順（非量子も共通）

Step1 解きたい課題を組み合わせ最適化問題に変換する。

Step2 問題の定式化（上三角QUBOモデルのハミルトニアン式へ変換）。

$$H = \sum_{i<j} Q_{ij} x_i x_j + \sum_i Q_{ii} x_i$$

Step3 必要ならQUBO行列を入力イジング行列に変換する。

Step4 

イジングマシンにより最適解（局所解）を得る。 SA

Step5 必要なら結果イジング行列をQUBO行列に変換して確認する。

3-4: 巡回セールスマン問題

それでは実際に巡回セールスマン問題を解いてみよう。

今回の巡回セールスマン問題と定式化

巡回セールスマン問題:

- 全都市を1度だけ訪問して出発都市に戻る。
- 最短経路(今回は距離)のルートを得る。

今回の前提と定式化:

1. 都市はA/B/C/Dの4つ(距離は別途説明)とする。
2. 4都市×4移動(距離×時間)の16スピンを使う。
3. 都市間接続(移動)は完全グラフ(全結合)とする。
4. QUBOモデル(都市にいる1、いない0)を作成する。
5. 距離(コスト関数)はスピン間の相互作用で指定。
6. 巡回する為の制約関数を用意する。

4都市の場合のスピンモデルの設計

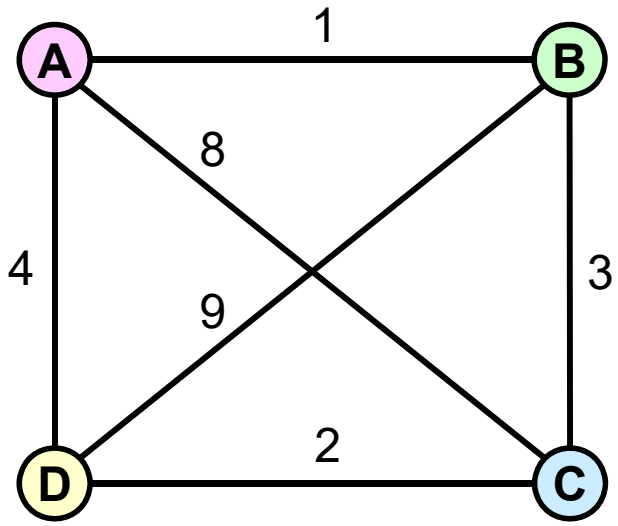
全部で4×4の16スピンを利用	都市A c=1	都市B c=2	都市C c=3	都市D c=4
1番目 t=1	x_1 1	x_2 0	x_3 0	x_4 0
2番目 t=2	x_5 0	x_6 0	x_7 0	x_8 1
3番目 t=3	x_9 0	x_{10} 1	x_{11} 0	x_{12} 0
4番目 t=4	x_{13} 0	x_{14} 0	x_{15} 1	x_{16} 0
1番目に戻る	x_1 1	x_2 0	x_3 0	x_4 0

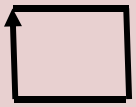
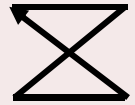
上例の答え：‘1000000101000010’ = ADBC（A）

ab = 28 ac = 36 ad = 81 bc = 50 bd = 67 cd = 63

巡回セールスマン問題1

距離
AB = 1
AC = 8
AD = 4
BC = 3
BD = 9
CD = 2



	**ABCDA** = 1+3+2+4 = **10**
	**ABDCA** = 1+9+2+8 = **20**
	**ACBDA** = 8+3+9+4 = **24**

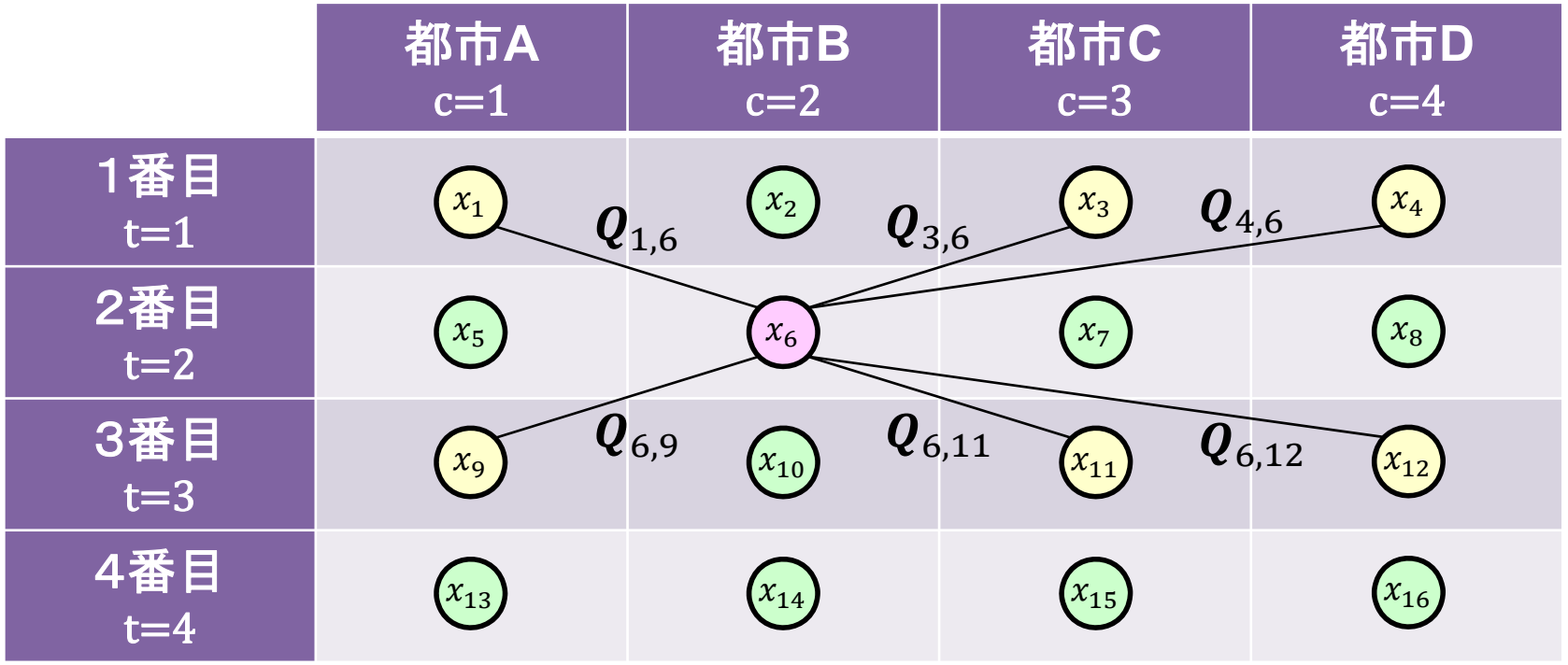
明らかに周辺を順に回るABCDAの順番の距離が短い。
逆順もあるのでADCBAでも良い（距離は同じ）。
まずこの問題をQUBO化してBlueqatで解いてみる。

コスト関数（都市間の距離と総距離）

上下行の自分以外の都市への距離が必要。最上段と最下段は循環しているとする。

総距離 $Hd = \sum_{i,j} Q_{i,j} x_i x_j$

都市 x_i と x_j が1の時（通過時）のみ
その都市間の距離 $Q_{i,j}$ が加算される。



※ $Q_{1,6} = Q_{6,9} = \mathrm{AB} = 1$ / $Q_{3,6} = Q_{6,11} = \mathrm{BC} = 3$ / $Q_{4,6} = Q_{6,12} = \mathrm{CD} = 2$

ij 間の距離QUBO行列（Hd）

$i \setminus j$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1		0	0	0	0	AB:1	AC:8	AD:4	0	0	0	0	0	AB:1	AC:8	AD:4
2			0	0	AB:1	0	BC:3	BD:9			0	0	AB:1	0	BC:3	BD:9
3				0	AC:8	BC:3	0	CD:2			0	0	AC:8	BC:3	0	CD:2
4					AD:4	BD:9	CD:2	0	0	0	0	0	AD:4	BD:9	CD:2	0
5						0	0	0	0	AB:1	AC:8	AD:4	0	0	0	0
6							0	0	AB:1	0	BC:3	BD:9	0	0	0	0
7								0	AC:8	BC:3	0	CD:2	0	0	0	0
8									AD:4	BD:9	CD:2	0	0	0	0	0
9										0	0	0	0	AB:1	AC:8	AD:4
10											0	0	AB:1	0	BC:3	BD:9
11												0	AC:8	BC:3	0	CD:2
12													AD:4	BD:9	CD:2	0
13														0	0	0
14															0	0
15																0
16																

1行目

使われない値は
何でも良いが0とする

距離
AB = 1
AC = 8
AD = 4
BC = 3
BD = 9
CD = 2

	A	B	C	D
1st	x_1	x_2	x_3	x_4
2nd	x_5	x_6	x_7	x_8
3rd	x_9	x_{10}	x_{11}	x_{12}
4th	x_{13}	x_{14}	x_{15}	x_{16}

ij 間の距離QUBO行列（*Hd*）

```
Hd = np.array([
[0,0,0,0,0,1,8,4,0,0,0,0,0,1,8,4],
[0,0,0,0,1,0,3,9,0,0,0,0,1,0,3,9],
[0,0,0,0,8,3,0,2,0,0,0,0,8,3,0,2],
[0,0,0,0,4,9,2,0,0,0,0,0,4,9,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,1,8,4,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,3,9,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,8,3,0,2,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,4,9,2,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,8,4],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,3,9],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,8,3,0,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,4,9,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
])
```

1次のスピン列を2次元行列へ変換

都市インデックス cと、時間インデックス tの2つを使いメインインデックス iを変換する。

$$x_i = x_{c,t}$$
$$i = (t-1) * 4 + c$$

都市を巡回する為の
制約を作りやすくする

	都市A c=1	都市B c=2	都市C c=3	都市D c=4
1番目 t=1	$x_1 = x_{1,1}$	$x_2 = x_{2,1}$	$x_3 = x_{3,1}$	$x_4 = x_{4,1}$
2番目 t=2	$x_5 = x_{1,2}$	$x_6 = x_{2,2}$	$x_7 = x_{3,2}$	$x_8 = x_{4,2}$
3番目 t=3	$x_9 = x_{1,3}$	$x_{10} = x_{2,3}$	$x_{11} = x_{3,3}$	$x_{12} = x_{4,3}$
4番目 t=4	$x_{13} = x_{1,4}$	$x_{14} = x_{2,4}$	$x_{15} = x_{3,4}$	$x_{16} = x_{4,4}$

制約関数（ペナルティ関数）

	都市A	都市B	都市C	都市D
1番目	1	0	0	0
2番目	0	0	0	1
3番目	0	1	0	0
4番目	0	0	1	0

巡回例

全都市を巡回する条件（2次元行列）:

1. 横軸（X軸）各行ではどれか1つだけが1になる。

条件: $\sum_c x_{c,t} = 1 \rightarrow Hc = \sum_t \left(1 - \sum_c x_{c,t}\right)^2$

- 同時間では1都市だけにいることができる
- 各行の総和が1になる（1つだけが1）

2. 縦軸（Y軸）各列ではどれか1つだけが1になる。

条件: $\sum_t x_{c,t} = 1 \rightarrow Ht = \sum_c \left(1 - \sum_t x_{c,t}\right)^2$

- 毎回異なる都市を訪問する
- 各列の総和が1になる（1つだけが1）

横軸の制約ハミルトニアン式（Hc）

各行に関する制約ハミルトニアン式は以下となる（既出）。

$$x_{1,t} + x_{2,t} + x_{3,t} + x_{4,t} = 1$$

ハミルトニアン式の変形：

$$\begin{aligned} H &= \left(1 - \left(x_{1,t} + x_{2,t} + x_{3,t} + x_{4,t} \right) \right)^2 \\ &= -{x_{1,t}}^2 - {x_{2,t}}^2 - {x_{3,t}}^2 - {x_{4,t}}^2 \\ &\quad +2x_{1,t}x_{2,t} + 2x_{1,t}x_{3,t} + 2x_{1,t}x_{4,t} \\ &\quad +2x_{2,t}x_{3,t} + 2x_{2,t}x_{4,t} + 2x_{3,t}x_{4,t} + 1 \end{aligned}$$

4×4のQUBO行列：

$$\begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

全横軸制約のQUBO行列（Hc）

$i \setminus j$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1	−1	2	2	2												
2		−1	2	2												
3			−1	2												
4				−1												
5					−1	2	2	2								
6						−1	2	2								
7							−1	2								
8								−1								
9									−1	2	2	2				
10										−1	2	2				
11											−1	2				
12												−1				
13													−1	2	2	2
14														−1	2	2
15															−1	2
16																−1

同じ時刻に1都市のみに存在する為の制約

縦軸の制約ハミルトニアン式（Ht）

各列に関する制約ハミルトニアン式は以下となる。

$$x_{c,1} + x_{c,2} + x_{c,3} + x_{c,4} = 1$$

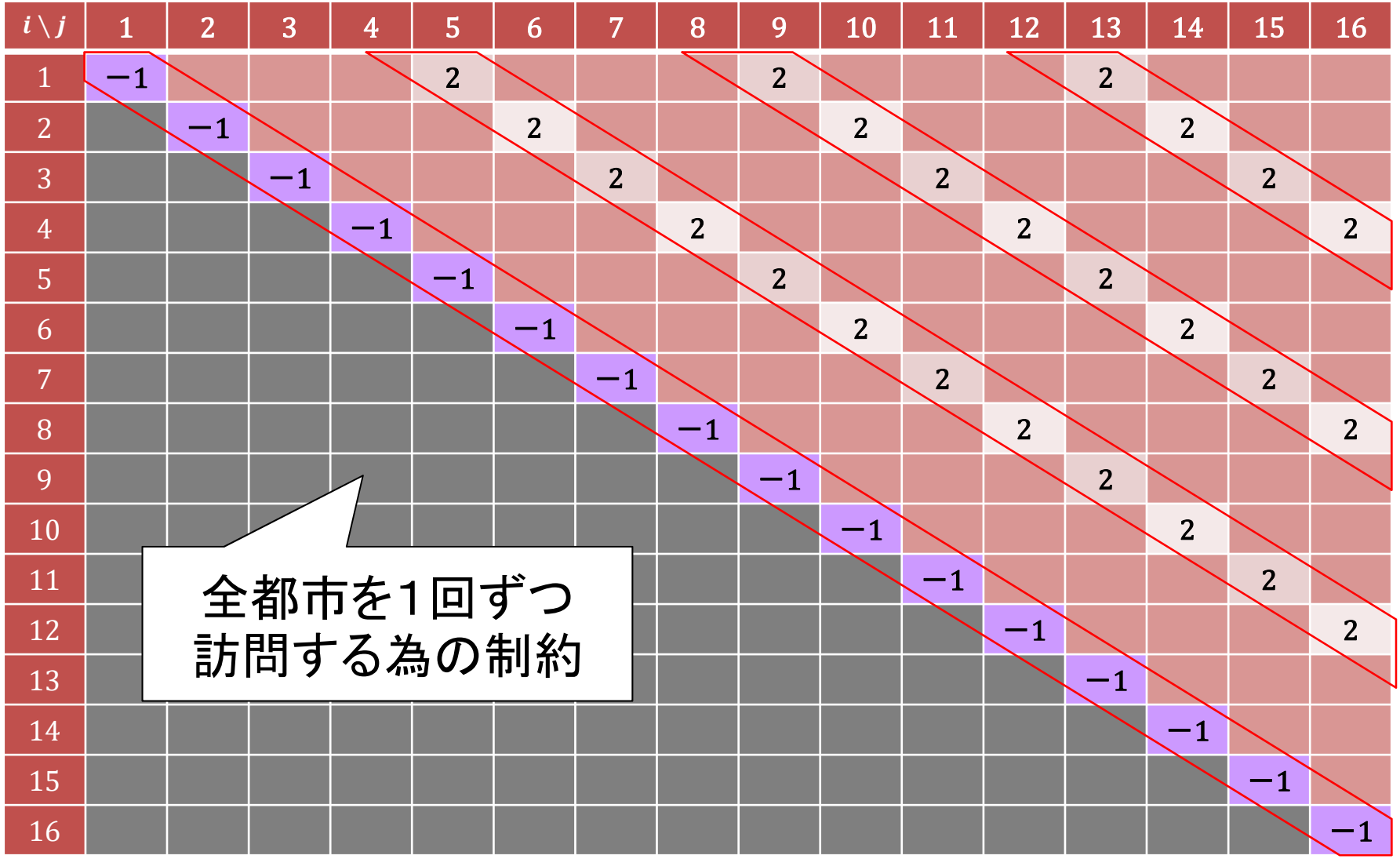
ハミルトニアン式の変形：

$$\begin{aligned} H &= \left(1 - \left(x_{c,1} + x_{c,2} + x_{c,3} + x_{c,4} \right) \right)^2 \\ &= -{x_{c,1}}^2 - {x_{c,2}}^2 - {x_{c,3}}^2 - {x_{c,4}}^2 \\ &\quad + 2x_{c,1}x_{c,2} + 2x_{c,1}x_{c,3} + 2x_{c,1}x_{c,4} \\ &\quad + 2x_{c,2}x_{c,3} + 2x_{c,2}x_{c,4} + 2x_{c,3}x_{c,4} + 1 \end{aligned}$$

4×4のQUBO行列：

$$\begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

全縦軸制約のQUBO行列（Ht）



全制約のQUBO行列（$Hp = Hc + Ht$）

$i \setminus j$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1	−2	2	2	2	2				2				2			
2		−2	2	2		2				2				2		
3			−2	2			2				2				2	
4				−2				2				2				2
5					−2	2	2	2	2				2			
6						−2	2	2		2				2		
7							−2	2			2				2	
8								−2				2				2
9									−2	2	2	2	2			
10										−2	2	2		2		
11											−2	2			2	
12												−2				2
13													−2	2	2	2
14														−2	2	2
15															−2	2
16																−2

都市を巡回する為の
制約QUBO

全制約のQUBO行列（$Hp = Hc + Ht$）

```
Hp = np.array([
[-2, 2, 2, 2, 2, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0],
[0, -2, 2, 2, 0, 2, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 2, 0, 0],
[0, 0, -2, 2, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 2, 0],
[0, 0, 0, -2, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 2],
[0, 0, 0, 0, -2, 2, 2, 2, 2, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0],
[0, 0, 0, 0, 0, -2, 2, 2, 0, 2, 0, 0, 0, 2, 0, 0],
[0, 0, 0, 0, 0, 0, -2, 2, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 2, 0],
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -2, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, 2],
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -2, 2, 2, 2, 2, 0, 0, 0],
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -2, 2, 2, 0, 2, 0, 0],
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -2, 2, 0, 0, 2, 0],
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -2, 0, 0, 0, 2],
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -2, 2, 2, 2],
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -2, 2, 2],
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -2, 2],
[0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -2],
])
```

全体のハミルトニアン式（定式化）

ここまでで計算したエネルギー計算のまとめ：

$$H = Hd + k \times Hp \quad (Hp = Hc + Ht)$$

H　：全エネルギー
Hd　：総距離（都市間距離のコストQUBO）
Hp　：総制約（都市を巡回させる為の制約QUBO）
k　：制約に対する重み付けの補正係数（調整用）
Hc　：横軸制約（同時に1都市のみ）
Ht　：縦軸制約（同時刻に1都市のみ）

Hd と Hp の2つのQUBOは導出済みなので計算が可能。

巡回セールスマン問題1の計算

```
# 左右は繋がっている
import numpy as np
from blueqat import opt
Hd = np.array([
[0,0,0,0,0,1,8,4,0,0,0,0,0,1,8,4],
[0,0,0,0,1,0,3,9,0,0,0,0,1,0,3,9],
[0,0,0,0,8,3,0,2,0,0,0,0,8,3,0,2],
[0,0,0,0,4,9,2,0,0,0,0,0,4,9,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,8,4,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,3,9,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,8,3,0,2,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,4,9,2,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,8,4],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,3,9],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,8,3,0,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,4,9,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
])
```

```
Hp = np.array([
[-2,2,2,2,2,0,0,0,2,0,0,0,2,0,0,0],
[0,-2,2,2,0,2,0,0,0,2,0,0,0,2,0,0],
[0,0,-2,2,0,0,2,0,0,0,2,0,0,0,2,0],
[0,0,0,-2,0,0,0,2,0,0,0,2,0,0,0,2],
[0,0,0,0,-2,2,2,2,2,0,0,0,2,0,0,0],
[0,0,0,0,0,-2,2,2,0,2,0,0,0,2,0,0],
[0,0,0,0,0,0,-2,2,0,0,2,0,0,0,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,-2,0,0,0,2,0,0,0,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2,2,2,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2,0,2,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,0,0,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,0,0,0,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2],
])
k = 4
q = opt.Opt().add(Hd+k*Hp)
opt.counter(q.run(shots=100))
```

巡回セールスマン問題1の計算結果例

```
Counter({'1000000100100100': 11,
         '0100100000010010': 14,
         '0100001000011000': 15,
         '0010010010000001': 14,
         '0001100001000010': 16,
         '0001001001001000': 10,
         '1000010000100001': 8,
         '0010000110000100': 12})
```

```
ADCB = ADCBA
BADC = ADCBA
BCDA = ABCDA
CBAD = ADCBA
DABC = ABCDA
DCBA = ADCBA
ABCD = ABCDA
CDAB = ABCDA
```

全部で8パターンが出力されたが、内容を確認すると開始点が違うだけで、最短経路の ABCDA か、逆順の ADCBA になっている。なお回数は計算毎に異なる。

※ つまり最適解が出力された。

巡回セールスマン問題1の計算(改)

```
# 左右は繋がっている
import numpy as np
from blueqat import opt
Hd = np.array([
[0,0,0,0,0,1,8,4,0,0,0,0,0,1,8,4],
[0,0,0,0,1,0,3,9,0,0,0,0,1,0,3,9],
[0,0,0,0,8,3,0,2,0,0,0,0,8,3,0,2],
[0,0,0,0,4,9,2,0,0,0,0,0,4,9,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,8,4,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,3,9,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,8,3,0,2,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,4,9,2,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,8,4],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,3,9],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,8,3,0,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,4,9,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
])
```

```
Hp = np.array([
[-8,2,2,2,2,0,0,
[0,-2,2,2,0,2,
[0,0,-2,2,0,0,2,
[0,0,0,-2,0,0,0,
[0,0,0,0,-2,2,2,
[0,0,0,0,0,-2,2,2,0,2,0,0,0,2,0,0],
[0,0,0,0,0,0,-2,2,0,0,2,0,0,0,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,-2,0,0,0,2,0,0,0,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2,2,2,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2,0,2,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,0,0,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,0,0,0,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2],
])
k = 4
q = opt.Opt().add(Hd+k*Hp)
opt.counter(q.run(shots=100))
```

$x_{1,1}$(都市A)の1次係数を大きくして最初に都市Aから開始させる。

巡回セールスマン問題1(改)計算結果

```
Counter({'1000010000100001': 57,
         '1000000100100100': 43})
```

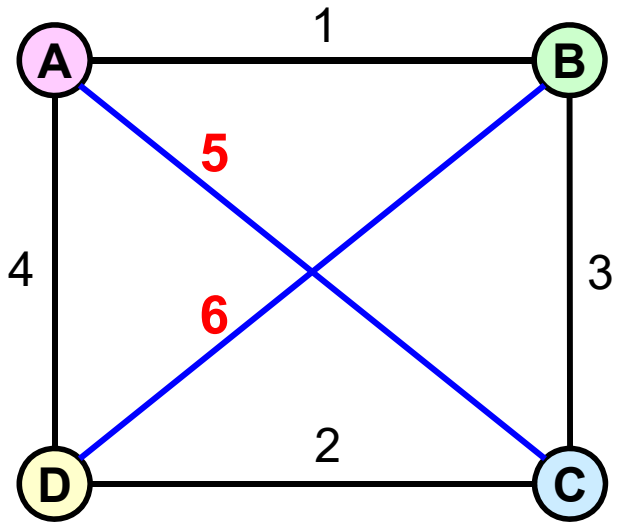
ABCD = ABCDA
ADCB = ADCBA

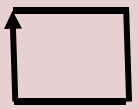
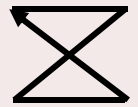
都市Aを開始点として、ABCDA とその逆順 ADCBA の2パターンのみが出力された。確率はほぼ50%ずつとなっている。

なお補正係数 k に今回の計算では 4 をセットした。
2つのQUBO、Hd と Hp のバランスが取れるようにする必要があるが、この辺りは結果を見て調整が必要。
今回は Hd の各値が 0～9 で、Hp の各値が -2～2 であったので、Hp に補正係数 4 倍を適用したところ良い感じで計算結果が得られた。

巡回セールスマン問題2

距離
AB = 1
AC = 5
AD = 4
BC = 3
BD = 6
CD = 2



	**ABCDA** = 1+3+2+4 = **10**
	**ABDCA** = 1+6+2+5 = **14**
	**ACBDA** = 5+3+6+4 = **18**

問題1に比較してAC間とBD間の距離を縮めた。

AC間：8→5 , BD間：9→6

周辺を順に回るABCDAの順番の距離が最短だが、
2番目のABDCAとの差は問題1より小さくなった。

ABCDA：10→10 , ABDCA：20→14 , ACBDA：24→18

巡回セールスマン問題2の計算

```
# 左右は繋がっている
import numpy as np
from blueqat import opt
Hd = np.array([
[0,0,0,0,0,1,5,4,0,0,0,0,0,1,5,4],
[0,0,0,0,1,0,3,6,0,0,0,0,1,0,3,6],
[0,0,0,0,5,3,0,2,0,0,0,0,5,3,0,2],
[0,0,0,0,4,6,2,0,0,0,0,0,4,6,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,5,4,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,3,6,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,5,3,0,2,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,4,6,2,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,5,4],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,3,6],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,5,3,0,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,4,6,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0],
])
```

```
Hp = np.array([
[-8,2,2,2,2,0,0,0,2,0,0,0,2,0,0,0],
[0,-2,2,2,0,2,0,0,0,2,0,0,0,2,0,0],
[0,0,-2,2,0,0,2,0,0,0,2,0,0,0,2,0],
[0,0,0,-2,0,0,0,2,0,0,0,2,0,0,0,2],
[0,0,0,0,-2,2,2,2,2,0,0,0,2,0,0,0],
[0,0,0,0,0,-2,2,2,0,2,0,0,0,2,0,0],
[0,0,0,0,0,0,-2,2,0,0,2,0,0,0,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,-2,0,0,0,2,0,0,0,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2,2,2,0,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2,0,2,0,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,0,0,2,0],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,0,0,0,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2,2],
[0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,-2],
])
k = 4
q = opt.Opt().add(Hd+k*Hp)
opt.counter(q.run(shots=100))
```

巡回セールスマン問題2の計算結果

```
Counter({'1000000100100100': 35,
         '1000010000100001': 47,
         '1000001000000100': 5,
         '1000001000010100': 6,
         '1000010000000010': 6,
         '1000010000010010': 1})
```

ADCB = ABCDA
ABCD = ABCDA
AC-B = [計算ミス]
ACDB = ABDCA
AB-C = [計算ミス]
ABDC = ABDCA

巡回しないケース(計算ミス)が発生してしまった。
補正係数を 4 から 5 に変更して再計算してみる。
つまり巡回させる為の制約を強くしてみる。

```
k = 5
q = opt.Opt().add(Hd+k*Hp)
opt.counter(q.run(shots=100))
```

巡回セールスマン問題2(改)計算結果

```
Counter({'1000000100100100': 34,
         '1000001000010100': 12,
         '1000010000100001': 41,
         '1000010000010010': 11,
         '1000001001000001': 2})
```

```
ADCB = ABCDA
ACDB = ABDCA
ABCD = ABCDA
ABDC = ABDCA
ACBD = ACBDA
```

補正係数を 4 から 5 に変更したことで正しく巡回するようになった。

結果を見ると、最短距離(最適解)の ABCDA が75%、2番目に短い距離(局所解？)の ABDCA が23%で、最も悪い(長い距離)の ACBDA は2%となっている。

最適解だけではなく局所解を求めることもできそうだ。

3-5: 多体相互作用

現在のイジングマシンでは通常2体の相互作用のみ対応しています。3体以上の相互作用を必要とする計算では2体表現に変換する必要があります。

3体問題の2体問題への変換例

例題：以下ハミルトニアン式が最小値を取る $x_1\ x_2\ x_3$を求めよ。

3変数が影響している　QUBO化できない

$$H = x_1 - x_1x_2x_3$$

※ $x_1\ x_2\ x_3$は 0 or 1 のバイナリ変数

x_2x_3を x_4 として式を置き換える（2体問題にする）。

$$H = x_1 - x_1x_4 \quad (x_4 = x_2x_3)$$

$x_4 = x_2x_3$ が成り立つ制約ハミルトニアン H' を
ハミルトニアン H に追加することで2体問題に変換。

$$H = x_1 - x_1x_4 + H'$$

前頁制約 H' のハミルトニアン式

$x_4 = x_2x_3$ が成り立つ係数 $c_1 \sim c_6$ を求める。

$$H' = c_1x_2 + c_2x_3 + c_3x_4 + c_4x_2x_3 + c_5x_3x_4 + c_6x_2x_4$$

真理値表を作って上の式から条件を求める。

$x_2x_3 = x_4$ の時に $H' = 0$ になる

x_2	x_3	x_4	H'
0	0	0	0
0	1	0	0
1	0	0	0
1	1	1	0

$c_1 \sim c_6$ は任意

$c_2 = 0$

$c_1 = 0$

$\sum_i c_i = 0$

$x_2x_3 \neq x_4$ の時に $H' > 0$ になる

x_2	x_3	x_4	H'
0	0	1	d_1
0	1	1	d_2
1	0	1	d_3
1	1	0	d_4

$c_3 = d_1$

$c_3 + c_5 = d_2$

$c_3 + c_6 = d_3$

$c_4 = d_4$

係数 c_1～c_6 を求める

c_1～c_6 の条件から制約 H' のハミルトニアン式を得る。

$$\sum_i c_i = 0$$

全部を足すと 0 なので c_i にマイナス値が必要

$$c_1 = 0$$
$$c_2 = 0$$
$$c_3 = d_1$$
$$c_3 + c_5 = d_2$$
$$c_3 + c_6 = d_3$$
$$c_4 = d_4$$

d_i は 1 以上

c_3 を大きくして c_5 c_6 をマイナス値

$$c_1 = 0$$
$$c_2 = 0$$
$$c_3 = 3$$
$$c_4 = 1$$
$$c_5 = -2$$
$$c_6 = -2$$

この数値を利用すると良さそうだ

よって以下の式を得る

確認:

$d_1 = 3$
$d_2 = 3 - 2 = 1$
$d_3 = 3 - 2 = 1$
$d_4 = 1$

$x_2x_3 \neq x_4$

x_2	x_3	x_4	H'
0	0	1	3
0	1	1	1
1	0	1	1
1	1	0	1

$$H' = 3x_4 + x_2x_3 - 2x_3x_4 - 2x_2x_4$$

3体問題を2体問題へ変換する制約 H'

$$H = x_1 - x_1x_4 + H'$$
$$H' = 3x_4 + x_2x_3 - 2x_3x_4 - 2x_2x_4$$

より2体問題の以下ハミルトニアン式が得られた。

※ k は調整用の補正係数（今回はまず1をセット）。

$$H = \underbrace{x_1 - x_1x_4}_{\text{コストQUBO}} + k * \underbrace{(3x_4 + x_2x_3 - 2x_3x_4 - 2x_2x_4)}_{\text{制約QUBO}}$$

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + k \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

3体問題を2体問題へ変換して計算

```
import numpy as np
from blueqat import opt
H1 = np.array([
[1,0,0,-1],
[0,0,0, 0],
[0,0,0, 0],
[0,0,0, 0],
])
H2 = np.array([
[0,0,0, 0],
[0,0,1,-2],
[0,0,0,-2],
[0,0,0, 3],
])
k = 1
q = opt.Opt().add(H1+k*H2)
opt.counter(q.run(shots=100))
```

```
Counter({'1111': 19,
         '0111': 22,
         '0000': 26,
         '0010': 16,
         '0100': 17})
```

$$H = x_1 - x_1x_4 + (3x_4 + x_2x_3 - 2x_3x_4 - 2x_2x_4)$$

$$1111 : H = 0$$
$$= 1 - 1 * 1 + (3 * 1 + 1 * 1 - 2 * 1 * 1 - 2 * 1 * 1)$$
$$0111 : H = 0$$
$$= 0 - 0 * 1 + (3 * 1 + 1 * 1 - 2 * 1 * 1 - 2 * 1 * 1)$$
$$0000 : H = 0$$
$$= 0 - 0 * 0 + (3 * 0 + 0 * 0 - 2 * 0 * 0 - 2 * 0 * 0)$$
$$0010 : H = 0$$
$$= 0 - 0 * 0 + (3 * 0 + 0 * 1 - 2 * 1 * 0 - 2 * 0 * 0)$$
$$0100 : H = 0$$
$$= 0 - 0 * 0 + (3 * 0 + 1 * 0 - 2 * 0 * 0 - 2 * 1 * 0)$$

※ 上記以外のパターンでは $H \neq 0$ となる。

3-6: アニーリング計算まとめ

ここまで巡回セールスマン問題と多体相互作用について見て来ました。

全体の流れのまとめと次のステップの為の推薦図書等をまとめます。

Re:組み合わせ最適化問題

様々な**制約**の下で多くの選択肢の中から、**指標**(コスト)を最も良くする**結果**(組み合わせ)を得る問題が、組み合わせ最適化問題。

1. アニーリングで解く為には、制約と指標(コスト)を、QUBO行列にする必要がある。
2. その為には与えられた問題の定式化を行う必要がある。

組み合わせ最適化問題の定式化

課題となっている組み合わせ最適化問題を解く為のハミルトニアン式を定めること。

QUBO用ハミルトニアン式の要件：

- **バイナリ変数**：変数が取る値は0または1のみ
- **2次式**：変数の最高次数が2である多項式
  - 多項式：「＋」または「－」の記号によって2つ以上の項を結びつけた式。
- **2体問題**：1つの項が2変数間の関係まで
  - ただし多体問題を制約により2体問題に変換できれば計算可能となる。

※文章問題を数学問題に変換する必要があり、数学的素養が求められる。

アニーリング計算の解き方

重要!

全エネルギー（QUBO） コスト関数（QUBO） 補正係数 制約関数（QUBO）

$$H = H_{cost} + k \times H_{penalty}$$

1. 問題に合わせたスピンモデルを用意する。
2. 問題に合わせて定式化（コスト関数と制約関数の用意）。

H	全エネルギー （ハミルトニアン）	求めるべきエネルギーをQUBO形式で得ることで、 イジングマシンへの入力とする。
H_{cost}	コスト関数 （目的条件）	指標をコスト値に変換する式からQUBOを用意する。
$H_{penalty}$	制約関数 （制約条件）	問題を成立させる為の制約式からQUBOで用意する。 複数の制約の組み合せが必要な場合もある。
k	補正係数	コスト関数と制約関数のバランスを取る為の係数。

3. 補正係数を調整して正しい最適解や局所解が得られるようにする。

アニーリング計算の精度

1. フラストレーションを生じる問題では補正係数の調整が結構微妙で面倒。
   - 結果を見て調整して実行の繰り返しが必要。
2. フラストレーションを生じる問題では最適解を得る確率は結構低く、局所解も多い。
   - 機械学習のサンプリングには使えそう。
   - 最適解と他の解の間の差が少ないと良い結果が得難いような気がする。
3. アニーリング計算に向いている問題と向いていない問題がありそうだ…

有名な組み合わせ最適化問題

ナップサック問題:

- 異なる価値とコストを持つ荷物を上限の中で最高コストになるようナップサックに詰合せる組み合わせを求める。

グラフ彩色問題:

- 隣り合った領域が同じ色にならないように塗り分ける問題。

クラスタリング(クラスタ分割問題):

- 与えられたデータ集合を部分集合に分割する問題。

配送計画問題:

- 巡回セールスマン問題を一般化して配送を効率良く行う問題。
- アニーリング計算の実証実験等で良く使われている問題。

3-8：ナップサック問題（応用）

実際のアニーリング計算の例としてナップサック問題を解いてみましょう。

ナップサック問題の例

最大荷重10Kgのナップサックに以下のオヤツの合計コストが最高となる組み合わせを求めよ。
なお組み合わせた重さの合計が10Kgとする。

[ナップサック]
最大荷重：10Kgまで

[オヤツ1] 重さ：6Kg コスト：500円 	[オヤツ2] 重さ：2Kg コスト：300円 	[オヤツ3] 重さ：3Kg コスト：200円 
[オヤツ4] 重さ：4Kg コスト：300円 	[オヤツ5] 重さ：7Kg コスト：900円 	[オヤツ6] 重さ：5Kg コスト：400円 

最適解：オヤツ3 + オヤツ5 = 重さ10Kg , コスト1,100円
局所解1：オヤツ2 + オヤツ3 + オヤツ6 = 重さ10Kg , コスト900円
局所解2：オヤツ1 + オヤツ4 = 重さ10Kg , コスト800円

ナップサック問題の定式化

各オヤツの重さを w_i 、コストを c_i とする。
ナップサックの最大荷重を L とする。
選択されたら1になるバイナリ変数 x_i で定式化。

A. コスト項 H_c :コストの合計が最大(最小)になる

$$H_c = -\sum_i c_i x_i$$

100円を1単位として値をセット

$$H_c = -(\,5x_1 + 3x_2 + 2x_3 + 3x_4 + 9x_5 + 4x_6\,)$$

B. 制限項 H_w :総重量が制限荷重とイコールになる

$$H_w = (\,L - \sum_i w_i x_i\,)^2$$

1Kgを1単位として値をセット

$$H_w = (\,10\ -(6x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 + 7x_5 + 5x_6\,)\,)^2$$

PyQUBO : QUBO生成SDK

QUBO行列があればアニーリング計算できることは分かった。
でもこの資料ではQUBOを自分で作成してたよね、他の方法は？
答: **PyQUBO を使えばハミルトニアン式からQUBOを得られる。**

PyQUBO:（dwave-ocean-sdk にも含まれている）

https://github.com/recruit-communications/pyqubo

利用例: $H = -x_1^2 - x_2^2 + 2x_1x_2 + 1$

```
from pyqubo import *                          # PyQUBOのインポート
q0, q1 = Binary("0"), Binary("1")             # バイナリ変数の準備
H = - q0 - q1 + 2*q0*q1 + 1                   # ハミルトニアン式
model = H.compile()                           # PyQUBOコンパイル
qubo, offset = model.to_qubo()                # 結果のQUBO化
print(qubo, 'offset=', offset)                # 結果表示
print(model.to_qubo(index_label=True))        # 結果をインデックスで
```

```
{('q0', 'q1'): 2.0, ('q0', 'q0'): -1.0, ('q1', 'q1'): -1.0} offset= 1.0
({(0, 1): 2.0, (0, 0): -1.0, (1, 1): -1.0}, 1.0)
```

QUBO= $\begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

※ 多体問題も対応しているようです。

ナップサック問題を PyQUBO から解く

```
from dimod import *                    # dimodインポート
from pyqubo import *                   # PyQUBOのインポート
# 変数の用意
x1,x2,x3 = Binary("x1"),Binary("x2"),Binary("x3")
x4,x5,x6 = Binary("x4"),Binary("x5"),Binary("x6")
# ハミルトニアン式
Hc = -(5*x1 + 3*x2 + 2*x3 + 3*x4 + 9*x5 + 4*x6)
Hw = (10-(6*x1 + 2*x2 + 3*x3 + 4*x4 + 7*x5 + 5*x6))**2
# 補正係数と全体のハミルトニアン
k = 8
H = Hc + k*Hw
# PyQUBOによるコンパイルとQUBO取得
model = H.compile()
qubo, offset = model.to_qubo()                  # QUBO化
#print(qubo, 'offset=', offset)                 # QUBO表示
# 実行
b = BinaryQuadraticModel.from_qubo(qubo, offset)          # QUBO設定
r = SimulatedAnnealingSampler().sample(b, num_reads=100) # SAを100回実行
# 結果出力
print(r)
```

ナップサック問題の計算結果

```
   x1 x2 x3 x4 x5 x6 energy num_oc.
    0  0  1  0  1  0  -11.0       1
    0  1  1  0  0  1   -9.0       1
    1  0  0  1  0  0   -8.0       1
    0  0  0  1  1  0   -4.0      15
    0  1  0  0  1  0   -4.0       6
    1  1  1  0  0  0   -2.0      11
    0  1  0  1  0  1   -2.0      13
    1  0  0  0  0  1   -1.0       2
    0  1  1  1  0  0    0.0       5
    0  0  0  0  1  1   19.0      21
    1  0  0  0  1  0   58.0       2
['BINARY', 100 rows, 100 samples, 6 variables]
```

制限項が最適解だと0になるので、その場合energyはコストと一致。

```
# コストと重さの計算結果
コスト： 1100円   重さ：10Kg
コスト：  900円   重さ：10Kg
コスト：  800円   重さ：10Kg
コスト： 1200円   重さ：11Kg
コスト： 1200円   重さ： 9Kg
コスト： 1000円   重さ：11Kg
コスト： 1000円   重さ：11Kg
コスト：  900円   重さ：11Kg
コスト：  800円   重さ： 9Kg
コスト： 1300円   重さ：12Kg
コスト： 1400円   重さ：13Kg
```

最適解: オヤツ3 + オヤツ5 = 重さ10Kg , コスト1,100円
局所解1: オヤツ2 + オヤツ3 + オヤツ6 = 重さ10Kg , コスト900円
局所解2: オヤツ1 + オヤツ4 = 重さ10Kg , コスト800円

最適解のエネルギーが最小として、次に局所解が得られた！

しかし待て、もっと良い解が出ている

今回の問題はちょうど10Kgとの前提であった。
「組み合わせた重さの合計が10Kgと一致する」
この時の最適解は次の組み合わせであった。
「オヤツ3 + オヤツ5 = 重さ10Kg , コスト1,100円」

通常のナップサック問題では10Kg以下として考える。
「組み合わせた重さの合計が10Kg以下とする」
つまり真の最適解は次の組み合わせとなる。
「オヤツ2 + オヤツ5 = 重さ9Kg , コスト1,200円」

- 重さは軽いがコストが大きい組み合わせがある。

※ では重さの合計を10Kg以下とする為には？

真ナップサック問題の定式化

A. コスト項 H_c :コストの合計が最大(最小)になる

$$H_c = -\sum_i c_i x_i$$

ここは変わらない

B. 制限項 H_w : 総重量を制限荷重 L 以下とする

$$H_w = ([L以下の重さ] - \sum_i w_i x_i)^2$$

計算結果をjとすることで値は1～Lとなる

※ 補助バイナリ変数 y_j $(1 \leqq j \leqq L$, 1つのみ1) を導入する。

$[L以下の重さ] = \sum_j j y_j$ なので、 $H_w = (\sum_j j y_j - \sum_i w_i x_i)^2$

C. 制限項 H_y : y_j のうち1つだけが1とする

$$H_y = (1 - \sum_j y_j)^2$$

y_j を導入することで重さ1～L(Kg)までの場合にエネルギーを 0 にできる。

真ナップサック問題のハミルトニアン式

$$H = H_c + k * H_w + n * H_y$$

※ k と n は調整係数

$$H = -\sum_i c_i x_i + k\left(\sum_j j y_j - \sum_i w_i x_i\right)^2 + n\left(1 - \sum_j y_j\right)^2$$

```
# --(略)--
# 変数の用意
x1,x2,x3 = Binary("x1"),Binary("x2"),Binary("x3")
x4,x5,x6 = Binary("x4"),Binary("x5"),Binary("x6")
y1,y2,y3,y4,y5 = Binary("y1"),Binary("y2"),Binary("y3"),Binary("y4"),Binary("y5")
y6,y7,y8,y9,y10 = Binary("y6"),Binary("y7"),Binary("y8"),Binary("y9"),Binary("y10")
# ハミルトニアン式
Hc = -(5*x1+3*x2+2*x3+3*x4+9*x5+4*x6)
Hw = ((y1+2*y2+3*y3+4*y4+5*y5+6*y6+7*y7+8*y8+9*y9+10*y10)-(6*x1+2*x2+3*x3+4*x4+7*x5+5*x6))**2
Hy = (1-(y1+y2+y3+y4+y5+y6+y7+y8+y9+y10))**2
k = 8
n = 12
H = Hc + k*Hw + n*Hy
# --(略)--
```

真ナップサック問題の計算結果

x1	x2	x3	x4	x5	x6	y1	y10	y2	y3	y4	y5	y6	y7	y8	y9	energy
0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	①	-12.0
0	0	1	0	1	0	0	①	0	0	0	0	0	0	0	0	-11.0
0	1	1	0	0	1	0	①	0	0	0	0	0	0	0	0	-9.0
0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	①	0	0	-9.0
1	0	0	1	0	0	0	①	0	0	0	0	0	0	0	0	-8.0
1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	①	0	-8.0
0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	①	-8.0
1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	①	-7.0

10Kg　7Kg　8Kg　9Kg

```
# コスト計算結果
コスト：  1200円
コスト：  1100円
コスト：   900円
コスト：   900円
コスト：   800円
コスト：   800円
コスト：   800円
コスト：   700円
```

最適解：オヤツ2 + オヤツ5 = 重さ9Kg , コスト1,200円
局所解1：オヤツ3 + オヤツ5 = 重さ10Kg , コスト1,100円
局所解2：オヤツ2 + オヤツ3 + オヤツ6 = 重さ10Kg , コスト900円
局所解3：オヤツ5 = 重さ7Kg , コスト900円
局所解4：オヤツ1 + オヤツ4 = 重さ10Kg , コスト800円
（以下略）

※ 真の最適解が得られているようだ。

3-8：D-Wave / D-Wave Leap

量子アニーリングマシンとして最初の商用マシンが D-Wave One（2011年：256量子ビット）でした。

D-Wave Systems, Inc.

D-Wave The Quantum Computing Company™

D-Wave Systems, Inc.（カナダ：英語）サイト：

https://www.dwavesys.com/

設立：1999年　本社：カナダブリティッシュコロンビア州バーナビー市

D-Wave社（日本）サイト：

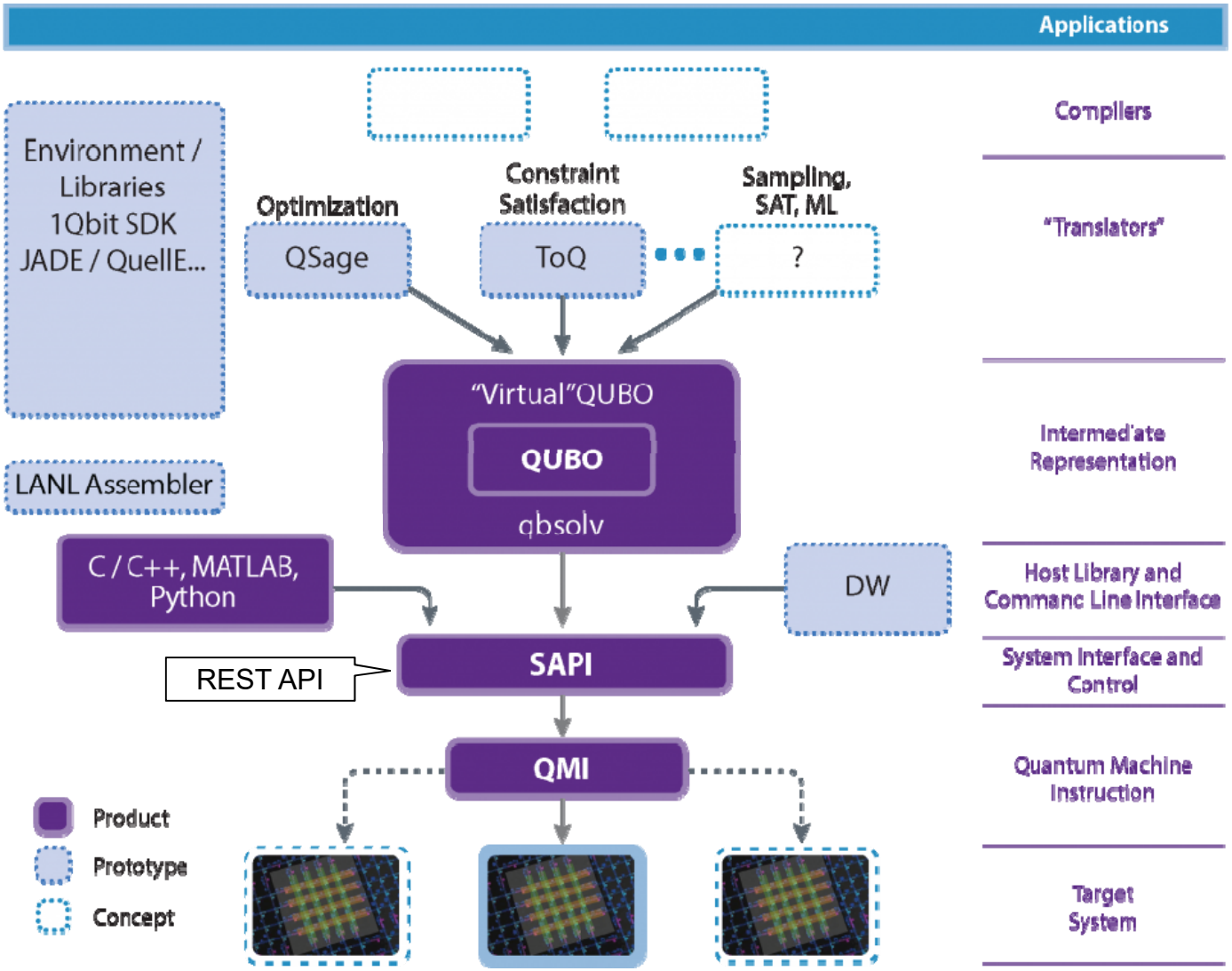
http://dwavejapan.com/

D-Wave 2000Q（D-Wave社サイトから）

現行機：D-Wave 2000Q	
量子ビット数	2048 qubit
グラフ	キメラグラフ（6結合）
諧調（係数）	4～5 bits（16～32諧調）
価格（非公開）	17億円？
出荷開始	2017年

次世代機：D-Wave 5000Q？	
量子ビット数	5000 qubit
グラフ	ペガサスグラフ（15結合）
諧調（係数）	4～5 bits？（16～32諧調）
価格（非公開）	不明？
出荷開始（予定）	2020年

D-Wave Software.（D-Wave社サイトから）



D-Wave Leap（クラウドサービス）

https://cloud.dwavesys.com/leap/

登録することで、クラウド上のD-Wave 2000Qが使えるサービス。

- **Trial Plan**：
  1カ月有効（初回登録直後のプラン）
- **Free Developer Access**：※ 要GitHubリポジトリ
  自動更新、1カ月あたり1分間の利用、成果はOSS化必要
  - 1時間2000ドルの有料プランも選べる。

※クラウドを使わない利用方法であれば Leap への登録無しでも D-Wave Ocean SDK をインストールすればシミュレータ等は使うことができる。

D-Wave Ocean SDK 実機の設定

API endpoint URL と API Token を dwave.conf に設定する。
作成は「dwave config create」で行える。
入力が必要な情報は Leap にログインすると取得可能。

- API endpoint URL: 画面下方の「Solver API endpoint」を利用。
- API Token: 画面左にある「API Token」の copy ボタンで取得。

実行例:

```
(base) > dwave config create <改行>
Configuration file not found; the default location is:
C:¥Users¥myuser¥AppData¥Local¥dwavesystem¥dwave¥dwave.conf
Configuration file path [C:¥Users¥myuser¥AppData¥Local¥dwavesystem¥dwave¥dwave.conf]: <改行>
Profile (create new) [prod]: <改行>
API endpoint URL [skip]: <ログインダッシュボード下にあるSolver API endpointのURL>
Authentication token [skip]: <ログインダッシュボードのAPI Tokenをコピーペースト>
Default client class (qpu or sw) [qpu]: <改行>
Default solver [skip]: <改行>
Configuration saved.
(base) >
```

Ocean：D-Wave 実機で最適化問題を解く

例題：以下式をハミルトニアン式とQUBO行列を作成して解け。

$$x_1 + x_2 = 1 \qquad H = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + 1$$

オフセット値

D-Wave実機による計算：

```
from dimod import *                                                  # dimodインポート
from dwave.system.samplers import DWaveSampler                       # 実機用インポート1
from dwave.system.composites import EmbeddingComposite               # 実機用インポート2
Q = {(0, 0):-1, (0, 1):2, (1, 1):-1}                                 # QUBO行列(dict)
b = BinaryQuadraticModel.from_qubo(Q, 1.0)                           # QUBO設定(オフセット値は1)
r = EmbeddingComposite(DWaveSampler()).sample(b, num_reads=8)  # 実機で8回実行
print(r)                                                             # 結果表示
```

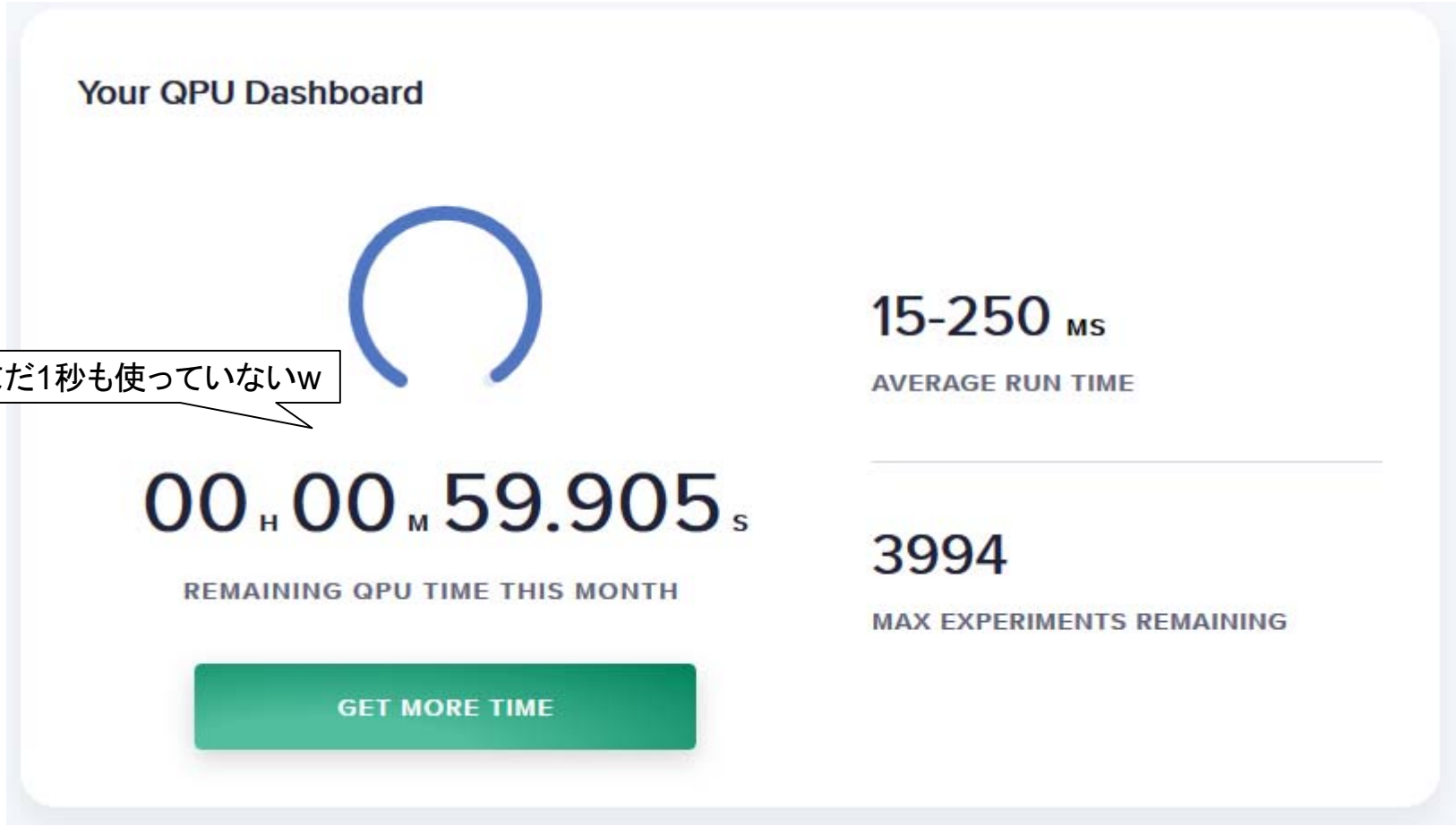
```
   0  1 energy num_oc.  chain_.
0  1  0    0.0       4      0.0
1  0  1    0.0       4      0.0
['BINARY', 2 rows, 8 samples, 2 variables]
```

E = 0.0 の (0,1) と (1,0) が
4回ずつ発生している

※ 実行するとだいたい数秒～10秒程度で結果が返ってくる。

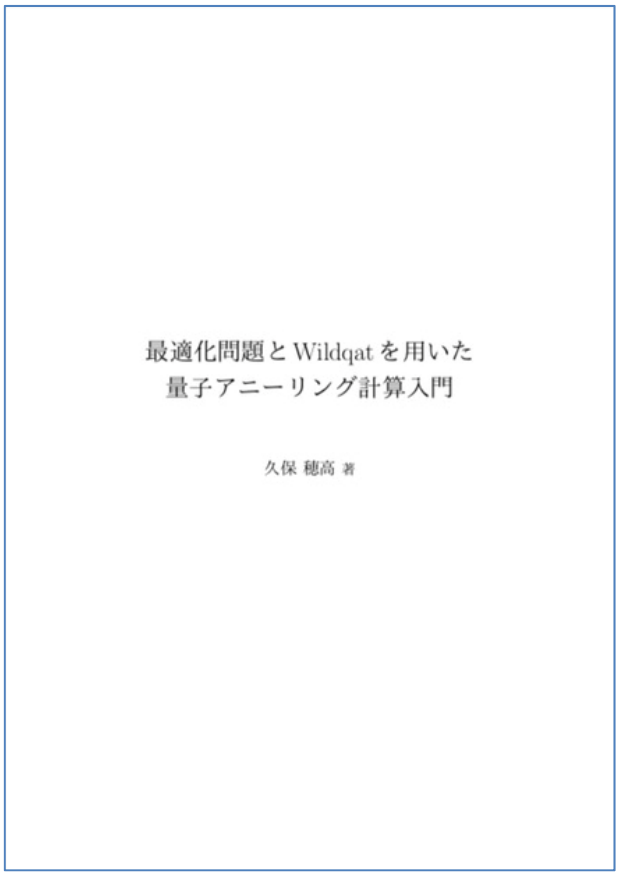
Leap：D-Wave 実機の残り時間

自分のダッシュボードに情報が出ている。
（1分使い切るのはなかなか大変そうです。）



3-9: 量子アニーリング編 付録

量子アニーリング：推薦図書



最適化問題とWildqatを用いた
量子アニーリング計算入門
(BOOTH：ダウンロード商品)
久保 穂高 (著) - 143 ページ

ダウンロードPDF版：980円
https://hodaka.booth.pm/items/1415833

入門だけでなく、豊富な問題の例が
載っているので　本資料を見た後に
勉強するには最適な書籍です。
問題の定式化の勉強になります。

問題例：分割問題、カバー・パッキング問題、
不等式問題、彩色問題、ハミルトン路

量子アニーリング: 参考図書

量子アニーリングの基礎

基本法則から読み解く物理学最前線 18

西森 秀稔 (著), 大関 真之 (著),
須藤 彰三 (監修), 岡 真 (監修) - 160 ページ
出版社:共立出版 (2018/5/19)

単行本(ソフトカバー)版:2160円
https://www.amazon.co.jp/gp/product/4320035380/

比較的アカデミックな内容ですが1冊持っておきたい書籍です。量子アニーリングに関して幅広い範囲を説明しています。量子ボルツマン機械学習についての記述もあります。

QUBOとイジングモデル

Blueqat / Wildqat（ARRAY/配列形式）	D-Wave Ocean SDK（DICT/辞書形式）	
QUBO	**QUBO**	**Ising Model**

```
Q = [
  [-1, 0, 3],
  [0, -2, 0],
  [0,  0, 1]
]
# 全ての要素を記述
```

同じ

```
Q = {
  (0, 0): -1,  # Q00
  (0, 2):  3,  # Q02
  (1, 1): -2,  # Q11
  (2, 2):  1   # Q22
}
# 値のある要素のみ記述
```

```
h = {
  0:-1,      # h0
  1:-2,      # h1
  2: 1       # h2
}
J = {
  (0, 2):3,  # J02
}
# 局所磁場hと
# 相互作用Jに分ける
```

```
h, J, offset1 = qubo_to_ising(Q, offset2)
Q, offset2 = ising_to_qubo(h, J, offset1)
```

変換

PythonのQUBO形式変換（dictとarray）

```
# 配列から辞書へ変換
def array2dict(ary):
    dct = dict(((i,j), ary[i][j])
        for i in range(len(ary))
        for j in range(len(ary[0]))
        if ary[i][j] != 0)
    return dct
# 辞書から配列へ変換(配列サイズをszで指定)
def dict2array(dct, sz):
    ary = [[0] * sz for i in range(sz)]
    for i in dct:
        ary[i[0]][i[1]] = dct[i]
    return ary
# 試験配列の初期化
org = [[-1,2],[0,-1]]
print('org=',org)
# 配列から辞書へ変換
dictQubo = array2dict(org)
print('dict=',dictQubo)
# 辞書から配列へ変換(配列サイズを指定)
arrayQubo = dict2array(dictQubo, sz=2)
print('array=',arrayQubo)
```

もっと良い実装もあると思いますが、とりあえず使えると言うことで(^^;

```
org= [[-1, 2], [0, -1]]
dict= {(0, 0): -1, (0, 1): 2, (1, 1): -1}
array= [[-1, 2], [0, -1]]
```

量子ゲート型で最適化問題を解く

例題：以下式をハミルトニアン式とQUBO行列を作成して解け。

$$x_1 + x_2 = 1 \qquad H = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

アニーリング計算（既出）：

```
from blueqat import opt                  # Blueqatのオプション
q = opt.Opt().add([[-1,2],[0,-1]])       # QUBOのセット
print(q.run(shots=8))                    # アニーリング計算を8回実行
```

```
[[1, 0], [0, 1], [0, 1], [1, 0], [1, 0], [0, 1], [1, 0], [0, 1]]
```

(x_1, x_2) が $(0,1)$ と $(1,0)$ の確率50%で発生

量子ゲート型QAOA（量子断熱）計算：

```
from blueqat import opt                  # Blueqatのオプション
q = opt.Opt().add([[-1,2],[0,-1]])       # QUBOのセット
print(q.qaoa().most_common(4))           # QAOA計算から上位4値を表示
```

```
(((1, 0), 0.4992877208471856), ((0, 1), 0.4992877208471856),
 ((0, 0), 0.0007122791528145044), ((1, 1), 0.0007122791528145044))
```

(x_1, x_2) が $(0,1)$ と $(1,0)$ のほぼ確率50%で発生している $(0,0)$ と $(1,1)$ も僅かな確率で発生

※ BlueqatではQAOAの入力としてQUBOも使えるので比較が楽。

- 量子ゲート型でも組み合わせ最適化計算は可能である。

アニーリング計算で素因数分解を解く

素因数分解する値を N、2つの素数を p と q とする。

$$N = p \times q$$

この時以下のハミルトニアン式で素因数分解できる。
ただし p と q を素数にする制約項が別途必要となる。

$$H = (N - p \times q)^2$$

以下のような論文が出ている:

"Quantum Annealing for Prime Factorization“

Shuxian Jiang, Keith A. Britt, Alexander J. McCaskey, Travis S. Humble & Sabre Kais
Scientific Reports volume 8, Article number: 17667 (2018)
https://www.nature.com/articles/s41598-018-36058-z

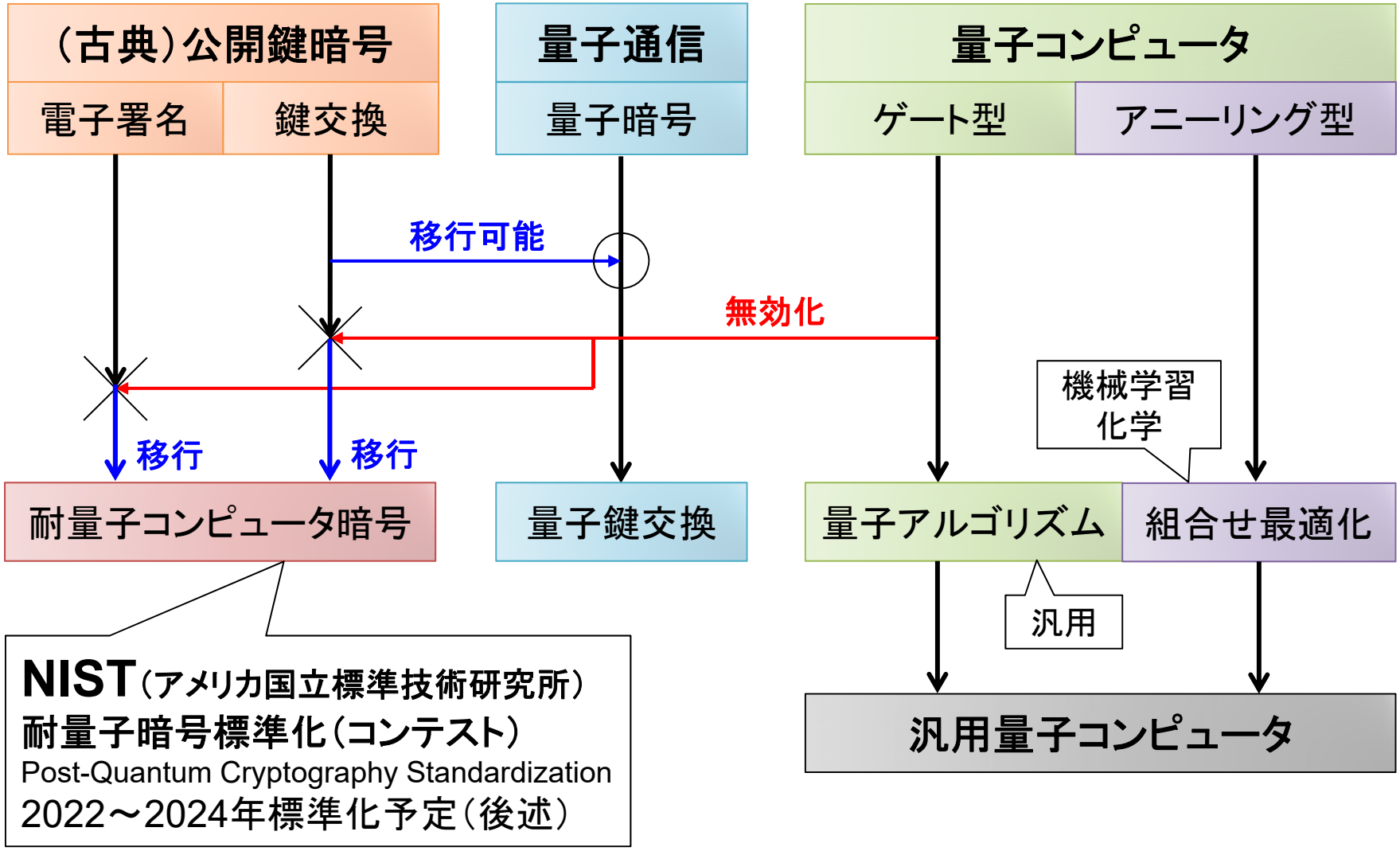
しかしながらこの論文では結果（解）からハミルトニアン式を設定しているように見える。汎用化できていない？

Part 4: 量子と暗号

ここまでで量子計算を使っても暗号は簡単には解けないことは分かったと思います。正しく理解して正しく恐れましょう。

ここでは少し両者の関係を整理します。

量子と暗号の関係


(古典)公開鍵暗号
電子署名
鍵交換
量子通信
量子暗号
量子コンピュータ
ゲート型
アニーリング型
移行可能
無効化
移行
移行
機械学習
化学
耐量子コンピュータ暗号
量子鍵交換
量子アルゴリズム
組合せ最適化
汎用
汎用量子コンピュータ
NIST(アメリカ国立標準技術研究所)
耐量子暗号標準化(コンテスト)
Post-Quantum Cryptography Standardization
2022～2024年標準化予定(後述)

量子アルゴリズムの古典暗号への影響

種類	暗号方式	量子アルゴリズムの影響
公開鍵暗号	RSA暗号 楕円曲線暗号	ショアのアルゴリズム（サイモンのアルゴリズム） ➢ 状況：n^c から c^n へ回数を減らして解ける ➢ 対策：耐量子コンピュータ暗号へ移行（後述）
共通鍵暗号	AES暗号	グローバーのアルゴリズム ➢状況：2^{100}から2^{50}程度へ回数が減らせる ➢対策：暗号鍵サイズを2倍以上にする サイモンのアルゴリズム ➢状況：CBC/CFB/CBC-MAC/GCMは危険 ➢対策：安全な他のモードを利用する
ハッシュ計算	SHA-2	グローバーのアルゴリズム ➢状況：2^{100}から2^{50}程度へ回数が減らせる ➢対策：ハッシュサイズを2倍以上にする

参考： 第19回情報セキュリティ・シンポジウム 2018年3月1日
量子ゲート型コンピュータが暗号に与える影響と対策
https://www.imes.boj.or.jp/citecs/symp/19/ref3_seitou.pdf

耐量子コンピュータ暗号

- ✓ 現在の公開鍵暗号（RSA/ECC）は量子アルゴリズムを使って解ける（ただし必要なハードはまだない）。
- ✓ 共通鍵暗号（AES/SHA）は鍵長を倍以上に増やせば大丈夫。

今我々に必要なもの：

- ➢ **量子コンピュータでも解けない公開鍵暗号方式。**
  それが「耐量子コンピュータ暗号」である。

公開鍵暗号の種類：

- □ 大きく分けて、公開する鍵で暗号化する鍵交換・暗号化と、秘密にする鍵で暗号化（署名）する電子（デジタル）署名がある。
  ※ RSAとECCは両方をサポートしているが、方式によっては片方だけのサポートとなる。

NIST（アメリカ国立標準技術研究所）耐量子暗号標準化 公募：

Post-Quantum Cryptography Project

https://csrc.nist.gov/Projects/Post-Quantum-Cryptography

暗号仕様を公開可能
世界中で無制限利用が可能

主な耐量子コンピュータ暗号方式

暗号方式		概要
格子暗号	NTRU	多項式環を用いて定義された格子の最短ベクトル問題を利用。IEEE/ANSIにおいて標準化されている唯一の格子暗号方式であり製品も出ている。軽量で使いやすいと言われているが、安全性の面で再評価が行われており注意。LWE方式等との組み合わせも。
	LWE (Ring-LWE)	LWE(Learning With Errors)は、誤差を付加した多元連立一次方程式を解く問題を利用。Ring-LWEは、LWE方式の欠点である鍵サイズが大きくなる問題を畳み込むことで小さくするより新しい方式。
多変数多項式		多変数多項式(MultivariateQuadratic polynomials)の求解問題(MQ問題)を利用した方式。NISTにも多数の方式がエントリーしている。
ハッシュ署名		ハッシュを使ってMerkleツリー構造やワンタイム署名を組み合わせた署名専用の方式。NISTでは署名用にSPHINCS+のみ残っている。
符号ベース		線形符号の復号問題を利用した方式。電子署名にも使えるがNISTでは鍵交換・暗号化でのみ残っている。
同種写像		2つの同種な楕円曲線間の同種写像計算の一方向性を利用した方式。NISTでは鍵交換用にSIKEのみ残っている。
ゼロ知識証明		ハッシュアルゴリズムと共通鍵暗号を使った署名専用の方式。NISTではMSとDigiCertのPicnicのみ残っている。

※ 上記の各方式を組み合わせた暗号方式も多い。

NIST 耐量子暗号標準化 ラウンド概要

ラウンド1：2017年11月30日

69方式の提案があったが21方式以上が破られてしまった。
以下は重複提案があるので合計が69を超えている。

- **電子署名**（digital signature）　：**19方式**
- **鍵交換**（key-establishment）　：**44方式**
- **暗号化**（public-key encryption）　：**16方式**

ラウンド2：2019年1月30日（予定通り）← イマココ

ラウンド1に比べて残った方式は半分以下の26方式。

- **電子署名**　：**9方式**
- **鍵交換**　：**17方式**
- **暗号化**　：**3方式**（全て鍵交換も重複してサポート）

電子署名と鍵交換・暗号化の重複方式はない

ラウンド3：2020年～2021年の予定

ドラフト化完了：2022年～2024年の予定

NISTラウンド2：電子署名

No	名称	ベース	補足
1	**CRYSTALS-Dilithium**	格子暗号	Ring-LWE方式
2	**FALCON**	格子暗号	NTRU方式
3	**GeMSS**	多変数多項式	公開鍵が大きい
4	**LUOV**	多変数多項式	
5	**MQDSS**	多変数多項式	
6	**Picnic**	ゼロ知識証明	MS提案（UtimacoのHSMで試験実績あり） 対称暗号・ハッシュ関数・ブロック暗号を利用
7	**qTESLA**	格子暗号	MS提案、Ring-LWE方式
8	**Rainbow**	多変数多項式	公開鍵：150KB、秘密鍵：100KB、署名：64B
9	**SPHINCS+**	ハッシュ署名	鍵：数KB、署名：10-50KB と小さい

本命と言われていた格子暗号は3方式のみと減った。
多変数多項式が4方式と多い。
MS提案のPicnicが既にHSMに実装試験される等進んでいる？
欧州はSPHINCS-256を推しているがその発展形のSHPNICS+も注目か。

NISTラウンド2：鍵交換・暗号化

No	名称	暗号化	ベース	補足
1	**BIKE**	ー	符号ベース	QC-MDPC（準巡回中密度パリティ検査）コード
2	**Classic McEliece**	ー	符号ベース	公開鍵：1MB以上、秘密鍵：10-20KB、遅い
3	**CRYSTALS-KYBER**	ー	格子暗号	LWE方式
4	**FrodoKEM**	ー	格子暗号	
5	**HQC**	ー	符号ベース	
6	**LAC**	○	格子暗号	
7	**LEDAcrypt**	○	符号ベース	merger of LEDAkem/LEDApkc
8	**NewHope**	ー	格子暗号	GoogleのChromeに試験実装（終了）
9	**NTRU**	ー	格子暗号	merger of NTRUEncrypt/NTRU-HRSS-KEM
10	**NTRU Prime**	ー	格子暗号	NTRU方式
11	**NTS-KEM**	ー	符号ベース	
12	**ROLLO**	ー	符号ベース	merger of LAKE/LOCKER/Ouroboros-R
13	**Round5**	○	格子暗号	merger of Hila5/Round2
14	**RQC**	ー	符号ベース	
15	**SABER**	ー	格子暗号	
16	**SIKE**	ー	同種写像	
17	**Three Bears**	ー	格子暗号	

http://scienceinoh.jp/schrodinger/

おわりに

Special Thanks！

- AITC クラウド・テクノロジー活用部会 のメンバー
- サル量子オフ を手伝ってくれた サルメンバー

本資料は**非営利目的/社内勉強会**であれば**自由**にお使いください。営利目的で利用したい場合には著者までご連絡ください。

量子プログラミングの世界は日進月歩。可能なら今後も最新情報を使って更新して行きたいと考えています。公開サイトをチェックしてみてください！それではまた！

公開サイト　https://www.slideshare.net/OsSAL-org/

著者：有限会社ラング・エッジ 宮地直人 @le_miyachi / miyachi@langedge.jp