量子計算中的幾何與最佳路徑問題

文／林俊吉

前言

一、量子電腦

量子電腦以量子力學的原理為基礎，運用量子位元（quantum bits, qubits）進行計算。相較於傳統電腦的二進制位元，量子位元能同時處於多態，這種特性使量子電腦具有巨大的計算能力。當量子電腦的量子位元數量達到 1,000,000（1M qubits）或更高時，其計算能力將遠超現有的超級電腦，能為許多複雜問題提供全新解決方案。目前量子電腦的硬體設計還處在多方嘗試的階段，其中以低溫超導的科技來建構是目前較為領先的方向，但也仍然有許多限制。量子電腦的軟體主要倚賴量子計算（quantum computation）這個領域的發展，打造量子電腦硬體所需要的作業系統便需要量子計算的理論。

二、複數與複數矩陣、李群與李代數

有別於傳統電腦二進制位元的訊息態（0 或 1），每個量子位元（qubit）可以表示為複數向量，作用於它們的量子邏輯門則可以用複數矩陣 SU（2）來描述。因此量子計算本質上依賴於複數相關的數學，尤其是複數矩陣的操作。此外，量子邏輯門（quantum logic gates）作用於這些複數向量，使得量子計算也與線性代數緊密相關。當 n 個量子位元串連起來時，其量子態的演化可以用暫稱為特殊複正交子群（special unitary matrices）的 SU（2^n）之元素 U 來描述，其中 U 都是 $2^n \times 2^n$ 的特殊複正交矩陣。量子計算的本質是透過這些矩陣實現量子態的演化，從而完成特定的計算。因此，SU（2^n）所具有的李群、李代數結構能為這樣的量子系統提供了數學基礎，這些數學結構與幾何概念也有密切相關，可為量子態的推演提供更深入的理解，為研究量子計算奠定了理論基礎。

三、量子電路設計與最佳路徑問題

量子電路是量子計算的核心主題之一，設計高效的量子電路涉及解決路徑優化問題，確保量子位元在執行操作時最小化能量損耗和誤差。我們暫稱之為最佳路徑問題，這個問題與經典的最短路徑問題（例如商人旅行問題）類似。但有別於最短路徑問題，在量子計算中的最佳路徑問題，其演化路徑需遵守量子力學的基本原理，同時由於量子邏輯門設計上的複雜性，無法將每個量子邏輯門都取為非平凡狀態來操作，一般來說，同一

時間只能以最多兩個非平凡的量子門來運作，這增加了量子電路設計裡頭最佳路徑問題的條件限制，也讓量子電路設計問題與所謂的次黎曼幾何（sub-Riemannian Geometry）裡的最佳路徑問題有所關聯。

幾何（黎曼幾何、次黎曼幾何、海森堡群、特殊複正交子群（SU（2^n）））

SU（2^n）不只有代數結構，同時也具有豐富的幾何，這樣的幾何結構為理解量子系統的演化提供了新視角。SU（2^n）是一個高維的李群，具有流形（manifold）的結構，特別是在一個 n 個量子位元的系統中，操作量子態的是 SU（2^n），這意味其自由度將隨著 n 的增大而呈指數增長。然而 SU（2^n）的代數結構、對稱性與豐富的幾何，讓我們有機會運用來簡化或幫助解決特定的量子電路計算問題。因此這裡的最佳路徑問題，涉及尋找 SU（2^n）上最優矩陣演化序列，以達極小化「能量」（例如量子門數量）的目的，這是處理量子電路設計的計算方法時至關重要的議題。SU（2^n）上的最佳路徑問題可以描述為黎曼或次黎曼幾何中的變分問題，關鍵在於如何優化其生成元的排列。許多人將量子電路設計看成探討 SU（2^n）如何有效分解操作以減少量子門使用的問題，這算是較為代數的處理方式。然而透過對 SU（2^n）的拓撲或幾何結構得到進一步的理解與掌握，也可以發展成為在高維度空間的變分方法，這是較為幾何的處理方式，可提供解決量子計算中尋找高效的量子電路設計問題的新方法。

一、黎曼幾何與次黎曼幾何

黎曼幾何可想成是一種彎曲的歐基里德空間，次黎曼幾何則可想成是在黎曼幾何上對切子空間加入額外的結構，這個額外的結構可用於像是量子控制理論中具逐點條件限制的問題，在如前所述的量子電路設計問題裡，這些逐點條件限制則是所謂的水平條件（horizontal conditions）。

二、海森堡群 H_1 與複正交子群（SU（2^n））

複正交群 SU（2^n）是典型的李群，用於描述量子態空間。在量子計算中，理解 SU（2^n）空間對於建立量子計算理論至關重要。海森堡群 H_1 雖然有別於複正交群 SU（2^n），但可當作一個過度簡化版本，因為保有豐富的數學結構，提供理論發展非常理想的試驗區。

最佳路徑問題（薛丁格方程、等周問題、Dido 問題）

最佳路徑問題是量子計算研究中的核心挑戰之一，涉及量子電路設計以高效實現各種量子態，同時如何最優的估計出最佳路徑的長度與量子位元數 n 的增長關係還是一

個有待解決的基礎問題。值得注意的是，2006 年 Michael Nielsen 等人在 Science 期刊所發表的著名文章指出，這個增長關係不會是指數增長，頂多是n^6 的關係，這個估計結果能否改善，還有待進一步的研究。註 1

一、薛丁格方程

薛丁格方程是描述量子系統的基本方程，也刻劃了 SU（2^n）中的曲線，使得在 SU（2^n）中尋找最佳路徑的問題成為高階微分的變分問題，這也使得前述量子計算中的最佳路徑問題有別於一般作為二階微分的最短路徑問題。

二、平面上的等周問題、Dido 問題

平面上的等周問題可以描述成：包圍一個給定面積大小的封閉曲線最小長度為何？中小學學生都知道，這個封閉曲線是一個圓，但是許多人並不清楚如何證明。其實。證明的方法有很多種，從中學的初等方法到大學微積分的論證方法都有。Dido 問題則可看成是當曲線有端點時的一種等周問題。

三、海森堡群 H_1 裡的等周問題、Dido 問題

海森堡群 H_1 可以視覺化為由 R^3 空間所構成的集合，而海森堡群的乘法結構則提供了R^3 空間上的每個點一個二維子切空間 D 的結構。當海森堡群裡的一條曲線上每一點的切向量都落在該點的二維子切空間 D 時，則稱該曲線滿足水平條件（horizontal conditions），我們在海森堡群裡探討最佳路徑問題時，必須讓曲線滿足水平條件。

我們以海森堡群 H_1上的一個特別的 Dido 問題為例，同時輔以底下圖 1 的寫意圖來說明。當 A 是R^3 空間的坐標軸原點，B 是 Z 軸上非原點的點，這時連接 A 與 B 的最短路徑，並不是沿著 Z 軸的直線，因為會違反在海森堡群裡的水平條件，一個正確而有效的做法是先尋找 X-Y 平面上的封閉曲線，其所包圍的面積為 A、B 兩點在 Z 軸上的高度差，同時讓該封閉曲線的長度最小化。從平面的等周問題得知，該封閉曲線是圓，再利用海森堡群 H_1上所謂的接觸結構（contact structure）將該圓拉回 H_1，形成 R^3 空間上滿足水平條件又連接 A、B 兩點的最短路徑。註 2

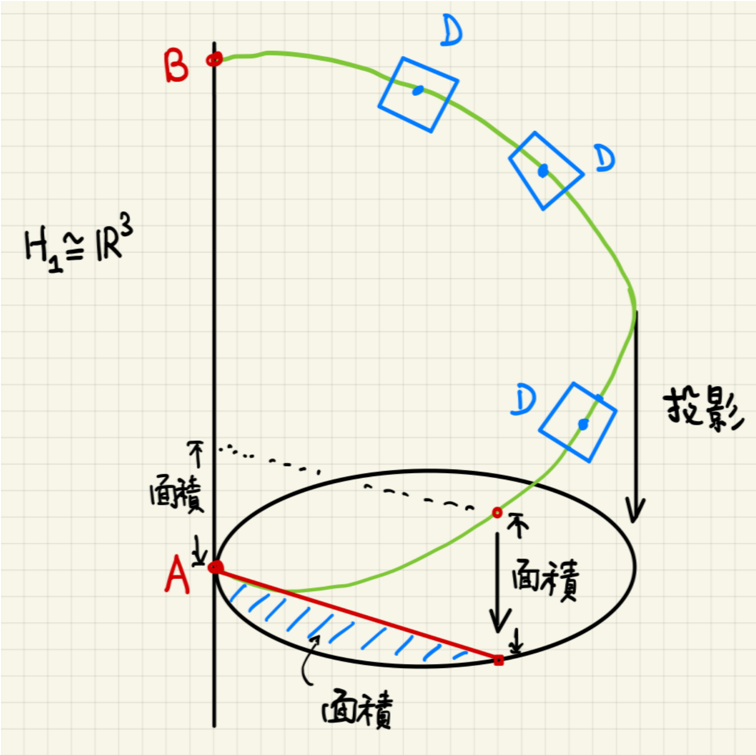

圖1、海森堡群 H_1 上的 Dido 問題

複正交子群 SU（2^n）上的最佳路徑問題與海森堡群 H_1 上的 Dido 問題有點類似，但一般來說，SU（2^n）的維度很高，也沒有如同海森堡群 H_1上面那麼好的投影結構（其實應該說是纖維化結構 fibration）與接觸結構，因此無法以上述簡潔的方法來處理。此外，所尋找的最佳路徑也並非如上所述的極小化曲線長度之 Dido 問題，而是極小化曲線較高階微分的能量（action/energy）。註 3

結語

量子計算的發展不僅依賴於物理學與數學的結合，其中的量子電路設計問題也需要我們深入理解幾何與最佳路徑問題的理論基礎。通過幾何方法描述量子態的演化和路徑優化，不僅為量子電腦的實現提供了理論基礎，也為解決其他科學問題開創了新的可能性。此外，發展大數據理論結合最佳路徑問題的理論也是未來一個重要方向。

量子系統極易受到外界干擾，因此量子誤差更正（quantum error correction）成為讓量子計算成為可行的重要關鍵。前面提到量子電腦的量子位元數量預期需達到 n=1,000,000 時，其計算能力才能超現有的超級電腦，其實理論上量子位元數達到 n=1000 時，其計算效率便已能超越現有超級電腦，但由於每一個量子位元的誤差估計

需要另外 1000 個量子位元來進行誤差更正，造成預期的量子電腦在實際運作上其量子位元需達到 1,000,000 。拓撲學可提供了一種較穩定的量（quantity）來操作，發展拓撲量子計算理論，能提供在充滿干擾的條件下對量子態穩定的糾錯碼。這是目前量子誤差更正理論的重要發展方向之一，不過不是本文所要介紹的內容。

量子計算與量子資訊（quantum information）甚至與物理的量子重力、黑洞理論也有很深刻的關聯，這些物理的理論與數學的拓撲學、幾何學是一體兩面，為量子系統的描述提供了豐富的視角。本文只是藉由其中的量子電路設計與最佳路徑問題切入，希望能讓讀者看見，連幾何學裡頭的等周問題居然也會出現在具體的應用問題，而一般來說，量子計算裡的工程、科技問題與物理、數學等理論科學，還有許多有關係密不可分的連結。因此數學與理論科學不僅能奠定科技發展的基石，也將促進科學、工程與科技中的根本性突破與應用，為解決人類面臨的複雜挑戰提供全新工具。

註 1：參見 Nielsen 等人的文章。
註 2：一般的 Dido 問題，或是海森堡群 H_1 上的 Dido 問題、如何利用海森堡群 H_1 上的纖維化結構（fibration）、接觸結構（contact structure）與曲線的水平條件（horizontal conditions），如圖 1 般聯繫起來，可參見 Montgomery 的書。
註 3：如果最短路徑問題是二階微分問題，那本文所述的最佳路徑問題則是四階微分問題。詳細可參見 Brody 等人的文章。

林俊吉
國立臺灣師範大學數學系教授

參考資料

[1] D. C. Brody, D. D. Holm, and D. M. Meier, Quantum splines , Phys. Rev. Lett. 109, 100501,（2012）.
[2] R. Montgomery, A Tour of Subriemannian Geometries, Their Geodesics and Applications, American Mathematical Society, 2006.
[3] M. A. Nielsen, M. R. Dowling, M. Gu, A. C. Doherty, Quantum computation as geometry, Science 311 （2006）, no. 5764, 1133–1135.