

量子コンピュータを用いた量子力学教育の可能性

依田悠^{*1}・堀越篤史^{*2}

Email: g1883117@tcu.ac.jp

*1: 東京都市大学大学院環境情報学専攻

*2: 東京都市大学知識工学部

◎Key Words 量子コンピュータ, 量子力学, QC リテラシー

1. はじめに

近年、量子コンピュータの研究開発が盛んに行われ、IBMやGoogleといった大企業からベンチャー企業までが巨額の資金を投入して性能の向上を競っている⁽¹⁾⁽²⁾。それは、量子コンピュータが量子力学の性質を利用した全く新しい計算機であり、従来のコンピュータが苦手とする問題を解くことができると期待されているからである。素因数分解、情報探索、組み合わせ最適化、分子・材料設計などがその典型である。2016年にはIBMが量子コンピュータをクラウドで公開し、誰でも無料で使用できる環境を提供している⁽¹⁾⁽³⁾。

量子コンピュータはまだ実用化レベルには達していないが、近い将来、普及に耐えるマシンが実現した暁には、それを使いこなすための「量子コンピュータリテラシー (QC リテラシー)」が重要となるだろう。量子コンピュータは量子力学の原理に従って動作するので、QC リテラシーの獲得にはまず量子力学そのものの勉強から始めなければならない。これは高いハードルであり、QC リテラシーと従来のコンピュータリテラシーの大きな違いである。しかし、量子力学の原理に従って動作するという事は、裏を返せば、量子コンピュータを動かすことが量子力学の「実験」となり、それを通じて量子力学への理解を深めることができるということである。本研究では、この側面に光を当て、量子コンピュータによる「実験」がもたらす教育効果を簡単な事例を挙げて議論する。

2. 量子力学と量子コンピュータ

量子力学とは、原子や原子核、電子といったミクロな存在が従う力学であり、我々のようなマクロな存在が従う古典力学とは異なる奇妙な性質を持つ。そのなかでも重要なのが「状態の重ね合わせ」である。コンピュータで用いられるビットを例にすると、従来のコンピュータで用いられる古典ビットは0か1のどちらか一方しかとることができない。一方、量子力学では、0か1が決まっていない重ね合わせ状態が存在できる。例えば

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

という状態は、測定をすると|0>か|1>のどちらかに結果が定まるが、測定をするたびに|0>か|1>かの結果が

異なり、測定を何度も繰り返すと、|0>が50%、|1>が50%の確率で得られることになる。測定しないと状態が定まらず、かつ測定して得られる結果は確率的に決まる。これが古典力学にはない量子力学の特性である。このような量子力学に従うビットを量子ビットと呼ぶ。量子コンピュータは量子ビットを利用して高速計算を実現する計算機である。

量子コンピュータで利用される量子力学の性質としては、「エンタングルメント」も重要である。これは、複数の量子ビットが絡まった状態のことで、量子ビット2つの場合は、例えば

$$|AB\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A|0\rangle_B + |1\rangle_A|1\rangle_B)$$

がエンタングル状態である。ここでは量子ビットAを測定した結果が|0>ならば量子ビットBは自動的に|0>に決まり、量子ビットAが|1>ならばBは|1>に決まるという相関が実現している。このような相関も量子コンピュータのアルゴリズムに利用されている。

量子コンピュータの演算は、従来のコンピュータが古典ゲートの組み合わせである論理回路に従って演算すると同様に、量子ゲートの組み合わせによる量子回路に従って実行される。例えば、前述した重ね合わせ状態 $|\psi\rangle$ は、初期状態 $|0\rangle$ に対してアダマール(Hadamard)ゲートを作用させることにより実現できる。また、エンタングルした状態 $|AB\rangle$ は、初期状態 $|0\rangle_A|0\rangle_B$ に対してアダマールゲートと制御NOTゲートを作用させることにより実現できる。演算の結果、所望の状態が実現できたかどうかは、測定により確認することができる。

3. 量子コンピュータによる「実験」

量子力学の時間発展は、初期状態から出発して、ユニタリーな(可逆な)時間発展、終状態の測定という一連の過程からなり、その中で状態の重ね合わせ、エンタングルメント、測定、確率的な結果など、量子力学に特有な概念が登場する。量子コンピュータの計算手順もこの一連の過程と全く同じであるから、量子コンピュータを動かすという「実験」を行うことは、これらの概念の習得の助けになると考えられる。以下、簡単に重要な例として、重ね合わせ状態の生成とその測定という「実験」をしてみよう。

ここでは、IBM により提供されているクラウド環境「IBM Q Experience」を利用する⁽¹⁾⁽³⁾。これは誰でも無料で利用できるシステムであり、ユーザーがブラウザ上で量子回路を作成して実行ボタンを押すと、量子回路のデータが IBM の研究所に送信され、そこに設置された量子コンピュータで計算が実行されて、結果がユーザーに返送される。今回の重ね合わせ状態生成実験では、図 1 のような量子回路を作成した。

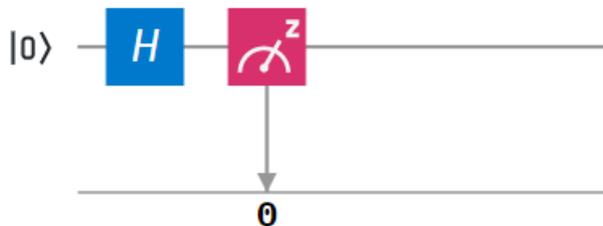


図 1 アダマールゲートからなる量子回路

この回路は左から右に向かって流れており、左端に量子ビットの初期状態 $|0\rangle$ が用意され、それに H マークのボックスで表されたアダマールゲートが作用することで重ね合わせ状態 $|\psi\rangle$ が生成し、最後のボックスで状態が測定される。この実験の測定を 1024 回行った結果を図 2 に示す。

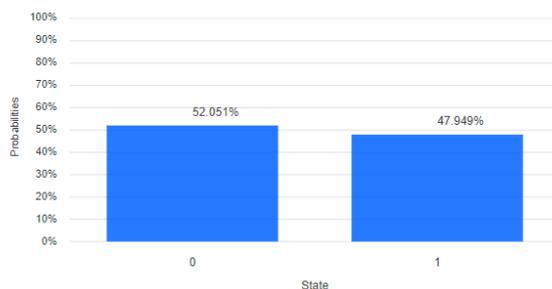


図 2 測定結果

図 2 のヒストグラムの左側は状態 $|0\rangle$ が測定される確率を表しており、52.051%と表示されている。一方、右側は状態 $|1\rangle$ が測定される確率であり、47.949%とある。これは、重ね合わせ状態 $|\psi\rangle$ の生成と測定を 1024 回繰り返した結果、状態 $|0\rangle$ が 533 回、状態 $|1\rangle$ が 491 回得られたということである。実験の回数をさらに増やしていくと、状態 $|0\rangle$ と状態 $|1\rangle$ が得られる確率は 50% - 50%に収束していく。

以上のような実験を、最初は 1 回から始めて、どんどん回数を増やしていくことで、アダマールゲートによって確かに重ね合わせ状態が実現し、かつ、測定することによって状態が $|0\rangle$ か $|1\rangle$ に定まるが、どちらが得られるかは確率的に決まっていることが良く理解できるだろう。さらに、初期状態を変えたり、量子ビットの数を増やしたりするなど、様々なバリエーションを試してみるのも有用である。

4. おわりに

量子コンピュータを実際に動かすことにより、量子力学の「実験」を手軽に行うことができる。ブラウザ上での量子回路の作成と実行はシンプルな操作であり、量子力学を詳しく知らない段階でも実験を行うことが可能である。量子回路をデザインして、結果が出るまでのプロセスをたどり、結果を解釈することで量子力学の世界を体験することは、量子力学に特有な概念を獲得するうえで大きな助けとなる。

もちろん、従来のコンピュータを用いた量子力学の教材も大変有用であり、特にトンネル効果など、量子力学的な粒子が持つ波としての性質（波動性）を視覚化した教材は直観的に分かりやすい⁽⁴⁾。この波動性、特に空間的に広がった波としての性質は、量子回路を用いた実験ではなかなか見え辛い性質である。一方で、初期状態の用意、時間発展、測定、確率的な結果、という量子力学の一連の過程や重ね合わせ状態などを従来のコンピュータで表現するのは容易ではない。少なくとも現時点においては、量子コンピュータと従来のコンピュータは量子力学教育において互いに相補的な関係にあり、それぞれを状況に応じて使い分けることが効果的であろう。

量子コンピュータを用いた「実験」の例として、今回は重ね合わせ状態 $|\psi\rangle$ の生成実験を紹介したが、エンタングル状態 $|AB\rangle$ の生成実験も同様に行うことができる。こちらはさらに相関という概念が絡んでくるため、一歩進んだ量子力学の学習に最適である。

また最近、量子コンピュータを用いてトンネル効果などの波動性を表現するアルゴリズムが提案されている⁽⁵⁾。これは、量子力学的な粒子の時間発展を、量子回路を用いて近似的に表現するもので、「量子シミュレータ」と呼ばれる量子コンピュータの活用法の一つである⁽⁶⁾。トンネル効果の量子シミュレーションの精度はまだ粗いが、近い将来、従来のコンピュータを用いた教材と遜色ない「実験」が可能になれば、量子コンピュータが量子力学教育の中心を担う存在になるかもしれない。

参考文献

- (1) 藤井啓祐, 武田俊太郎, 山崎清仁: “(特集) エンジニアのための量子コンピュータ入門”, インターフェース, 3月号, pp.47-111 (2019).
- (2) 湊雄一郎: “いちばんやさしい量子コンピュータの教本”, インプレス (2019).
- (3) 中山茂: “Python クラウド量子計算 QISKIT パイブル”, NextPublishing (2018).
- (4) 堀越篤史, 青木健一, 中村悦子: “ビジュアル系量子力学”, PC カンファレンス論文集, pp.66-67 (2001).
- (5) A. T. Somborger: “Quantum Simulation of Tunneling in Small Systems”, *Scientific Reports*, **2**, 597 (2012).
- (6) M.-H. Yung, J.D. Whitfield, S. Boixo, D.G. Tempel, A. Aspuru-Guzik, : “Introduction to Quantum Algorithms for Physics and Chemistry”, *arXiv:1203.1331* (2012).