

1P054

最適設計されたゲートパルスによる量子データベース検索

(東北大理¹, JST-CREST²) 面 政也¹, 寺西慶哲^{1,2}, 大槻幸義^{1,2}, 藤村勇一¹

[序] 量子コンピュータは、量子重ね合わせ状態を利用して多数の計算を同時に行うことができ(量子並列計算)、従来のコンピュータの延長では不可能な膨大な情報処理を可能にする。量子演算の基本単位は、 $|0\rangle$ または $|1\rangle$ の基底で表される量子ビットである。従来のコンピュータではこれらのいずれかの状態をとるが、量子コンピュータにおいては、 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の重ね合わせ状態をとることができる。量子ビットは種々の物理系で実現されており、原理検証段階ではあるが、いくつかの量子アルゴリズムは実験的にも実証されている。

本研究では、分子と超短レーザーパルスとのコヒーレントな相互作用を利用した量子計算を、量子最適制御シミュレーションにより数値解析する。このような試みの例としては、振動自由度ごとに量子ビットを割り当てていく方法や[1]、ユニタリ演算子の最適設計[2]などが提案されている。しかし、いずれも基本操作パルス(位相シフタや制御 NOT ゲート)の設計までに留まっている。一方、我々は既に、ヨウ素分子の振動準位を量子ビットと見立て、別々に設計された量子ゲートパルスを組み合わせれば、Deutsch-Jozsa アルゴリズムが実現できることを報告している[3]。今回は、実用の面からも関心もたれている、量子データベース検索(グローバールゴリズム)に着目する。グローバールの検索アルゴリズムを構成する、折り返しパルスとオラクルパルスとを別々に最適設計する。それらを繰り返し照射することで、実際、 N 個のデータ中から目的物を \sqrt{N} の操作で検索できることを示す。また、デコヒーレンスが検索精度に及ぼす影響を、非マルコフマスター方程式を使い系統的に解析する [4]。

[理論・計算]

グローバールゴリズム:

種々の表現法があるが、ここでは次の問題を考える。 N 個の数の中から、1つの未知数を求めるとする。但し、関数(オラクル)が与えられている。それによると、(適当に選んだ)数が未知数に一致する場合、対応する状態ベクトルにマイナス位相をつける。一致しない場合、関数は何の操作もしない。“未知数を見つけるのに、何回関数(オラクル)をよび出す必要があるか”が問題である。

古典的にはランダムに数を選び、試行を繰り返す。 $N/2$ 回の試行後には、50%の確率で未知数を見つけることができる。ところが以下に示すグローバールゴリズムに従えば、 \sqrt{N} 回のよび出しで、非常に高い確率で未知数を見つけることができる。

n 量子ビット(データ数は $N = 2^n$)を考える。

初期状態 $|\psi_0\rangle = |0\rangle$ にアダマール変換を施し、 $|\phi_0\rangle = \mathbf{H}^{\otimes n} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{0 \leq x \leq 2^n - 1} |x\rangle$ を生成。

未知数を $|a\rangle$ とすると、関数(オラクル)は $V = 1 - 2|a\rangle\langle a|$ で表される。これを $|\phi_0\rangle$ に作用し、 $|\psi_1\rangle = V|\phi_0\rangle$ を得る。

折り返しゲート $W = 2|\phi_0\rangle\langle\phi_0| - 1$ を $|\psi_1\rangle$ に作用させ、 $|\psi_2\rangle = W|\psi_1\rangle$ を得る。

以下

と のステップを \sqrt{N} 回繰り返すと、未知数 a を決定できる。

最適制御法による密度演算子形式のゲートパルス設計:

分子へ量子アルゴリズムを実装するためのシミュレーションを行う。まず、量子ビットを操作するためのパルス(ゲートパルス)を最適制御法により設計する。演算子 W で表されるゲート操作を考える。任意の初期状態(密度演算子) ρ^0 に対し、ゲートパルスは $\rho(t) = G(t, 0) \rho^0$ が $W \rho^0 W$ に近くなるように設計される。ここで、 $G(t, 0)$ はゲートパルスを含むリウヴィル空間における時間発展演算子である。最適制御シミュレーションには、我々が開発した数値計算アルゴリズムを用いる[5]。

【結果・考察】 ヨウ素分子の電子励起(B)状態における振動準位を量子ビットに見立てる。ここでは2量子ビットの場合を考え、計算基底を $v=29, 30, 31, 32$ に割り当てる。電子基底(X)状態は、ゲート操作のための補助ビットとみなす。最適制御法に基づき折り返しパルスとオラクルパルスを別々に設計する。グローバラーの繰り返し1ステップ分のパルス形を図1に示す。上図が未知数 $|00\rangle$ の場合、下図が $|10\rangle$ の場合を示す。前半の1000fsがオラクルパルスで、後半1000fsが折り返しパルス(共通)である。これらのパルスを分子に繰り返し照射したときの、ターゲット分布変化を図2に示す。2000fsごとのターゲット分布が、未知数を見つける確率を表している。グローバラーアルゴリズムによると、繰り返しごとの確率変化は1.0 0.25 0.25 1.0 0.25 0.25 ...となるはずであるが、シミュレーション結果はこれをほぼ再現している。

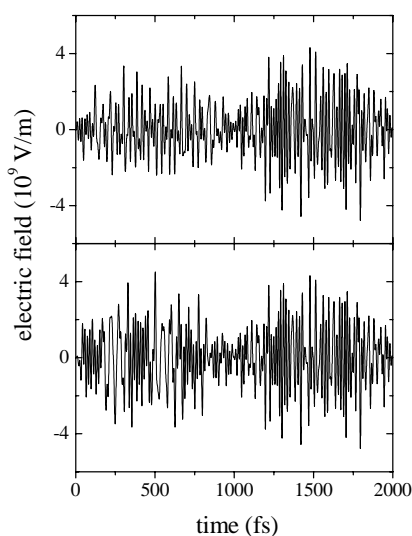


図1 ゲートパルス

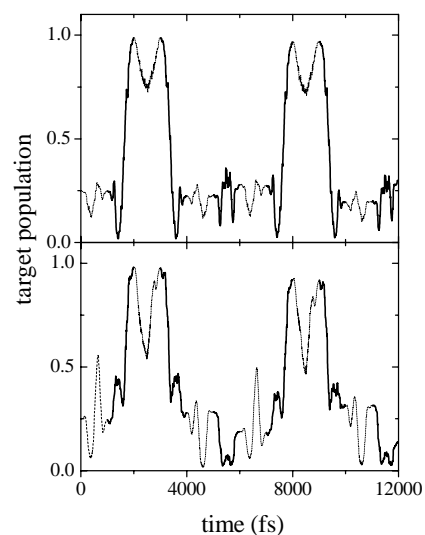


図2 ターゲット分布の時間変化

分子振動状態へのマッピングにより作成した量子ビットを利用すれば、量子検索アルゴリズムが実行可能であることを最適制御シミュレーションにより明らかにした。高い精度での量子ゲートパルス設計が求められるが、近年のパルス整形技術を適用すれば実現可能であると期待できる。

【参考文献】

- [1] C. M. Tesch, and R. de Vivie-Riedle, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 157901 (2002).
- [2] J. P. Palao, and R. Kosloff, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 188301 (2002).
- [3] Y. Ohtsuki, *Chem. Phys. Lett.* **404**, 126 (2005).
- [4] Y. Ohtsuki, *J. Chem. Phys.* **119**, 661 (2003).
- [5] Y. Ohtsuki et al., *J. Chem. Phys.* **120**, 5509 (2004); Y. Ohtsuki and H. Rabitz, *CRM Proceedings and Lecture Notes*, **33** 163 (2003).