量子情報・物性の新潮流

ー量子技術が生み出す多様な物性と情報処理技術ー

Stoquastic ハミルトニアンの断熱量子計算における量子加速

arXiv:1803.09954

藤井啓祐　（特定准教授）

京都大学 理学研究科 物理学・宇宙物理学専攻

JST さきがけ

はじめに:量子情報と物性

・量子多体系の性質を**量子情報**的な測度で定量化
・量子多体系がもつ**計算複雑性**

量子多体系の基底・熱平衡状態

物性

量子計算

可解模型
(自由フェルミオン, ベーテ仮説)

古典シミュレーション
可能なクラス
(マッチーゲート)

Leslie G Valiant. Quantum circuits that can be simulated classically in poly- nomial time. SIAM Journal on Computing, 31(4):1229–1254, 2002.

1次元ギャップ系
1次元臨界系

MPS, MERA etc

エンタングルメントの
量が制限された量子計算

On the role of entanglement in quantum computational speed-up
Richard Jozsa, Noah Linden (2003)

負符号問題がない
量子多体系
(量子モンテカルロ)

本研究

古典計算機になんとか落とし込む　**古典計算機ではできないタスクを明らかにする**

目次

- Stoquasticハミルトニアンとは？
- ハミルトニアンと量子計算の接続
- non-stoquasticな断熱量子計算の万能性
- Stoquasticな断熱量子計算の特徴付け
- まとめと未解決問題

目次

- **Stoquasticハミルトニアンとは？**
- ハミルトニアンと量子計算の接続
- non-stoquasticな断熱量子計算の万能性
- Stoquasticな断熱量子計算の特徴付け
- まとめと未解決問題

Stoquasticハミルトニアン

・適切な基底（標準基底）のもとで**非対角項が非正**.

・基底状態の係数（波動関数）が正の実数.

・**負符号問題が生じない**→量子モンテカルロによる平衡状態のシミュレーション

・横磁場イジング模型:

$$H = \sum_{ij} J_{ij} Z_i Z_J - h \sum_i X_i$$

・ボーズ・ハバード模型（負のホッピング）：

$$H = -\omega \sum_{ij} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) - \mu \sum_i n_i + U \sum_i n_i(n_i - 1)$$

・ハイゼンベルグ反強磁性模型（２部グラフ上）：

$$H = J \sum_{ij} (X_i X_j + Y_i Y_j + Z_i Z_j) - h \sum Z_i$$

[Bravyi, DiVencenzo, Oliveira, and Terhal (2008)]

Stoquasticハミルトニアンに関する素朴な疑問

Q1: これらの模型を量子シミュレータ上で作るご利益はあるのか？

Q2: 量子アニーリングマシンに量子加速はあるのか？

Algorithm zoo (https://math.nist.gov/quantum/zoo/): Adiabatic quantum algorithms for optimization problems typically use "stoquastic" Hamiltonians, which do not suffer from the sign problem. Such algorithms are sometimes referred to as quantum annealing.

John Preskill “Quantum Computing in the NISQ era and beyond”
https://arxiv.org/abs/1801.00862

Q2B: https://www.q2b.us/

https://www.dwavesys.com/home

So far quantum annealers have been applied mostly to cases where the annealing is *stoquastic* — that means it is relatively easy for a classical computer to simulate what the quantum annealer is doing [30]. What’s coming soon are non-stoquastic quantum annealers, which may have greater potential for achieving speedups over what the best classical algorithms can do.

目次

- Stoquasticハミルトニアンとは？
- **ハミルトニアンと量子計算の接続**
- non-stoquasticな断熱量子計算の万能性
- Stoquasticな断熱量子計算の特徴付け
- まとめと未解決問題

ハミルトニアンと量子計算の接続

Feynman’85 & Kitaev ‘00

(80年代にFeynmanは定常ハミルトニアンで量子計算する方法を考えていた!)

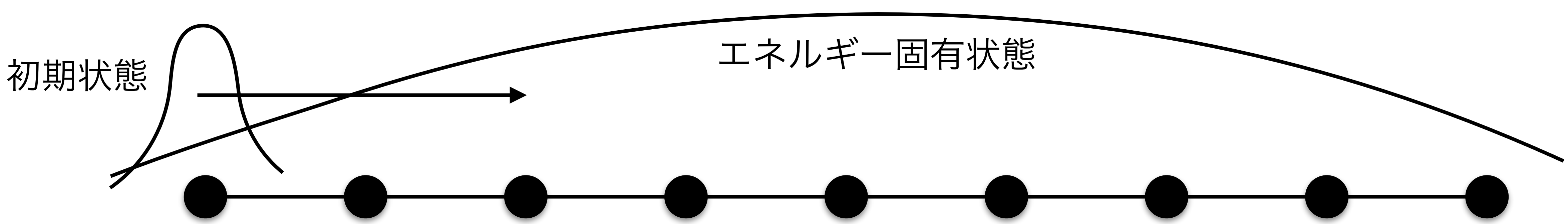
1次元 tight-binding模型:

$$H = \frac{1}{2}\sum_i \Big[\underbrace{(|i\rangle\langle i| + |i-1\rangle\langle i-1|)}_{\text{サイトエネルギー}} - \underbrace{(|i\rangle\langle i-1| + \mathrm{h.c})}_{\text{ホッピング項}}\Big]$$

厳密な基底状態:

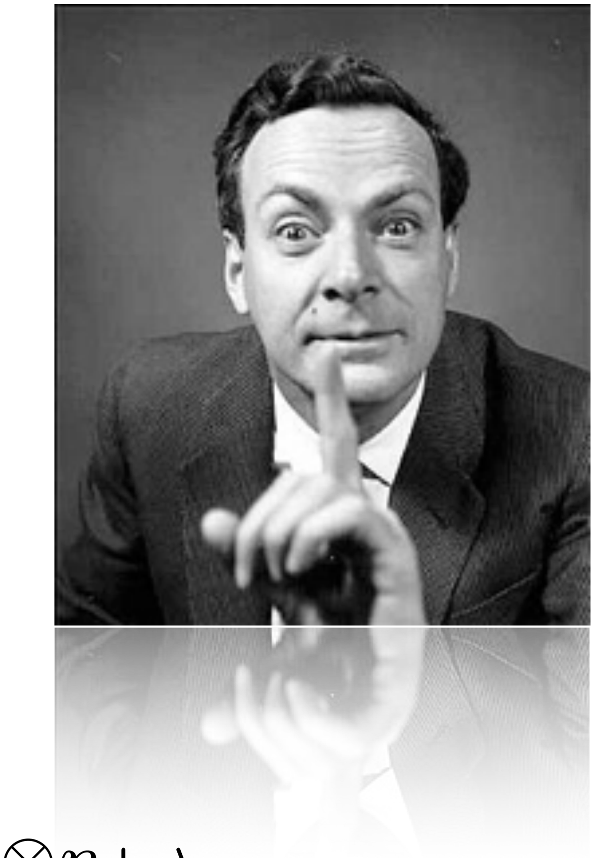
$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_i |i\rangle$$ (同じ重みの重ね合わせ)

時間発展:



Feynmanのアイデア

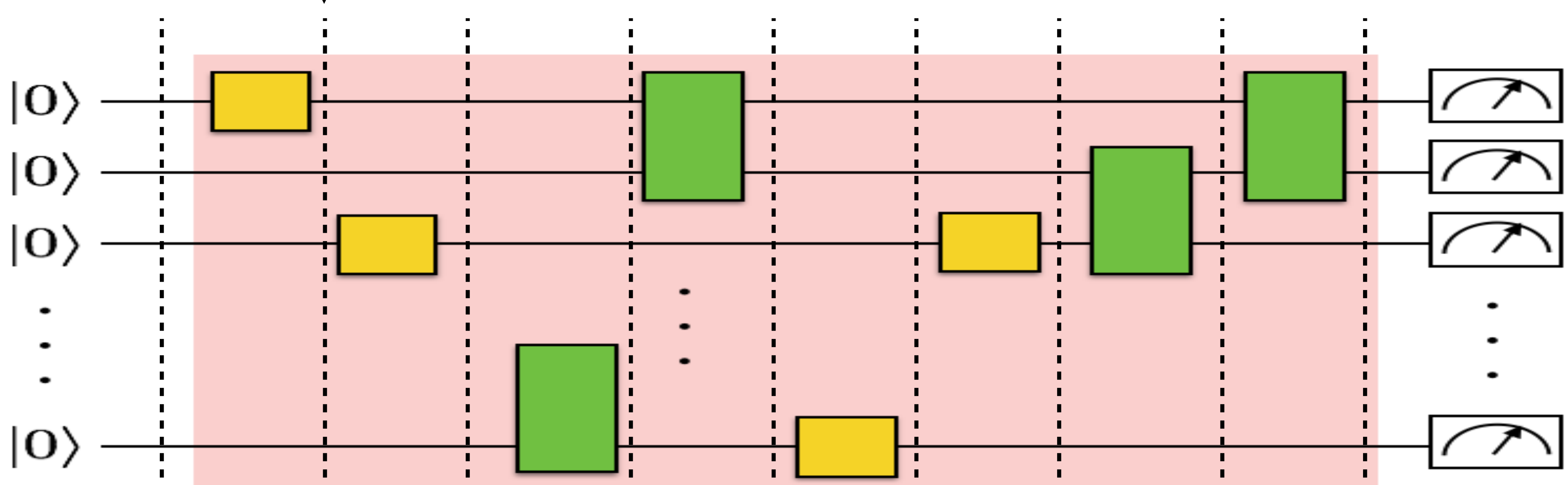
量子計算の各ステップをサイトに対応させる(Feynman ‘85).



$$\mathcal{H}_{\mathrm{work}} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{clock}}$$

計算をするシステム　　計算のステップを表すクロック

$$|0\rangle^{\otimes n}|0\rangle_{\mathrm{c}} \qquad U_1|0\rangle^{\otimes n}|1\rangle_{\mathrm{c}} \qquad \cdots \qquad U_t\cdots U_1|0\rangle^{\otimes n}|t\rangle_{\mathrm{c}}$$



クロックのおかげで量子計算の各ステップが直交状態

目次

- Stoquasticハミルトニアンとは？
- ハミルトニアンと量子計算の接続
- **non-stoquasticな断熱量子計算の万能性**
- Stoquasticな断熱量子計算の特徴付け
- まとめと未解決問題

non-stoquastic項も含んだ

断熱量子計算の万能性

Kitaev'00, Aharonov et al ‘04

- **計算システムの初期状態**のペナルティ項

$$H_{\rm in} = \sum_{i=1}^{n} |1\rangle\langle 1|_i \otimes |0\rangle\langle 0|_c$$

- **クロックの初期状態**のペナルティ項

$$H_{\rm initial} = H_{\rm in} + (I_c - |0\rangle\langle 0|_c),$$

- **tight-bindingハミルトニアン**(量子計算するホッピング項)

$$H_{\rm final} = H_{\rm in} + \sum_{t=1}^{T} \frac{1}{2}\left[|t\rangle\langle t|_c + |t-1\rangle\langle t-1|_c - \boxed{(U_t|t\rangle\langle t-1|_c + U_t^{\dagger}|t-1\rangle\langle t|_c)}\right],$$

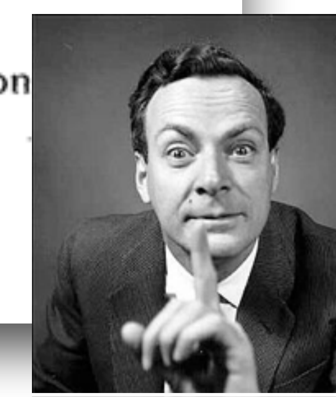
Feynman’s propagater Hamiltonian

We add to the n atoms, which are in our register, an entirely new set of $k+1$ atoms, which we'll call "program counter sites." Let us call q_i and q_i^* the annihilation and creation operators for the program site i for i = 0 to k. A good thing to think of, as an example, is an electron moving from one empty site to another. If the site i is occupied by the electron, its state is |1>, while if the site is empty, its state is |0>.

We write, as our Hamilton

$$H = \sum_{i=0}^{k-1} q_{i+1}^{*} q_i A_{i+1}$$

+ complex conjugate



- **断熱量子計算**:

$$H(s) = (1-s)H_{\rm initial} + sH_{\rm final},$$

基底状態と励起状態とのギャップは常に > 1/poly.

- **終時刻の基底状態**:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{T+1}} \sum_{t=0}^{T} U_t \cdots U_1 |0\rangle^{\otimes n} |T\rangle_c$$

non-stoquastic項も含んだ

断熱量子計算の万能性

Kitaev'00, Aharonov et al ‘04

- 計算システムの初期状態のペナルティ項

$$H_{\rm in} = \sum_{i=1}^{n} |1\rangle\langle 1|_i \otimes |0\rangle\langle 0|_c$$

- クロックの初期状態のペナルティ項

$$H_{\rm initial} = H_{\rm in} + (I_c - |0\rangle\langle 0|_c),$$

- tight-bindingハミルトニアン(量子計算するホッピング項)

We add to the n atoms, which are in our register, an entirely new set of $k+1$ atoms, which we'll call "program counter sites." Let us call q_i and q_i^* the annihilation and creation operators for the program site i for i = 0 to k. A good thing to think of, as an example, is an electron moving from one empty site to another. If the site i is occupied by the electron, its state is |1>, while if the site is empty, its state is |0>.

We write, as our Hamilton

$$H = \sum_{i=0}^{k-1} q_{i+1}{}^* q_i A_{i+1}$$

+ complex conjugate

ハミルトニアンがstoquasticなものに制限されたら？

$$- \boxed{(U_t|t\rangle\langle t-1|_c + U_t^\dagger |t-1\rangle\langle t|_c)}],$$

Feynman’s propagater Hamiltonian

- 断熱量子計算:

$$H(s) = (1-s)H_{\rm initial} + sH_{\rm final},$$

基底状態と励起状態とのギャップは常に > 1/poly.

- 終時刻の基底状態: $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{T+1}} \sum_{t=0}^{T} U_t \cdots U_1 |0\rangle^{\otimes n} |T\rangle_c$

目次

- Stoquasticハミルトニアンとは？
- ハミルトニアンと量子計算の接続
- non-stoquasticな断熱量子計算の万能性
- **Stoquasticな断熱量子計算の特徴付け**
- まとめと未解決問題

Stoquastic 断熱量子計算

非対角項:

$$-\left(U_t|t\rangle\langle t-1|_c + U_t^\dagger|t-1\rangle\langle t|_c\right)$$

正の要素しか持たないユニタリー演算子

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathrm{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \mathrm{Toffoli}$$

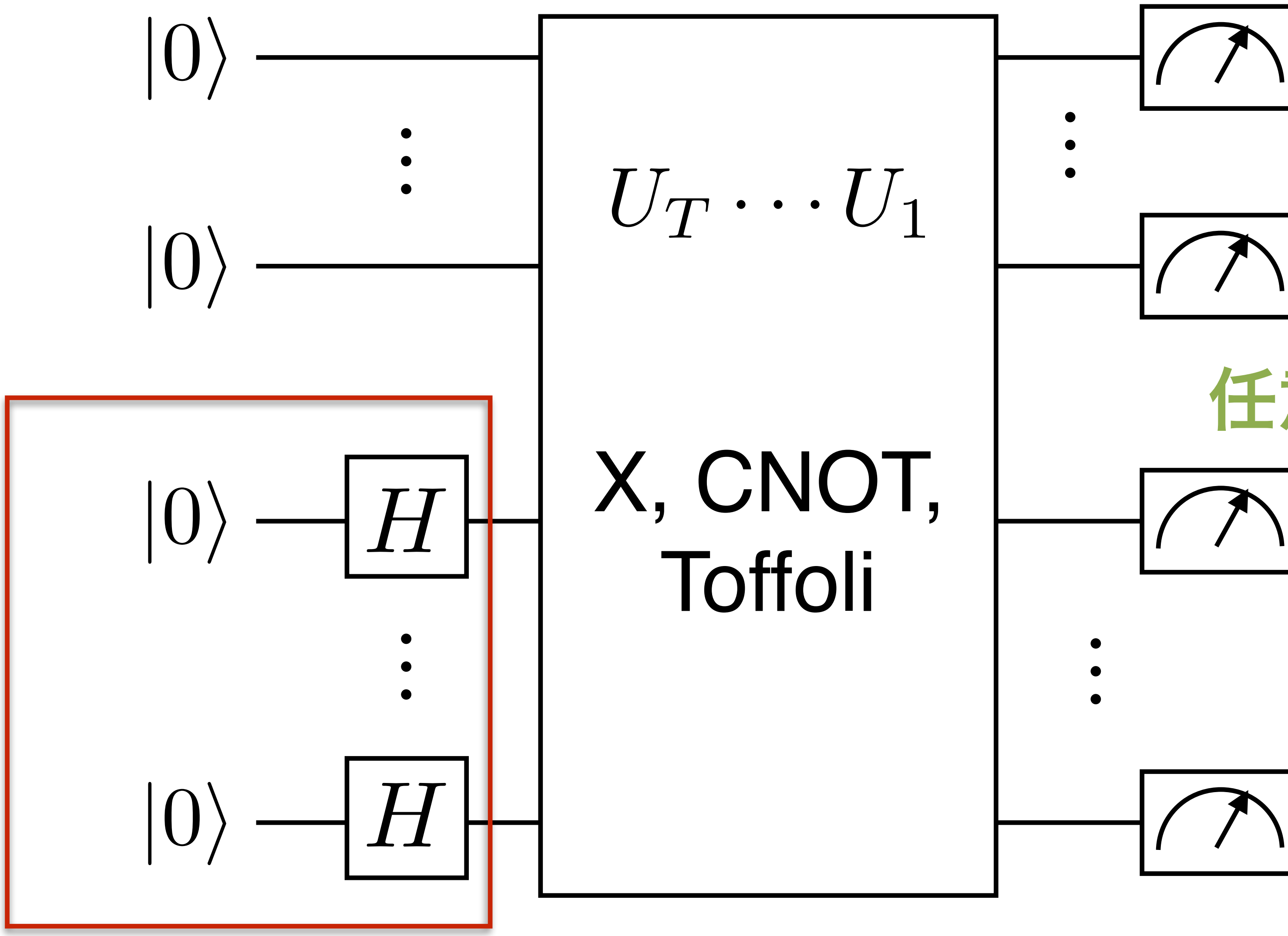
ビット反転

CNOT

CC-NOT

古典可逆演算に対応する量子演算なら
ビット列の置換なので正の要素しかない.

Stoquastic 断熱量子計算で出来る計算

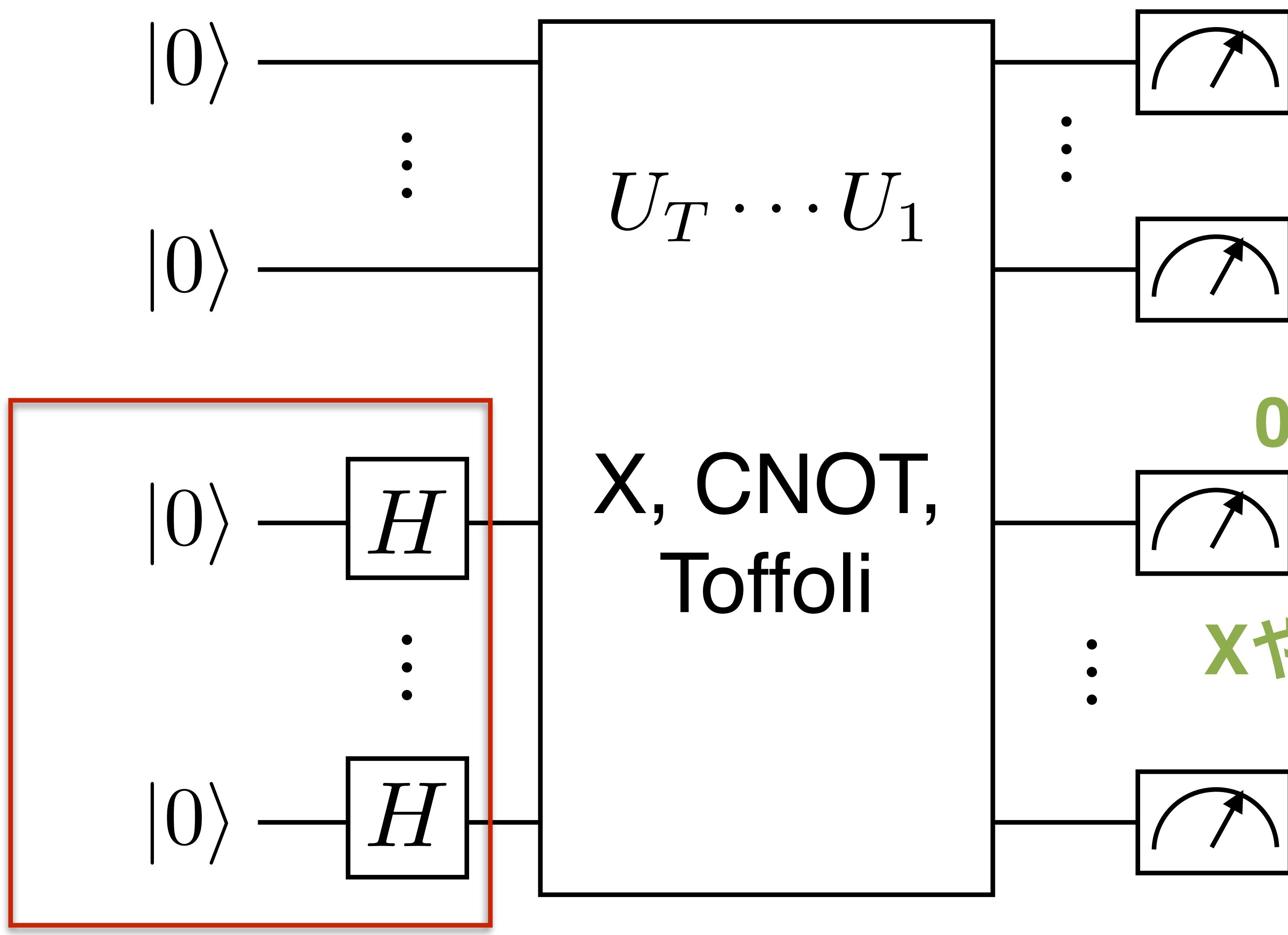


任意の1量子ビット測定

初期状態に対する重ね合わせの生成

古典可逆計算を量子計算で行ったもの

Stoquastic 断熱量子計算で出来る計算



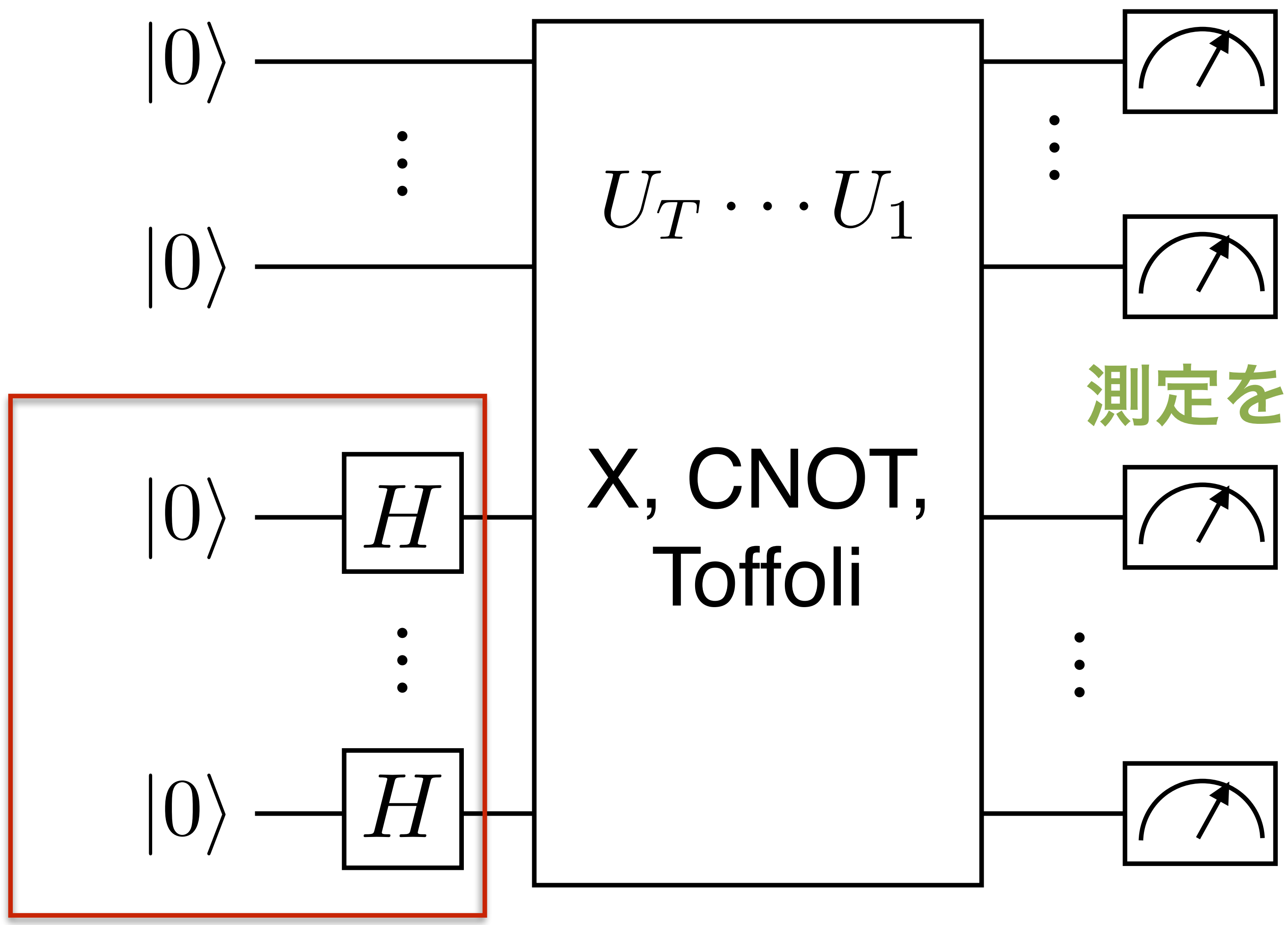
0,1の測定に制限
→古典計算

XやY方向の測定が重要

初期状態に対する
重ね合わせの生成

古典可逆計算を量子
計算で行ったもの

Stoquastic 断熱量子計算で出来る計算



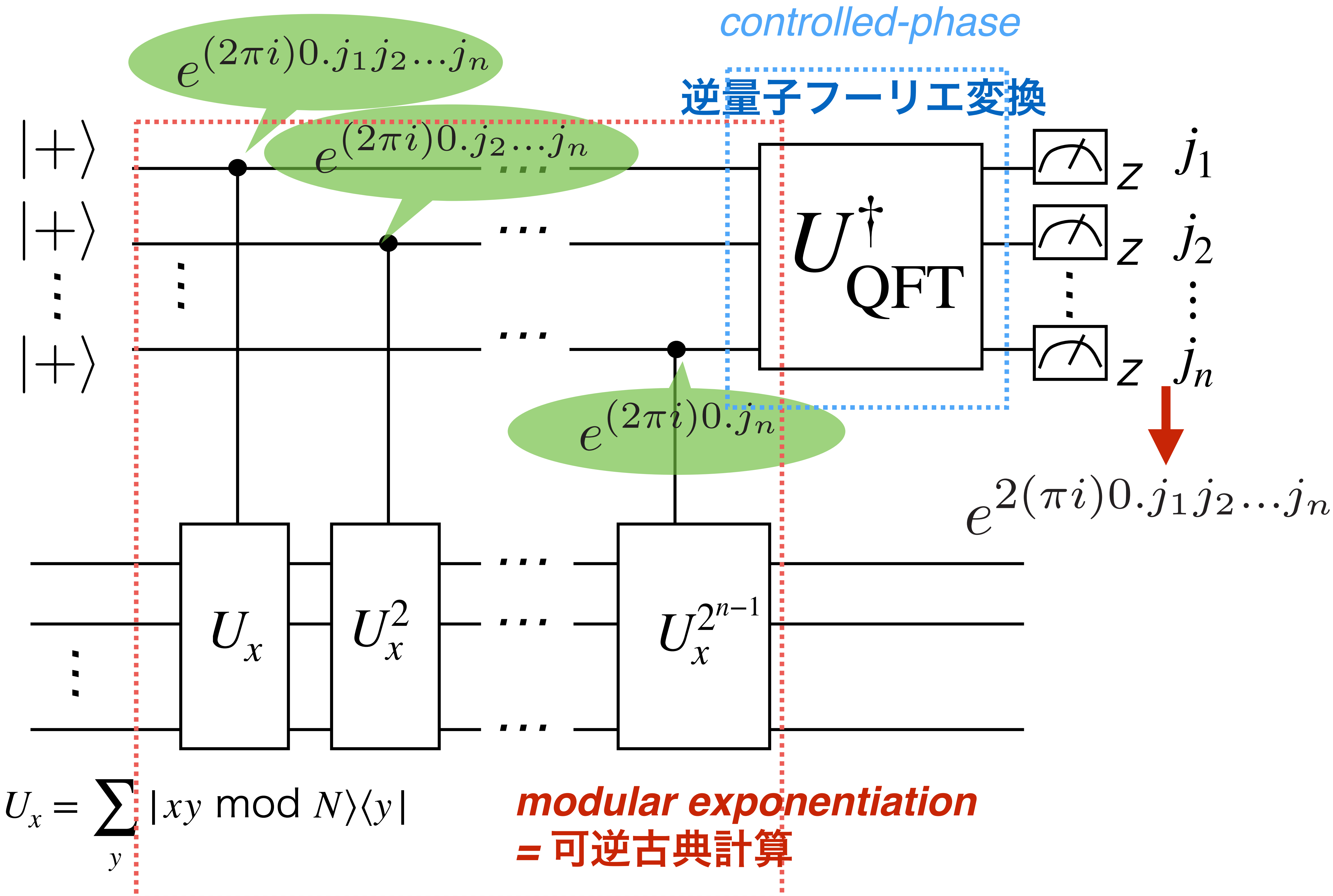
測定を適応的に行ってよい
→万能量子計算

初期状態に対する
重ね合わせの生成

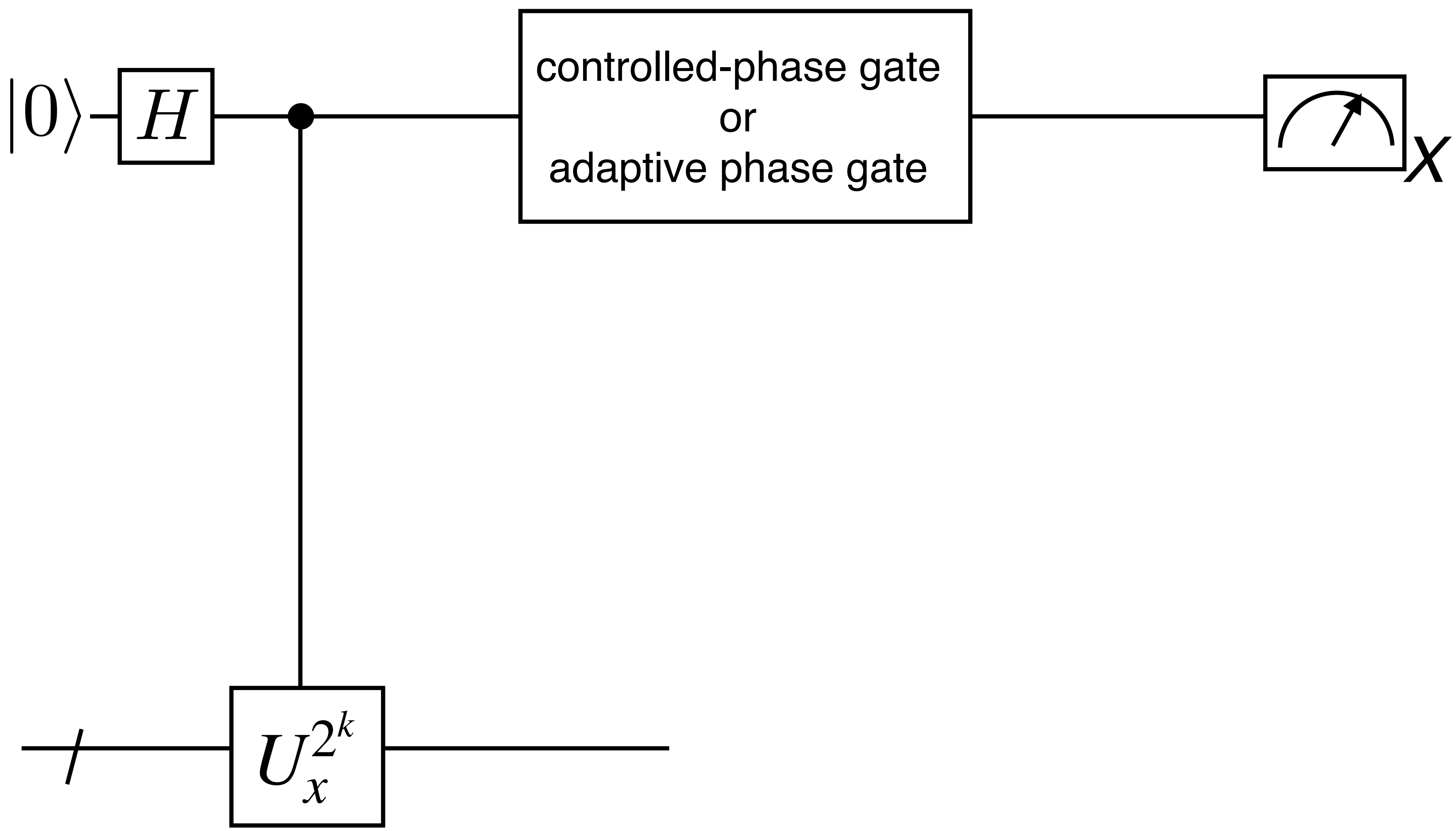
古典可逆計算を量子
計算で行ったもの

非適応的測定(一斉に測定)
の場合に量子加速はあるのか？

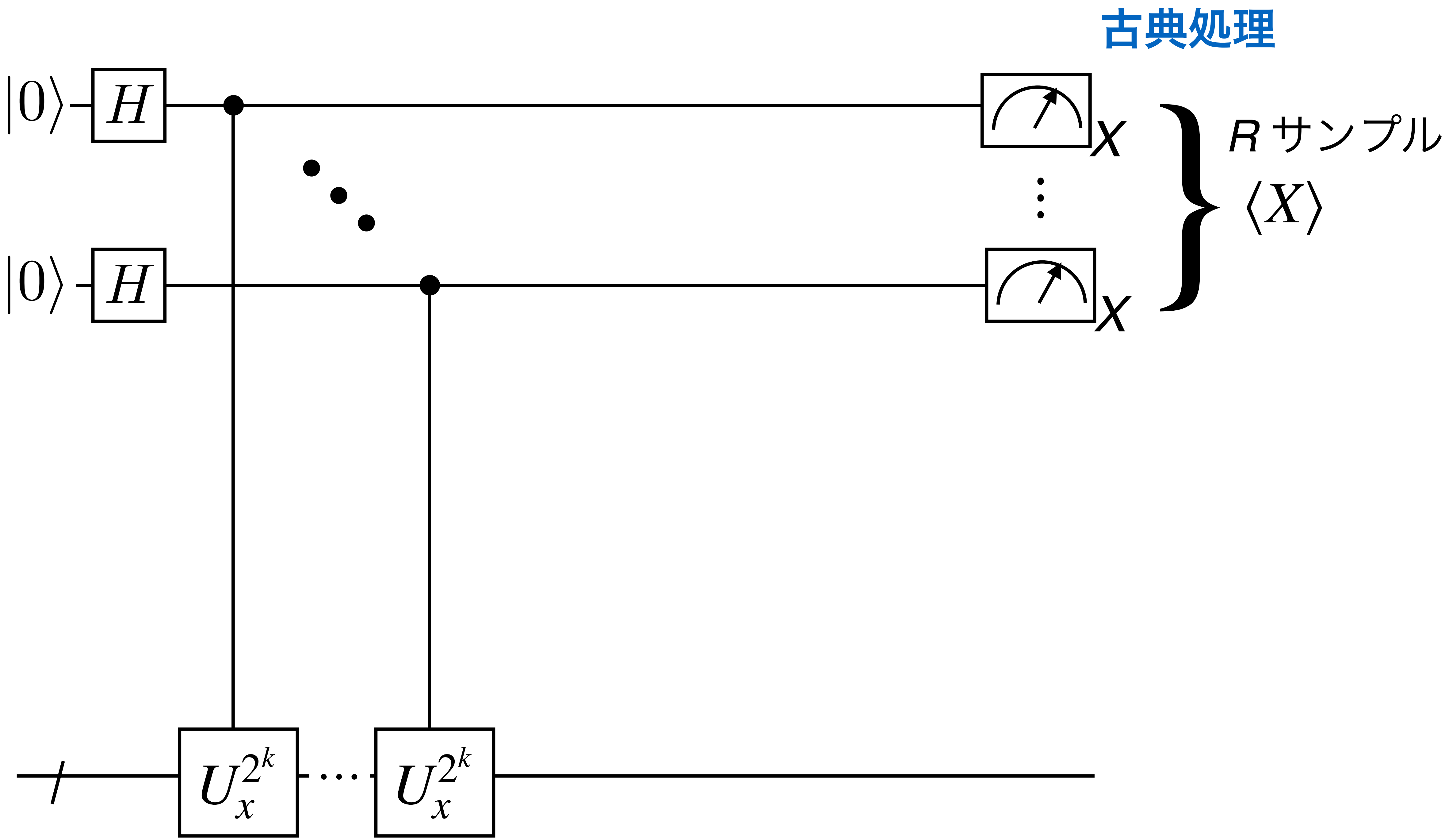
Kitaev'sの位相推定&Shorの素因数分解



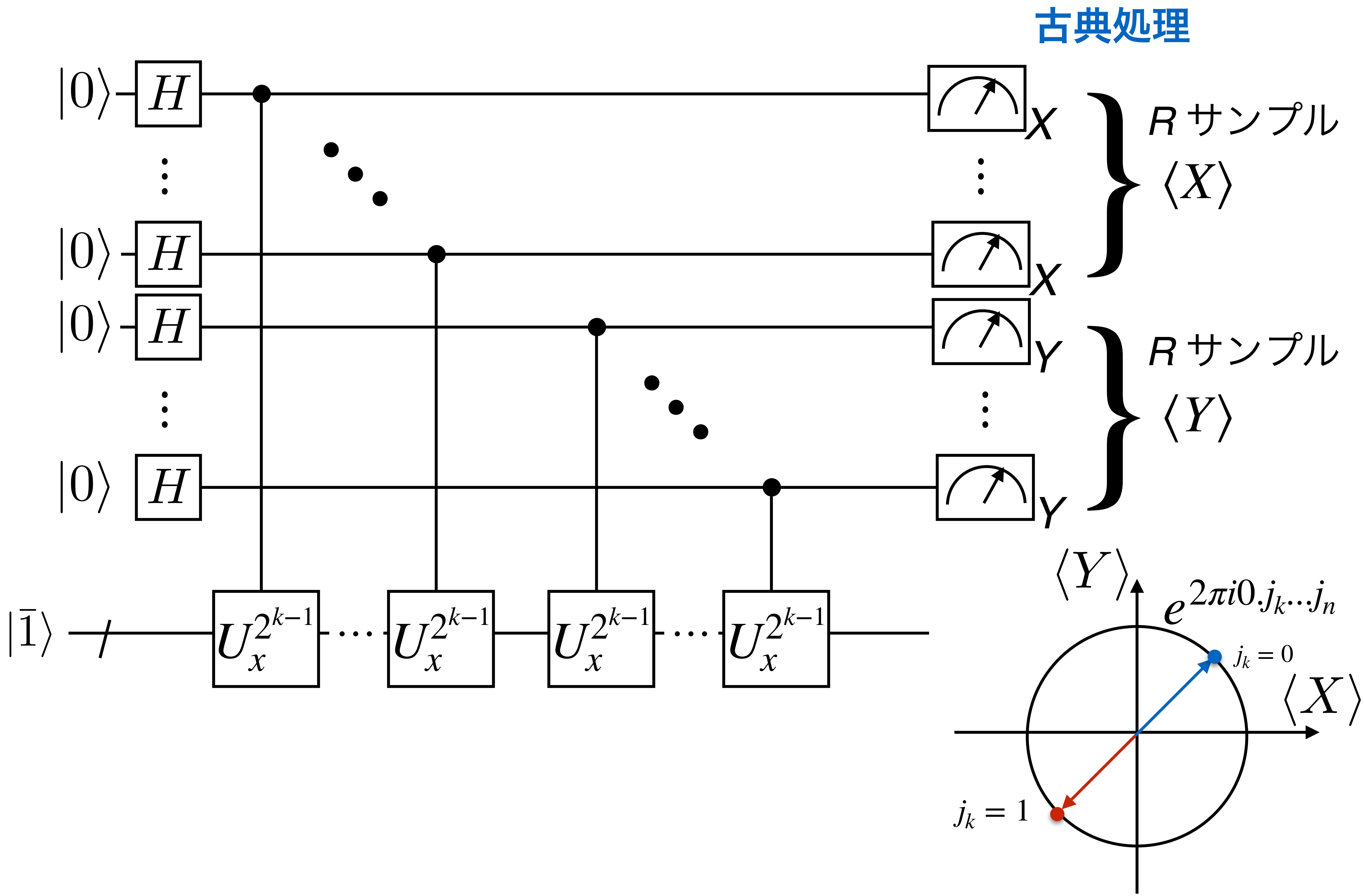
古典・量子ハイブリッド位相推定



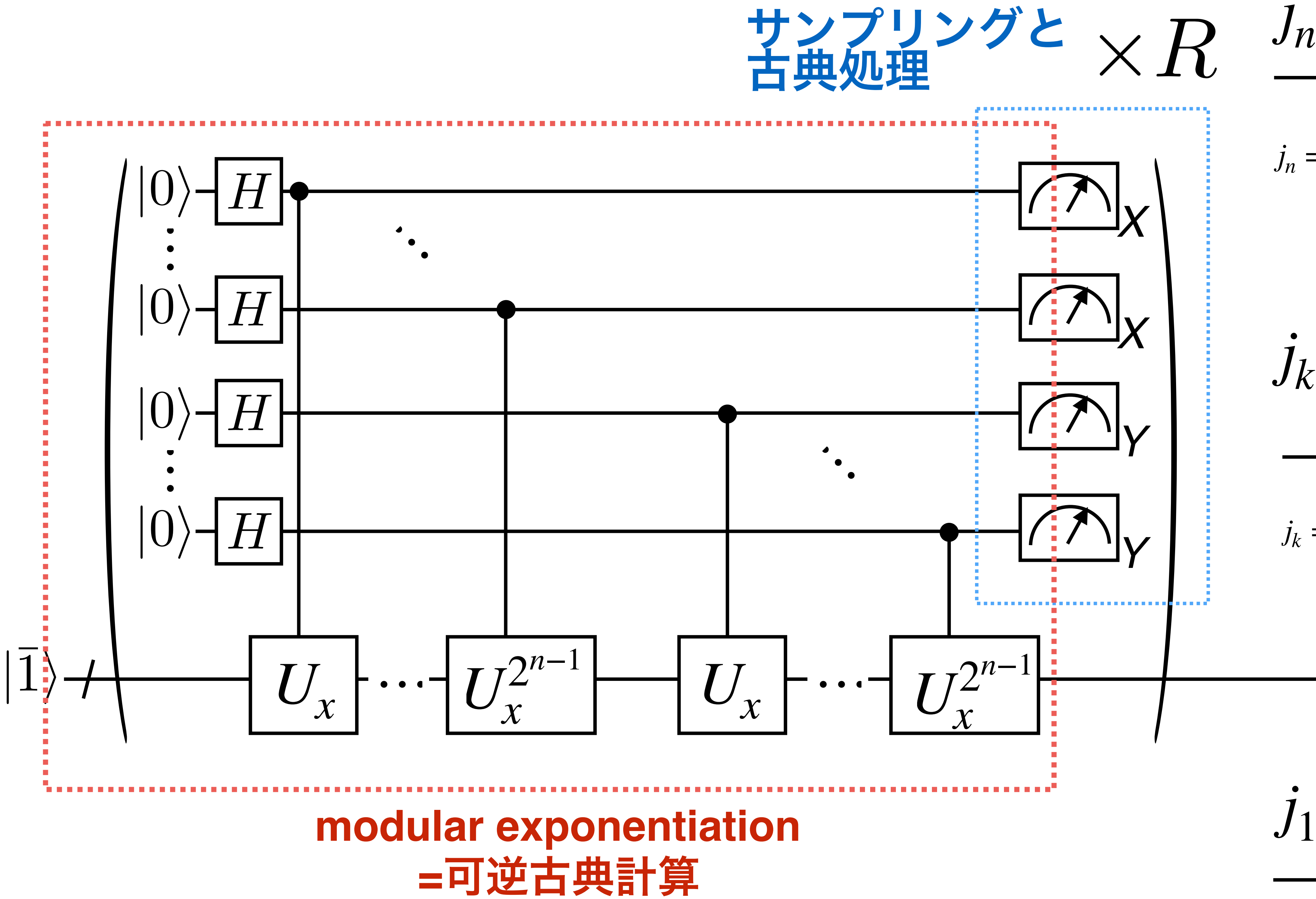
古典・量子ハイブリッド位相推定

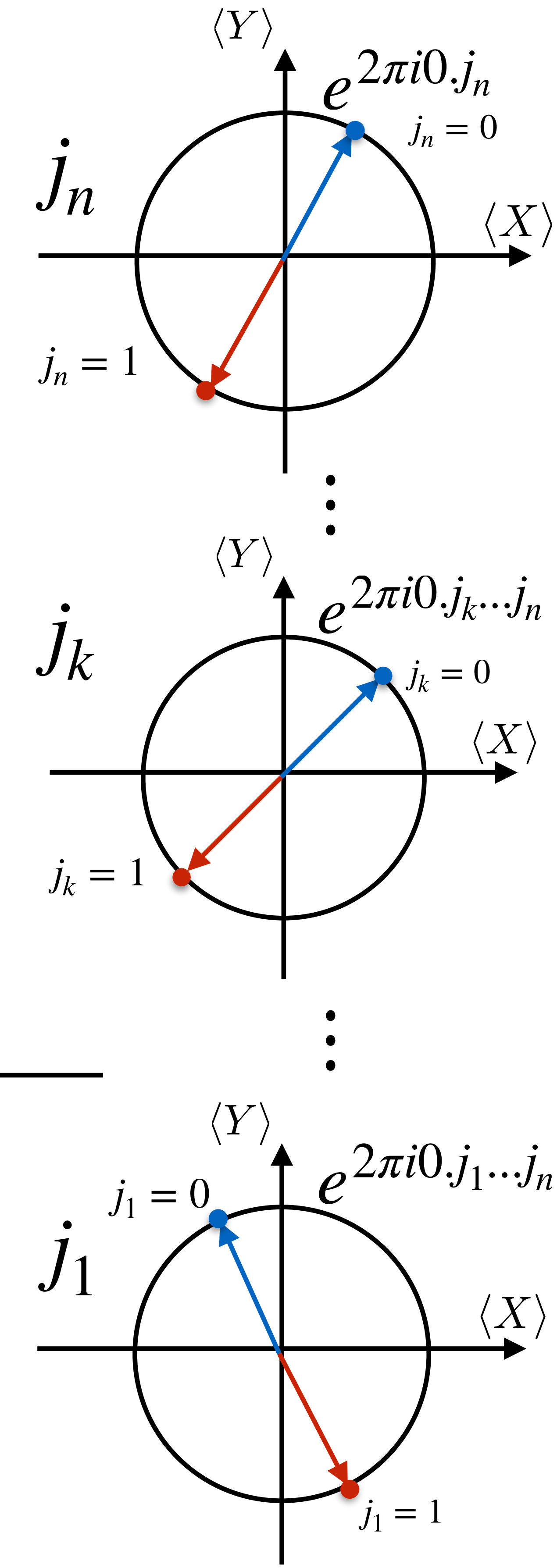


古典・量子ハイブリッド位相推定



古典・量子ハイブリッド位相推定





素因数分解(位相推定)をstoquasticハミルトニアン
の断熱量子計算で解くことができる

まとめと未解決問題

- **stoquasticハミルトニアンに制限した断熱量子計算でもパワフル**（ただし測定はXやYなどの標準基底ではない基底の測定が必要）.
- 負符号問題がない系でも量子モンテカルロで基底状態に対する**XやYの期待値の取得は困難**.
- Non-stoquastic項だけでなく，**非標準基底の測定が量子加速において重要**.
- **量子フーリエ変換は場合によってはサンプリングに置き換えできる**. 古典・量子ハイブリッドによって解ける問題のクラスが変わる初めての例.
- 横磁場イジングに制限した場合はまだ未解決（複雑な摂動理論）.
- 標準基底の測定の場合(例えばd-waveマシン）の量子加速は未解決.
- **非標準基底の測定をするためには重ね合わせが必要**なので, 今のd-waveのマシンではそもそもダメ. 量子コヒーレンスが重要（**量子マシンなら当然**）.
- 断熱量子計算の誤り耐性の理論は未構築.