

2025年臺灣國際科學展覽會 優勝作品專輯

作品編號	160006
參展科別	物理與天文學
作品名稱	在量子電腦上模擬量子諧振子隨時間演化
得獎獎項	一等獎

就讀學校	臺北市立第一女子高級中學
指導教師	吳俊輝 黃光照
作者姓名	王宥涵

關鍵詞	<u>量子電腦、時間演化、量子諧振子</u>
-----	------------------------

作者簡介



我是來自北一女中的王宥涵，一直以來都對物理很有興趣，並且在高中的時候接觸到量子的奇幻世界。很高興能夠使用到量子電腦這種創新又強大的工具來完成專題研究。

很高興能夠獲選參加TISF這場科學盛宴。謝謝吳俊輝教授、黃光照老師與王之謙學長一路上的指導。期許能夠在展覽會上認識到同樣喜歡做研究的同儕。

2025 年臺灣國際科學展覽會

研究報告

區別：

科別：物理與天文學科

作品名稱：在量子電腦上模擬量子諧振子隨時間演化

關鍵詞：量子電腦、時間演化、量子諧振子

編號：

（編號由國立臺灣科學教育館統一填列）

摘要

Quantum computers, a rapidly developing technology in recent years, utilize quantum bits (qubits) based on quantum entanglement for computation. This paper aims to use quantum computers to calculate the time evolution operator for a harmonic oscillator. First, we find out the appropriate matrix size, spatial step Δx , mass (m), and angular frequency (ω) for the oscillator's operator and express the time evolution operator matrix in the position basis. After designing and simplifying the quantum circuit, we use IBM's quantum computer to simulate and compute the numerical values. By applying matrix correction to reduce readout errors, we achieve more accurate results. The simulation results within a single time unit closely match theoretical values. In the future, we hope to apply this quantum circuit to find eigenvalues of matrices or simulate larger systems.

量子電腦是近年來新發展的科技，利用量子糾纏態的量子位元進行計算。本文希望可以利用量子電腦計算諧振子隨時間演化算符。而這也是我第一次在量子電腦上模擬諧振子隨時間演化系統。首先我找出可以用於諧振子算符的合適算符矩陣大小、空間步長(Δx)、質量(m)、角頻率(ω)並且在位置基底下表現時間演化算符矩陣。設計並簡化量子電路後，使用 IBM 公司提供的量子電腦模擬並計算數值。我透過矩陣修正減少修正輸出錯誤產生的誤差，達到較精確的結果。模擬出在一個時間單位內的數值與理論值大致相符，未來希望可以利用此量子電路尋找矩陣的特徵值或是模擬更大型的系統。

壹、研究動機

傳統上，通常是利用傳統電腦來進行量子運算。然而，隨著資料量的增加，傳統電腦要使用的位元數也會呈指數型成長。只靠位元 0 與 1 進行計算的系統因為受到電腦硬體極限的限制而逐漸遇見瓶頸，尋找新的替代方法成為未來科技持續發展所不可避免的道路。幸運的是，近年來量子電腦的研發正蓬勃的進行著，透過操縱量子電腦內的量子位元進行量子運算，不但可以提升性能，同時也為解決量子問題帶來嶄新的契機。因此，如何有效地操作並使用量子電腦模擬成為近年來一個重要的研究領域。使量子電腦得以發揮性能的關鍵為設計合宜的量子電路使其得以進行運算。

在多種對量子電腦功能性的探索中，其中一個領域便是量子計算，即是使用量子電腦模擬量子系統。最近有研究使用量子電腦呈現出玻色子的運動狀態，研究發現使用量子電腦與傳統電腦結合模擬方式能夠獲得較高的效率，藉由使用變分量子演算法（VQE）模擬玻色子在不同物理條件下的運動模式，發現演算法能夠在硬體上進行小規模的模擬，並且此演算法

在與其他函數和演算法結合使用時能夠具有良好的性能，因此說明了玻色子研究在量子電腦上的潛能。

值得注意的是，玻色子獨特的自旋性質會使其在模擬上與費米子產生區隔。除了運動模式之外，多個玻色子在隨時間的演化上也不宜與費米子合併討論。因此在本工作中，我將利用量子電腦模擬玻色子中的諧振子系統隨時間演化的結果。雖然量子電腦是相當強大的演算工具，但在進行文獻探討之後，我目前為止尚未發現被用於研究諧振子隨時間演化的模型。這個模型的基礎原理並不困難，因此我希望可以證明此模型在量子電腦上是否有可能實現。若我可以設計出一套有效的量子電路，減量子電腦硬體帶來的不便，在理論上它可以被成功的模擬，並且是第一次在真實量子電腦上展示諧振子時間演化。在理論上，相較於傳統電腦，量子電腦可以創造前所未有的高速。

貳、研究目的

在學習量子電腦的運作方式之後，運量子電腦逐步完成以下各項研究：

- 一、觀察諧振子哈密頓算符在不同參數下的特徵值以尋找適合參數。
- 二、設計能觀察時間演化算符的量子電路。
- 三、在量子電腦上展示諧振子的時間演化算符。
- 四、在量子電腦上實際操作並優化結果。

參、研究設備及器材

本研究使用電腦模擬，硬體方面使用了傳統電腦以及 IBM 公司提供的免費量子電腦；軟體方面使用 Maxima 軟體來進行傳統電腦模擬，並使用 IBM quantum platform 平台連線至量子電腦。

肆、理論介紹及文獻探討

一、理論介紹

（一）量子電腦（quantum computer）

1.何謂量子電腦

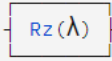
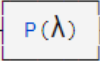
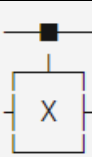
量子電腦為使用量子位元（qubit）進行運算的裝置。量子位元與位元（bit）不同之處在於它不只可以儲存 0 和 1 兩個位元，而是可以儲存量子疊加狀態，也就它的儲存方式會是零和一機率分布的函數。這將使量子電腦在處理指數量子運算的問題使用較少的

位元數，例如一個實體電腦儲存「 $|00\rangle$ 」、「 $|01\rangle$ 」、「 $|10\rangle$ 」、「 $|11\rangle$ 」四個數據需要八個位元。而量子電腦僅需要兩個 0 與 1 疊加的量子位元，每一個量子位元都可以被表示成 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ，其中 α 、 β 分別表示量子位元為狀態 $|0\rangle$ 、 $|1\rangle$ 的機率。

2. 量子電路

量子電腦透過使量子互相干涉疊加來達到期望的可能性。科學家設計出量子閘（quantum gate）來表示我們對量子位元做出的操作。而量子電路（quantum circuit）可以使量子電腦進行一個完整的運算，它包含三個部分：量子位元、量子閘與輸出結果。我們可以將量子閘及量子位元視為矩陣，每個量子位元是 1×2 的矩陣，矩陣的第一項表示量子位元在 $|0\rangle$ 狀態的可能性開根號，後項則是在 $|1\rangle$ 狀態的可能性開根號。輸出的結果會是數字，若量子位元的數量為 N ，輸出的數字就會有 2^N 個，它們代表量子位元的可能性。以 2 個量子位元的電路舉例，我們會稱輸出的四個數字 $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|10\rangle$ 、 $|11\rangle$ ，這分別代表系統在該電路輸出時呈現兩個位元均為 0 狀態、第二個量子位元為 0 且第一個量子位元為 1、第二個量子位元為 1 且第一個量子位元為 0、兩個位元均為 1 狀態的機率。

表 1 研究使用到的量子閘及其表示法

量子閘	矩陣表示法	電路符號
H	$\mathbf{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$	
RZ	$\mathbf{RZ}(\lambda) = \exp\left(-i\frac{\lambda}{2}\mathbf{Z}\right) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\lambda}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\lambda}{2}} \end{pmatrix}$	
P	$\mathbf{P}(\lambda) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\lambda}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\lambda}{2}} \end{pmatrix}$	
CX	$\mathbf{CX} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	

3. 量子電腦的輸出

量子電腦會將一個電路重複跑很多次，每一次跑完之後進行測量，每一個位元得到 0 或 1 的結果，在輸入量子電腦前，會先設定一個 shots，代表量子電腦要跑幾次該電路，例如 shots=20000 的話代表量子電腦會將同一個電路運行 20000 次，之後量子電腦會給出測量的結果也就是跑出幾次 0 幾次 1，此結果稱為 counts，如 0=10101, 1=9899。在跑無限次之後 counts/shots 便會接近 0 與 1 原本應該出現的機率。

4.量子電腦之應用

量子電腦與傳統電腦最大的差異在於它具有傳統電腦所沒有的基本閘。量子電腦目前最常見的應用不但出現在量子計算，在生化領域與個資保護均能有其貢獻。首先是量子計算，如同文獻探討所見，量子電腦可以模擬物理系統的運動狀態，並且讓我們更加了解粒子的物理性質；再來是生化領域，量子電腦可以模擬分子之間的交互作用，模擬更多的原子軌域和分子隨機運動，幫助人們尋找新的催化劑；最後是個資保護，由於量子位元沒有辦法被複製的特性，密碼能夠在被傳遞一次之後就消滅，並且可以透過分解巨大質因數很快速的破解現在使用的 RSA 加密系統，因此量子電腦的出現能夠大幅改變現行的加密方式。

(二) 諧振子隨時間演化

1.哈密頓算子 (Hamiltonian operator)

哈密頓算子可以表現整個系統的總能量，它可以被寫作 $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\mathbf{x}^2}{2}$ 。 m 是物體的質量， ω 為角頻率， $\mathbf{p}$ 是系統的動量算子， $\mathbf{x}$ 是系統的位置算子。兩個算符都具有厄爾米特 (Hermitian) 的性質，意指算符做轉置及共軛後形式不變。若想要將哈密頓算子量子化，必須滿足 ($\mathbf{x}\mathbf{p} - \mathbf{p}\mathbf{x} = \mathbf{I}$) 的條件。而 $\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ 是動能，與古典物理的定義相同， $\frac{m\omega^2\mathbf{x}^2}{2}$ 為量子的位能。哈密頓算子可以使用不同的基底，而這時候矩陣的表示方式也會不一樣，不過它們都具有相同的特徵值。

2.諧振子隨時間演化算子

觀測諧振子隨時間的演化的方式有兩個。第一個是諧振子態的轉變，稱做薛丁格繪景。另一個為可觀測算子的改變，稱為海森堡繪景。薛丁格繪景可以寫作 $|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t, t_0 = 0)|\psi(t_0)\rangle$ ， $\mathbf{U}(t, t_0 = 0)$ 為系統的時間演化算子，會隨著時間改變。另種為海森堡繪景，找尋到一個可觀測量的算符 $\mathbf{A}$ ，海森堡繪景可以寫作 $\mathbf{A}(t) = \mathbf{U}^\dagger(t) * \mathbf{A} * \mathbf{U}(t)$ ，這兩種算符中的隨時間演化算子是相同的，遵循以下關係式 $\mathbf{U}(t) = e^{i\mathbf{H}t/\hbar}$ 因此兩種繪景應會得到同樣的計算結果。 $\mathbf{H}$ 為哈密頓算子， t 為時間， $\hbar$ 為約化普朗克常數。當哈密頓算子與時間無關的時候，我可以透過薛丁格繪景觀測出量子態隨時間演化的關係圖。

(三) 展開諧振子隨時間演化算符

1.對角化矩陣

求出矩陣的特徵值再將其對角化是最準確的做法，我先假設一個矩陣 $2 * 2$ 的矩陣

$\mathbf{A}$ ，接下來求出矩陣的兩個特徵值 a_1, a_2 以及特徵向量 V_1, V_2 ，將兩個特徵向量合併成一個同樣為 2×2 的矩陣 $\mathbf{U}$ ，我會發現 $\mathbf{U}$ 與自己的轉置共軛矩陣相乘之後等於單位矩陣 $\mathbf{I}$ ，也就是 $\mathbf{U}^\dagger * \mathbf{A} * \mathbf{U} = \mathbf{B}$ ，這時的 $\mathbf{B}$ 會是一個對角線矩陣，每一個元素都是特徵值。

而對角線矩陣的指數方程有正確的形式，它的每個元素都會是原本矩陣相對應元素的指數方程。透過展開斜角矩陣就可以得知展開矩陣後的準確值。因此將矩陣對角化可以做為檢查輸出是否正確的工具。

2. Trotter-Suzuki 展開法

Trotter-Suzuki 為一種展開矩陣的指數函數之方式，其形式為 $e^{(\mathbf{A}+\mathbf{B})} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{\frac{\mathbf{A}}{n}} * e^{\frac{\mathbf{B}}{n}})^n$ 。其中 $\mathbf{A}$ 、 $\mathbf{B}$ 為矩陣。當 n 越大，其結果越精準。在研究中我希望將時間演化算子表達成量子電腦中原有算子的相乘形式，因此我需要以 Trotter-Suzuki 方式來做近似。

而在本文中的量子電路排列採用了一種較精準的方式。若希望算符演化 2 時間單位，在量子電路上會排列 2 個「演化 1 時間單位的算符」而非 1 個「演化 2 時間單位的算符」，這是因為當 Trotter-Suzuki 矩陣內的時間值越大，該矩陣的誤差也就越大，而多個小時間單位相乘的誤差會小於單一個大時間單位。以下圖 1 為例，圖 1 是 Toy Model 演化 128 時間單位的圖形，圖 1-1 是將多個演化算符做疊加，圖 1-2 是只使用單一演化算符，我可以很明顯的發現圖 1-1 顯然較為接近矩陣對角化產出的結果，圖中藍點為 Trotter-Suzuki 的實驗值，而紅線則是準確對角化矩陣的結果。關於 Toy Model 的其他分析出現在研究成果。

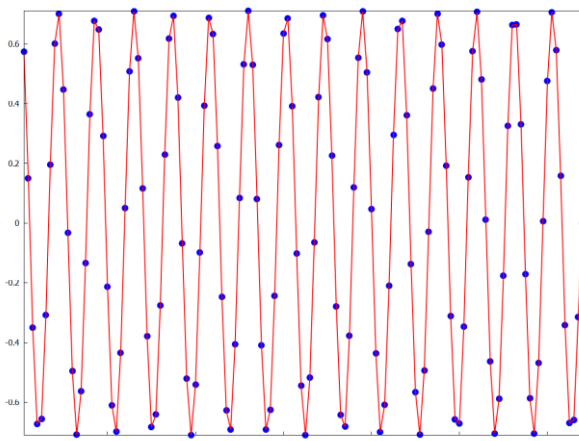


圖 1-1 排列多個演化算符的電路

(圖片來源：作者繪製)

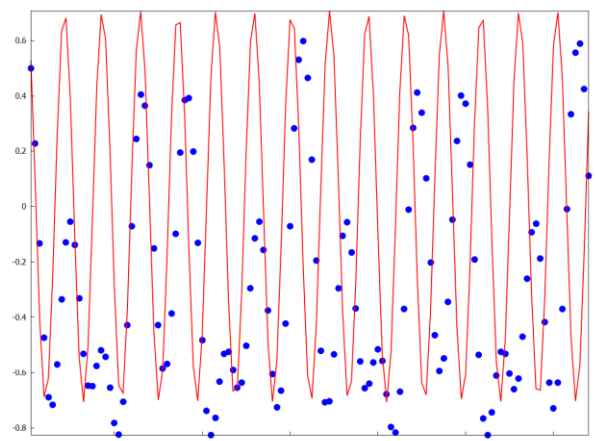


圖 1-2 排列較少演化算符的電路

(圖片來源：作者繪製)

3. 量子電路的矩陣表示

量子電路上的量子閘及量子可能性均可用矩陣表示，同一個量子位元上的量子閘依序相乘，而不同量子位元之間則會以張量積（**tensor product**）的方式連結在一起。每一個量子位元可視為具有兩個基底（ $|0\rangle$ 與 $|1\rangle$ ）的向量，因此一組 N 個量子位元的電路可視為一個 $2^N * 2^N$ 矩陣。

二、文獻探討

1996 年時，物理學家 **Seth Lloyd** 出版了一份與量子模擬有關的論文引起了我的注意。文獻探討量子模擬與傳統電腦模擬的相異之處，並解釋量子計算器在模擬量子系統時是可行的，使用量子計算器模擬哈密頓算子也會較傳統計算器快速。文中提到，在進行量子系統模擬時，量子計算器只需要使用數十至數百個量子閘即可完成的工作，傳統計算器可能需要用到阿伏伽德羅數量級（約 10^{23} ）的記憶體數量。考慮到在數量級上具有顯著差距的兩種計算模式，研究者們對量子計算於是抱有期待。

隨著量子計算的發展越來越成熟，**Adam Smith** 在 2018 年出版的論文中介紹了模擬時間演化的方式，論文引進了對角化矩陣、**Trotter-Suzuki** 演算法以及 **IBM** 公司提供的免費量子電腦計畫。論文模擬無自旋費米子的哈密頓量隨時間演化的現象，得到量子電腦在模擬時間演化上是可行的，且模擬之後的誤差處理是重要的。另外，研究也提出量子電腦模擬的時間會隨著 **Trotter-Suzuki** 步數的增加而呈現線性增長的現象。

而若我將時間演化的模擬限縮到量子諧振子，會發現 **Raffaele Miceli** 在 2018 年曾使用位置基底跟能量基底表現諧振子的哈密頓算子，先進行兩個表現方式之特徵值的比較，發現位置基底的特徵值會隨特徵值大小增加逐漸失準，而能量基底則會出現兩個相同的特徵值以致失準。該份研究使用變分量子演算法（**VQE**）以傳統電腦搭配量子電腦計算，傳統電腦收到量子電腦的結果之後，再做一系列的處理再丟回量子電腦計算，該步驟如此重複數次。研究將 **VQE** 使用於 10 個量子位元的諧振子系統，發現傳統電腦隨著量子位元的增加將會無法負擔龐大的計算量與資訊儲存量。我發現這篇研究並未實際連線到量子電腦，而前人有用過量子電腦展開時間演化算符，也有證明諧振子的電路是可在量子電腦上排列的。因此我希望可以利用 **Trotter-Suzuki** 演算法來嘗試在量子電腦上排列出諧振子的時間演化算符，觀察與前人研究的異同。

伍、研究過程及研究方法

一、研究架構

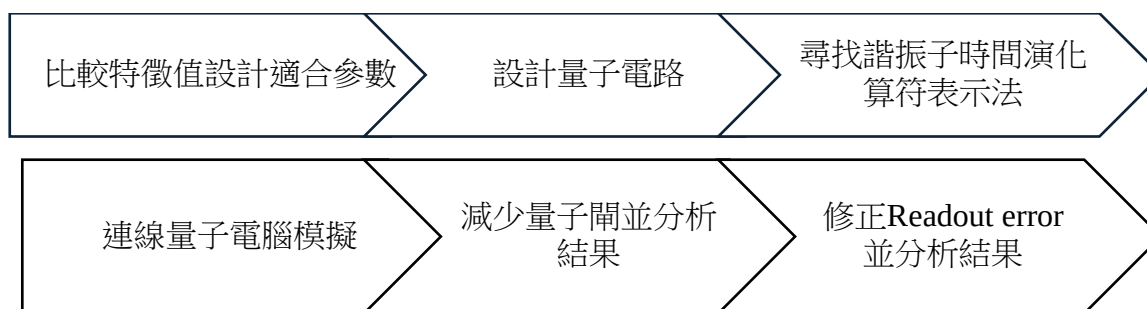


圖 2 研究流程圖

二、研究規劃

這次我希望在量子電腦上模擬薛丁格繪景 $e^{i\mathbf{H}t/\hbar}|\psi(t_0)\rangle$ ，想要把它展開為能夠在量子電腦上實際模擬的版本，而由於在量子電腦上虛數沒有辦法呈現，因此我希望可以利用共軛虛數相乘虛部會消失的方式來解決這個問題，設計一組量子閘序列，達到虛實部分開的效果，在設計的時候使用 Trotter-Suzuki 展開法分解時間演化算符，將複雜的單一算符分解成多個量子電腦可處理的包立(Pauli)矩陣，在進行模擬的過程滾動式修正，減少模擬誤差以達到精準模擬的成果。

表 2 包立矩陣

$\mathbf{X} (\sigma_1)$	$\mathbf{Y} (\sigma_2)$	$\mathbf{Z} (\sigma_3)$	$\mathbf{I}$
$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

三、研究步驟

(一) 透過觀察演化算符在不同參數下的特徵值以確認電路之正確性

一個正確的量子諧振子哈密頓算符必須具有正確的特徵值 $E = \left(\frac{1}{2} + n\right) \hbar\omega, n \in \mathbb{N}$ ，其中是 E 特徵值大小， $\hbar$ 是約化普朗克常數， ω 是角頻率。而由於研究使用算符近似，因此需要調整各個參數，使得模擬出的演化算符接近實際時間演化算符。本研究調整了算符矩陣大小、空間步長、質量、角頻率。找到適合的參數以為模擬做準備。確認正確的參數以及矩陣的正確性，就可以開始量子電路的設計。

(二) 利用 Toy Model 設計量子電路

1. 量子電路設計

研究設計出的量子電路如圖 3，以兩個量子位元的系統做示例， $\varphi(\text{psi})$ 為起始量子態，於兩個 $\mathbf{H}$ 閘之間安插一個 $\mathbf{C}$ 閘， $\mathbf{C}$ 閘為一個複合量子電路，它的形式像

$\begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & U^* \end{pmatrix}$ ，是由時間演化算子與其共軛算子所組成。因為它是一個么正算子（unitary

operator)，因此它必然可以使用量子閘排列出來。這個電路主要的目的是要分離出時間演化算符的實部與虛部，因為矩陣指數寫成三角函數的形式之後會產生兩個分離的相態，而我會想要分別去關注它的相態，以獲取更多與諧振子算符有關的資訊。因此我藉由 **H** 閘將他們分別投影到 q_1 的 $|0\rangle$ 、 $|1\rangle$ 。而 φ 會是一個 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ 的初始狀態，我將 q_0 中 $|0\rangle$ 的係數令為 $f_1(t)$ ， $|1\rangle$ 的係數令為 $f_2(t)$ ，代表在時間 t 時的係數。電路的最後加上一個 **P** 閘、一個 **P** 閘，**H** 閘與最先的 **H** 閘兩兩成對，**P** 閘則是為了給電路一個相態使其符合時間演化算符。電路在經過測量之後會輸出八個數字，照先後順序分別是 f_1 的實部平方及虛部平方、 f_2 的實部平方及虛部平方。

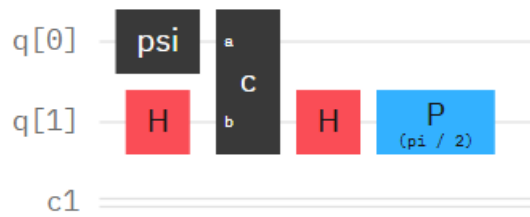


圖 3 量子電路設計示意圖（圖片來源：作者繪製）

2. 用 Toy Model 實驗電路設計是否正確

我期望可以設計出能觀察時間演化算符的量子電路，因此我嘗試了一個利用簡單矩陣 $\begin{pmatrix} 0.2 & 0.7 \\ 0.7 & -0.2 \end{pmatrix}$ 替代哈密頓算符的模型，並以 $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ 做為初始狀態 φ 。利用以下三種方式計算出量子態的時間演化，並且比較三者之結果：

1. 利用 **maxima** 應用程式進行矩陣對角化。
2. 利用 **maxima** 應用程式做 Trotter-Suzuki 展開。
3. 利用 **QISKit** 程式語言排出量子電路，輸出結果。

比較對角化矩陣與量子電路結果，我期許可以設計出正確的量子電路以進行下一步驟，也就是將玩具模型的簡單矩陣替換成複雜的諧振子哈密頓矩陣。

（三）構思如何在量子電腦上展示諧振子隨時間演化算符

1. 概述

不同於先前實驗以能量的角度展開時間演化算符，本研究使用位置作為基底，將時間演化算符分成 $\frac{p^2}{2m}$ 與 $\frac{m\omega^2 x^2}{2}$ 兩個部分分別展開，利用與 **Toy Model** 相同的步驟比較結果。使用位置作為基底相當於我可以將每一個量子位元看成一個位置，而該量子位元在特定時刻的可能性便會是該時刻諧振子出現在該位置的機率。我先將此兩個算符變成量子閘的形式。接著將它們轉換成時間演化算符，首先我知道要展開 e^{iHt} ，而其中 **H** 若能

拆成量子閘相加，就會得到 $(\prod e^{\frac{i \text{量子閘} t}{n}})^n$ ，目前已經找到展開 $(\prod e^{\frac{i \text{量子閘} t}{n}})^n$ 的方法，而本研究的主要重點在於能否將 **H** 拆成量子閘相加，並使用盡量少的量子閘。而這次實驗我使用的是 4×4 的哈密頓算符，根據前面的量子電路設計，需要 3 個量子位元。

2. 展開 $e^{\frac{i \text{量子閘} t}{n}}$

首先我發現 σ_1 、 σ_2 、 σ_3 之間可以透過量子閘互相轉換，有以下兩種轉換：

$$\mathbf{H} * \sigma_3 * \mathbf{H} = \sigma_1$$

$$\mathbf{P}\left(\frac{\pi}{2}\right) * \mathbf{H} * \sigma_3 * \mathbf{H} * \mathbf{P}\left(-\frac{\pi}{2}\right) = \sigma_2$$

因此我發現可以將待展開算式中的 σ_1 、 σ_2 換成 σ_3 並在展開完之後進行修正。會這樣做的原因是為 σ_3 的指數型態是 **RZ** 閘，而 **RZ** 閘是一個對角化矩陣，對角化矩陣有許多方便的特性有益於量子閘排列。我令 $\mathbf{A} = \text{diag}(a_1, a_2, a_3, \dots, a_n)$ ，則有以下性質

$$e^{i\mathbf{A}} = \text{diag}(e^{ia_1}, e^{ia_2}, \dots, e^{ia_n})$$

其中 $\text{diag}(a_1, a_2, a_3, \dots, a_n)$ 代表對角線上元素依序為 $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ 的對角化矩陣，以 $e^{\frac{i\sigma_1 \otimes \sigma_1 t}{n}}$ 為例，為了方便表達，我將指數前的係數簡化成 a 。而我會希望可以展開的是對角化矩陣，因此先展開 $e^{\frac{i\sigma_3 \otimes \sigma_3 t}{n}}$ 。另 $e^{\frac{i\sigma_3 \otimes \sigma_3 t}{n}}$ 為 $\mathbf{U}$ ， $\begin{pmatrix} \mathbf{U} & 0 \\ 0 & \mathbf{U}^* \end{pmatrix}$ 寫成 $\text{diag}(e^{iat}, e^{-iat}, e^{-iat}, e^{iat}, e^{-iat}, e^{iat}, e^{iat}, e^{-iat})$ 。首先我發現若將 **RZ** 閘放在 q_0 上會得到矩陣 $\text{diag}(e^{-iat}, e^{iat}, e^{-iat}, e^{iat}, e^{-iat}, e^{iat}, e^{-iat}, e^{iat})$ ，而這兩個對角線矩陣的差異只在指數上正負號的不同，只要交換幾個元素就可以解決這個問題，而我知道 **CNOT** 負責交換的功能，經過嘗試之後發現 **CNOT** 需要被加在電路外層，如圖 4 所示。而我又知道 $e^{\frac{i\sigma_3 \otimes \sigma_3 t}{n}} = \mathbf{H} \otimes \mathbf{H} * e^{\frac{i\sigma_3 \otimes \sigma_3 t}{n}} * \mathbf{H} \otimes \mathbf{H}$ ，因此將 **H** 閘排列在電路上，就可以將算符表達出來。

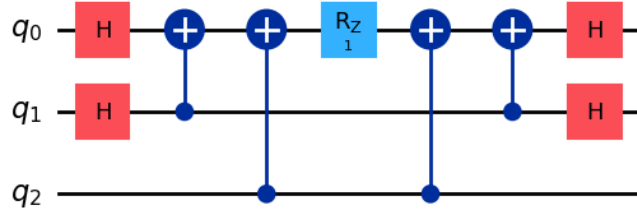


圖 4 $e^{\frac{i\sigma_1 \otimes \sigma_1 t}{n}}$ 量子電路（圖片來源：作者繪製）

3.動能算符

這邊的動能算符指的是諧振子算符中的 $\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ 項次，而其中的動量算符平方($\mathbf{P}^2$)的矩陣型態為：

$$\langle x' | \mathbf{P}^2 | \Psi \rangle = (-i\hbar)^2 \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \Psi(x') = \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \Psi(x')$$

而到這裡我發現無法使用數值方法表示微分，因此導入有限差分（finite difference method）方法，而這也使我可以繼續推導算式：

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^2 \Psi(x') &= -\frac{\Delta \Psi(x')^2}{\Delta x'^2} = -\frac{1}{\Delta x'} \left(\frac{(\Psi(x' + \Delta x) - \Psi(x')) - (\Psi(x') - \Psi(x' - \Delta x))}{\Delta x} \right) = \\ &= \frac{1}{\Delta x'^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{pmatrix} \Psi(x') \end{aligned}$$

此矩陣的量子閘表示法如下，於是我找到動量算符的量子閘展開方式。

$$\frac{\mathbf{P}^2}{2m} \Psi(x') = -\frac{1}{\Delta x'^2} \frac{1}{2m} (-2 * \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + 2 * \sigma_2 \otimes \sigma_2 + \mathbf{I} \otimes \sigma_1 + 2 * \sigma_1 \otimes \sigma_1) \Psi(x')$$

這邊另外討論一個情況，在週期性(Periodic)情況下，動能算符能夠使用較少的量子閘排列出來。週期性情況不同於一般情況的點在於位置基底的取值，在右上角與左下角分別加上 1，使矩陣變為

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

經過我的計算，週期性情況 σ_2 為首的張量積矩陣均會加減消去，而我也在特徵值比較的情況中探討此操作是否合法。週期性情況的算符展開如下：

$$\frac{\mathbf{P}^2}{2m} \Psi(x') = \frac{1}{\Delta x'^2} \frac{1}{2m} (-2 * \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \mathbf{I} \otimes \sigma_1 + \sigma_1 \otimes \sigma_1) \Psi(x')$$

將動量算符放上以尤拉數為底的指數上，於是動能算符的總電路為圖 5 所示

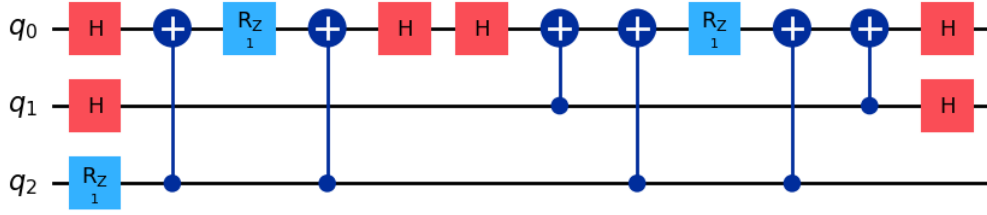


圖 5 動能算符總量子電路（圖片來源：作者繪製）

4.位能算符

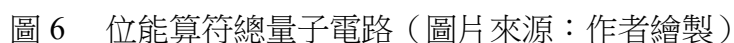
這邊的位能算符指的是諧振子算符中的後項 ($\frac{m\omega^2 \mathbf{x}^2}{2}$)，我可以找到位能算符的矩陣型態：

$$\frac{1}{2} \omega^2 * diag \left(\frac{r^2}{2(\Delta x)}, \left(\frac{r}{2(\Delta x)} - \Delta x \right)^2, \dots, \left(-\frac{r}{2(\Delta x)} + \Delta x \right)^2 \right) \Psi(x')$$

r 指的是正方形矩陣的大小，也就是位能算符為一 $r * r$ 矩陣。我將整條對角線的元素減掉 $\frac{1}{2(\Delta x)}$ ，便會形成一個對稱的矩陣，能用較少的量子閘排出。為了方便表示，定義原本的位能算符型態為 K 型，而減掉 $\frac{1}{2(\Delta x)}$ 的矩陣為 L 型。例如 $diag(2,1,0,-1)$ 為 K 型的矩陣，而 $diag(1.5,0.5,-0.5,-1.5)$ 則為 L 型矩陣。而為了確認將位置矩陣減掉 $\frac{1}{2(\Delta x)}$ 是否合法，在特徵值比較時有針對兩者的誤差做比較。因為這個操作可以使量子電路用更少的量子閘排出，並且在進行平方時會使原本的諧振子演化算符呈現以矩陣中心為對稱點沿對角線向外對稱的現象。

我發現由於算符是對角線矩陣，因此只須討論 $\mathbf{I}$ 、 σ_3 兩個量子閘的張量積組合，因此期望能使用上一段提到的性質，選擇同樣具有這個性質的張量積矩陣進行展開。我可以用這個方式先排除掉 $\mathbf{I} \otimes \sigma_3$ 與 $\sigma_3 \otimes \mathbf{I}$ ，再透過解方程式找到量子閘展開方式。

又知道時間演化算符需要將位置算符放置到以尤拉數為底的指數上。因此可排列出的量子電路為：



而將兩個電路排列在一起便會是電路設計中的 C 閘。



圖7-2 簡化過的C閘（圖片來源：作者繪製）

我期望可以利用相同的方式展開大小更大的諧振子算符矩陣。而也因此發現展開諧振子矩陣的方式有規律性。首先在動量算符方面，可以利用遞迴的方式，將矩陣切

分為四個大小相同的小正方形矩陣，便會發現左上角與右下角的矩陣與小的動量算符長相相同，而左下角的矩陣與右上角的矩陣便會是 σ_+ 與 σ_- 的張量積，可以透過簡單觀察求出。在位置算符部分，可以透過刪除不對稱矩陣與解方程式的方法找出位置算符的量子閘表示，並可以推廣到更大的矩陣。

(四) 在量子電腦上運行量子電路並優化結果

在量子電腦上運行完後進行輸出錯誤的修正以及電路的簡化。

1.修正輸出錯誤

在量子電腦進行結果測量的時候會將一些原本應該是狀態 $|1\rangle$ 的量子位元輸出成 $|0\rangle$ ，這個誤差稱作 prep1 meas0 ，簡稱 η_0 ，同理 $|0\rangle$ 不小心被輸出成 $|1\rangle$ 的量子位元則稱作 prep0 meas1 ，簡稱 η_1 。而為了將這些誤差消除，需要將測量值做一些處理：

$$\begin{pmatrix} 1 - \eta_0 & \eta_1 \\ \eta_0 & 1 - \eta_1 \end{pmatrix} * \text{實際值} = \text{測量值}$$

將這個矩陣設為 $\mathbf{D}$ 。將 $|0\rangle$ 的實際值乘上這些值中被沒被量成 $|1\rangle$ 的比率，再加上 $|1\rangle$ 實際值中被量成 $|0\rangle$ 的比率，就會是測量時得到多少個 0，而 1 也是同理。注意到在進行實作的時候需要處理的算式其實是：

$$\begin{pmatrix} 1 - \eta_0 & \eta_1 \\ \eta_0 & 1 - \eta_1 \end{pmatrix}^{-1} * \text{測量值} = \text{實際值}$$

因為實際值是未知的。面對多個量子位元的系統，將它們各自的 $\mathbf{D}$ 張量積之後再一起做處理，注意到比較難處理張量積之後 $\mathbf{D}^{-1}$ ，因此我宣稱

$$\mathbf{D}_1^{-1} \otimes \mathbf{D}_2^{-1} \otimes \dots \otimes \mathbf{D}_n^{-1} = (\mathbf{D}_1 \otimes \mathbf{D}_2 \otimes \dots \otimes \mathbf{D}_n)^{-1}$$

由 $\mathbf{D}^{-1} * \mathbf{D} = I$ 性質出發即可證明。這邊考慮到乘了矩陣之後會有小數點與負數的情況，假設經過輸出錯誤修正之後量子位元的 shots 是 a ，針對 a 的小數點與負數進行以下處理：

$$\begin{cases} a = 0, & \text{if } a < 0 \\ a = \text{round}(a), & \text{if } a \geq 0 \end{cases}$$

處理完畢後再重新計算機率。前後的數值進行比較，可以知道此修正能夠對測量正確性造成多大的影響。

2.簡化電路

本電路中使用的量子閘均具有共軛相乘會變成單位矩陣的性質，由於需要減少每個量子閘所帶來的誤差，因此期許盡量減少量子閘的數量，當兩個相同的量子閘排列在一起便可將兩個量子閘均刪除，比較減少量子閘前與減少後的電路，可以知道減少量子閘

對量子電路實際造成的影響。

3.設計演化時間

研究計畫讓量子諧振子演化三個時間單位，使用在 Trotter-Suzuki 演算法中介紹過的時間演化疊加方式，在整數部分使用 $\mathbf{U}(t = 1)$ 時間演化算符，在小數部分使用 $\mathbf{U}(t = \text{小數})$ 時間演化算符。而在一個時間單位裡面取四個點，因此每一組資料共會有 12 個點。

陸、研究結果

一、特徵值比較

在進行特徵值比較時除了待觀察的參數，其它參數設定分別為：角頻率(ω) = 1，質量 ($m = 1$)，矩陣大小 = $32 * 32$ ，空間步長(Δx) = 0.25。

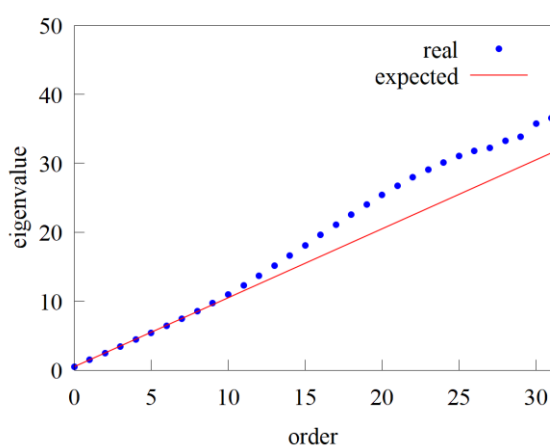


圖8-1 非週期性 $32 * 32$ 矩陣的特徵值變化

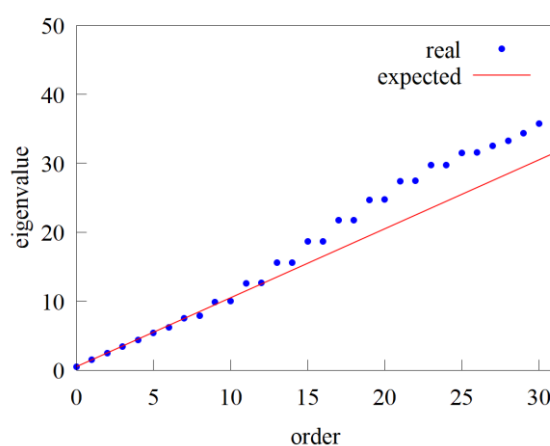


圖8-2 週期性 $32 * 32$ 矩陣的特徵值變化

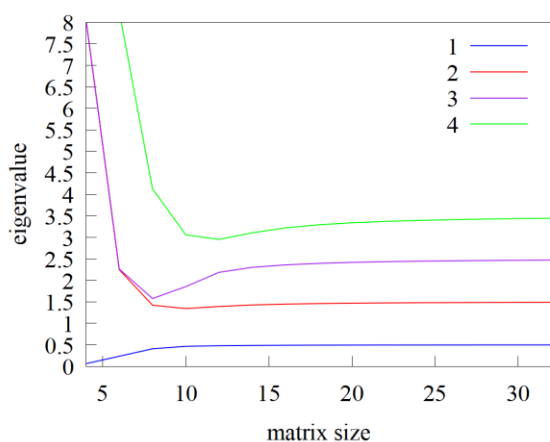


圖8-3 非週期性矩陣的大小與特徵值的關係

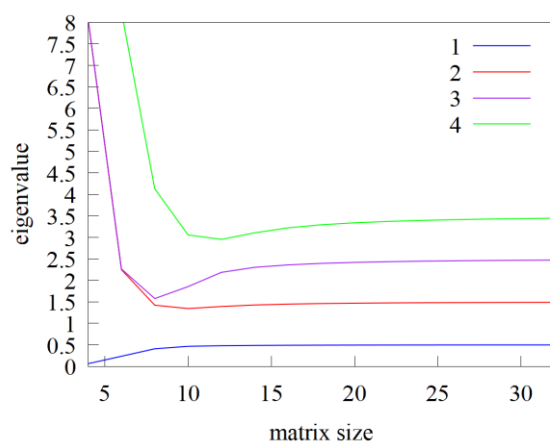


圖8-4 週期性矩陣的大小與特徵值的關係

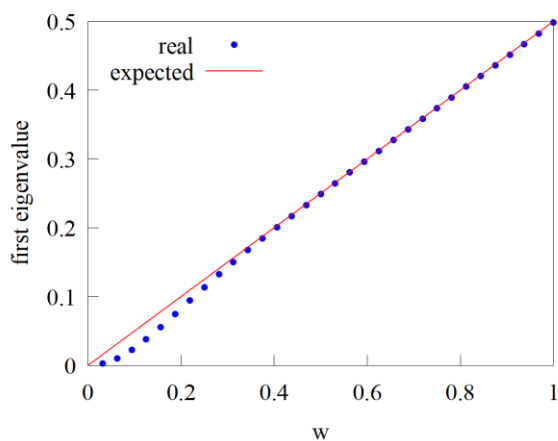


圖8-5 非週期性矩陣與角頻率大小的關係

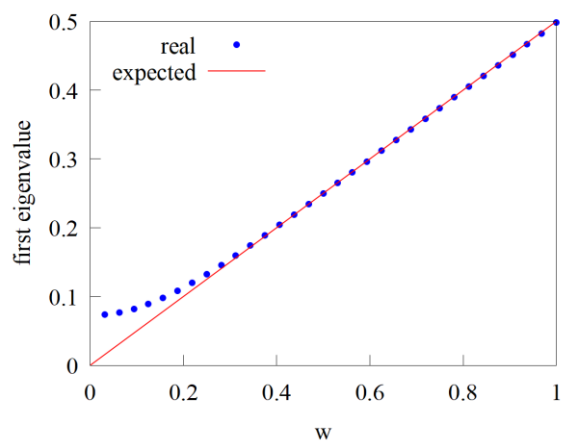


圖8-6 週期性矩陣與角頻率大小的關係

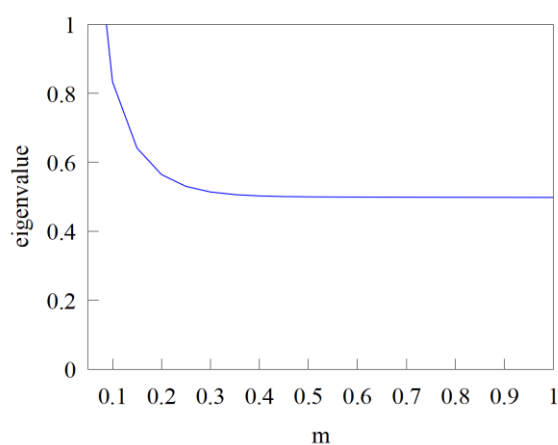


圖8-7 週期性矩陣特徵值與質量大小關係

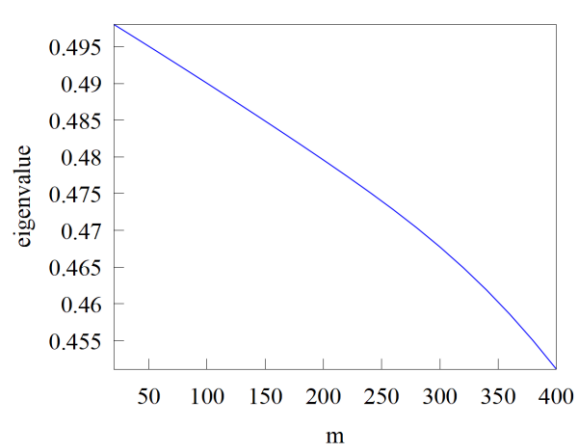


圖8-8 週期性矩陣特徵值與質量大小關係

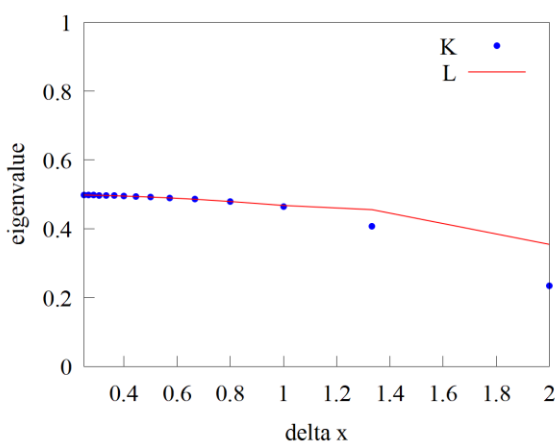


圖8-9 非週期矩陣特徵值大小與空間步長關係

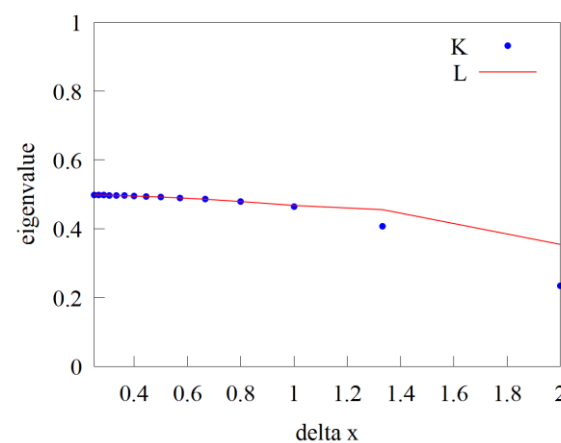


圖8-10 週期矩陣特徵值大小與空間步長關係

(一) 圖8-1、圖8-2的橫軸為是第幾個特徵值，而注意到特徵值比較中的每個縱軸均為特徵值的大小，若無特別提及均為第一個特徵值的大小。32 * 32矩陣中前十小特徵值大致吻

合 $E = (\frac{1}{2} + n)\hbar\omega, n \in \mathbb{N}$ 直線，但當特徵值變大的時候，就會偏移理論值，而是否為週期性情況對趨勢線與誤差均沒有重大影響，只是週期性情況的曲線較不平滑。

（二）圖8-3、圖8-4 的橫軸為矩陣的大小，當矩陣變大時，前四個特徵值會較符合理論值。而是否為週期性情況對此變化較無影響。

（三）圖8-5、圖8-6 的橫軸為角頻率(ω)大小。在 ω 變大時，無論是否為週期性情況都可以發現特徵值與 ω 約略成正比。而在 ω 小於 0.3 時，非週期性情況會使特徵值低於理論值，反之週期性情況則會使特徵值高於理論值。

（四）圖8-7、圖8-8的橫軸為質量(m)大小。當 m 的範圍在 0 與 1 之間，特徵值隨 m 變大趨於理論值，但當 m 變得更大時，特徵值會慢慢偏離理論值，變得更小。

（五）圖8-9、圖8-10橫軸為空間步長(Δx)大小。當 Δx 變大時，第一個特徵值會偏移理論值。這裡比較了研究方法中提及的 K 狀況與 L 狀況。藍點處是前人嘗試過的 K 狀況，紅線則是自行嘗試的 L 狀況，發現若位置算符為 K 狀況，誤差會較大，但在 Δx 夠小的時候，兩者幾乎看不出差別。

二、Toy Model

玩具模型（Toy Model）構想之產生為確認量子電路設計理論是否正確。模型中將哈密頓算符以矩陣 $\begin{pmatrix} 0.2 & 0.7 \\ 0.7 & -0.2 \end{pmatrix}$ 替代，以 $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ 做為初始狀態。

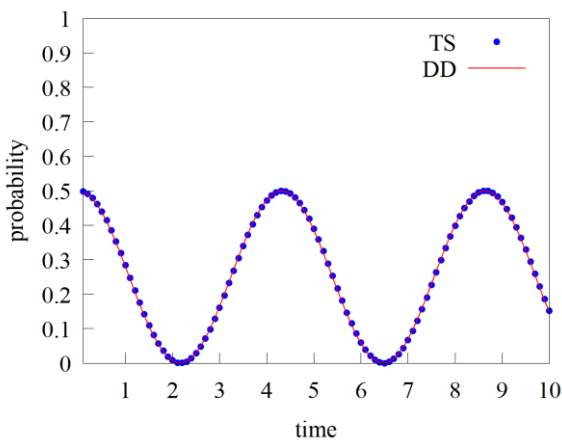


圖 9-1 Trotter-Suzuki 展開的 f_1 之實部

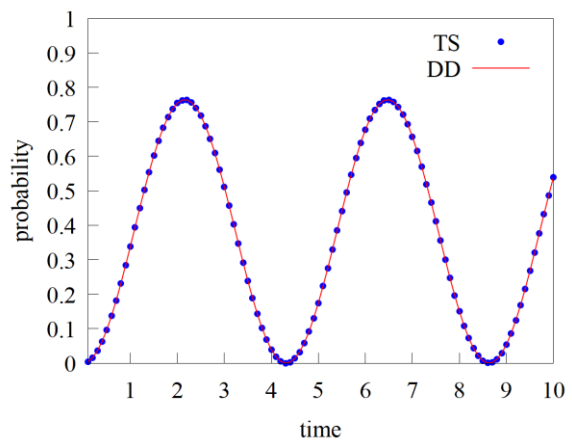


圖 9-2 Trotter-Suzuki 展開的 f_1 之虛部

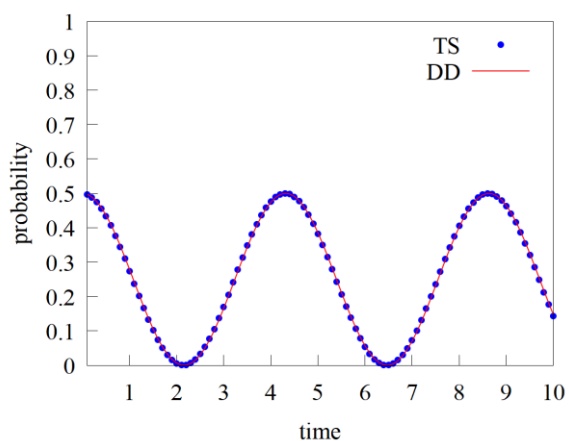


圖 9-3 Trotter-Suzuki 展開的 f_2 之實部

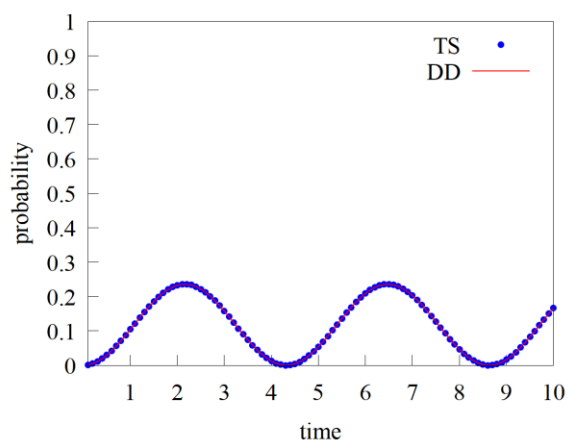


圖 9-4 Trotter-Suzuki 展開的 f_2 之虛部

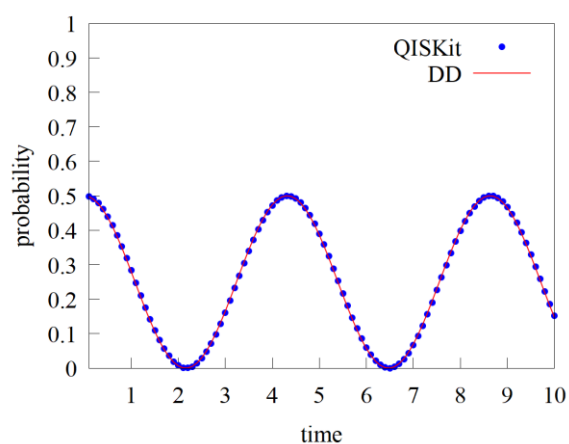


圖 9-5 QISKit 模擬的 f_1 之實部

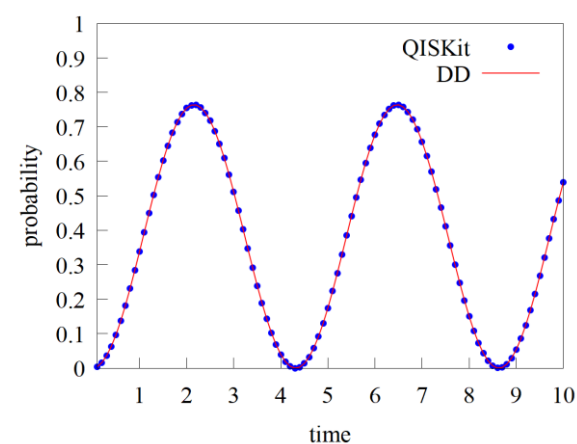


圖 9-6 QISKit 模擬的 f_1 之虛部

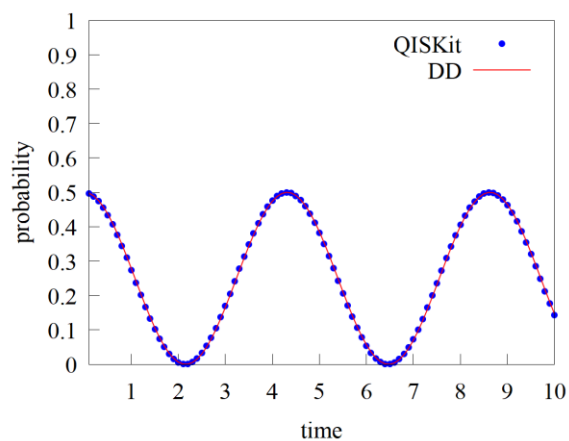


圖 9-7 QISKit 模擬的 f_2 之實部

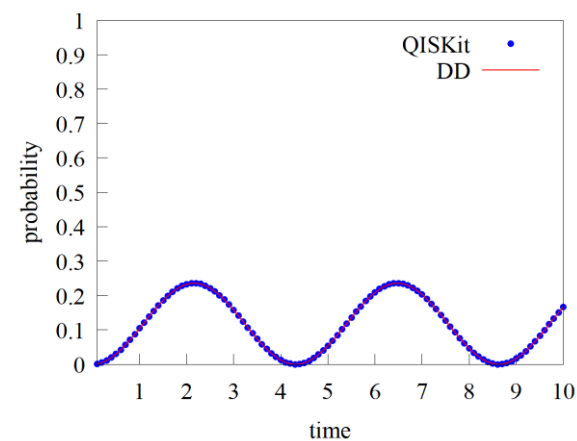


圖 9-8 QISKit 模擬的 f_2 之虛部

在圖 9 中，縱軸為量子位元的可能性，橫軸則是時間，玩具模型演化了十個時間單位。DD 即為對角化矩陣，以紅線表示。在圖 9-1 到圖 9-4 中，藍點代表 Trotter-Suzuki 的輸出結果；在圖 9-5 到圖 9-8 中，藍點代表 QISKit 的模擬結果。

首先計算八張圖的誤差率。計算的方式是以 QISKit 及 Trotter-Suzuki 為實驗值 a ，矩陣對角化為理論值 b ，執行誤差率 $= \frac{a-b}{b} * 100\%$ 方程式之結果。我發現 QISKit 及 Trotter-Suzuki 在各個位置的誤差幾乎相同，在 f_1 之實部為 -0.27671% 、 f_1 之虛部為 -0.0008% 、 f_2 之實部為 -1.22645% 、 f_2 之虛部為 -0.0038% 。觀察 4 個誤差百分率，發現其中 3 個的誤差都有達到理想的 2% 以下，唯獨 f_1 之實部的誤差在 1% 左右，而由於 QISKit 與 Trotter-Suzuki 與對角化矩陣的誤差均相同，因此推測它們是同一筆數據。

三、諧振子之演化算符

我進行了 Trotter-Suzuki 近似與對角化矩陣比較，以確認諧振子演化算符的電路表示法是正確的。模擬參數設定為角頻率(ω) = 1，質量($m = 1$)，矩陣大小 = $4 * 4$ ，空間步長(Δx) = 0.25。

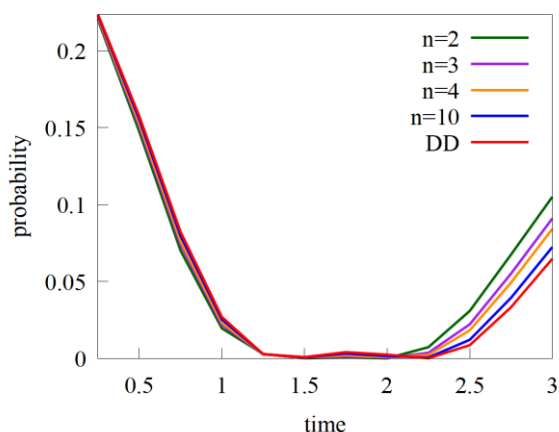


圖 10-1 傳統電腦模擬：輸出 $|000\rangle$

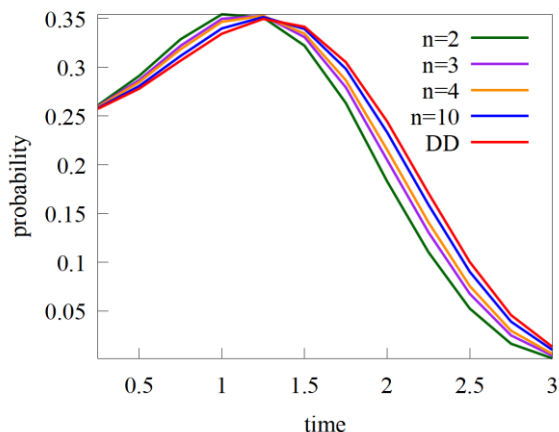


圖 10-2 傳統電腦模擬：輸出 $|001\rangle$

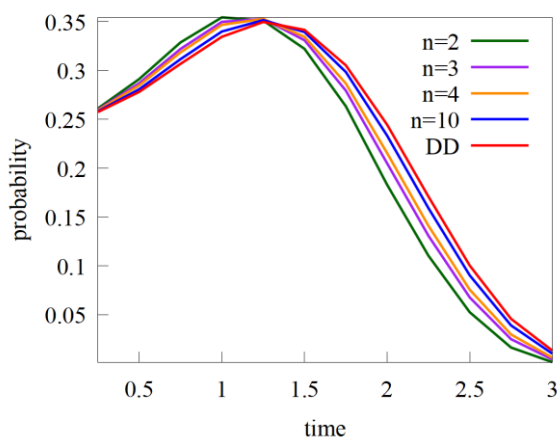


圖 10-3 傳統電腦模擬：輸出 $|010\rangle$

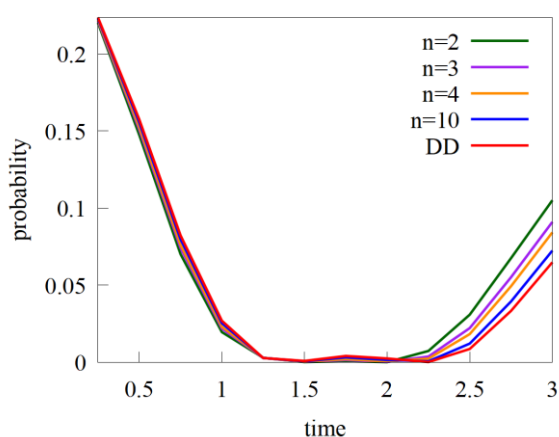


圖 10-4 傳統電腦模擬：輸出 $|011\rangle$

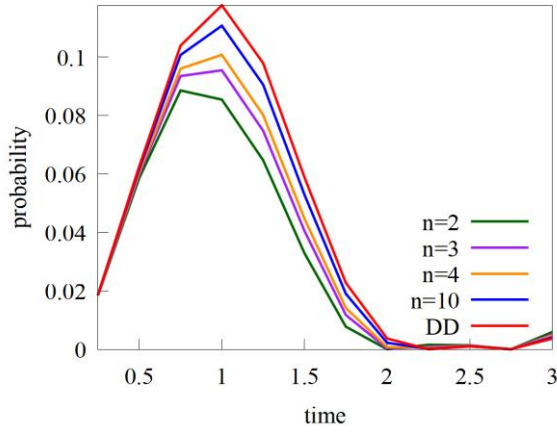


圖 10-5 傳統電腦模擬：輸出 $|100\rangle$

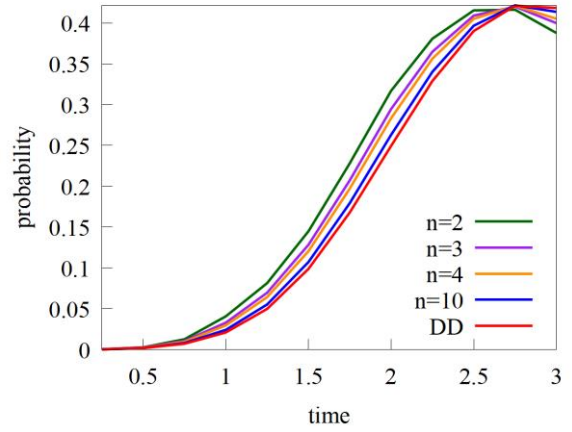


圖 10-6 傳統電腦模擬：輸出 $|101\rangle$

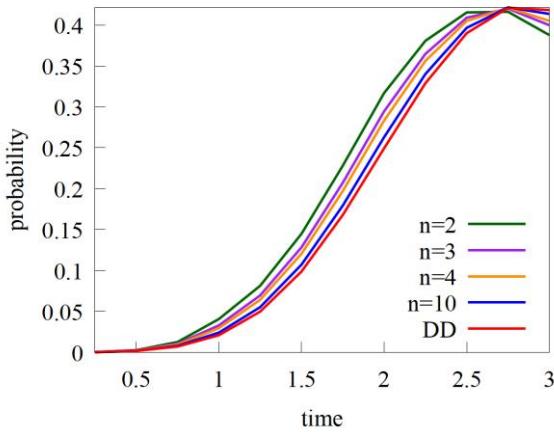


圖 10-7 傳統電腦模擬：輸出 $|110\rangle$

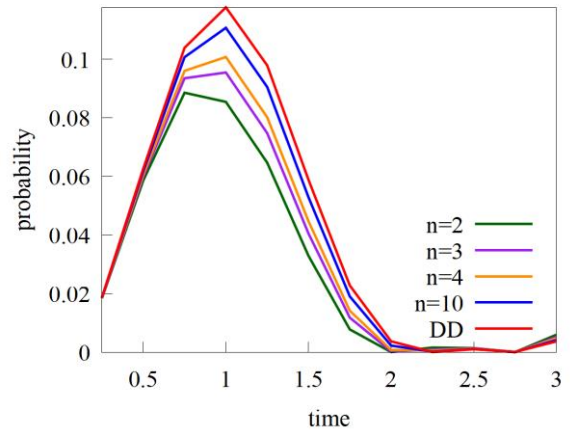


圖 10-8 傳統電腦模擬：輸出 $|111\rangle$

6

上圖中的 DD 代表對角化矩陣也就是理論值的結果，TS 即為在 Trotter-Suzuki，而其後的數字 n 即為展開格式 $e^{(A+B)} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{\frac{A}{n}} * e^{\frac{B}{n}})^n$ 中 n 的取值。橫軸是演化的時間單位，縱軸則是量子位元的可能性。我們發現當 n 取值越大，隨時間演化算符的答案會越接近理論值。而輸出中的 $|000\rangle$ 與 $|100\rangle$ 分別是 f_1 的實部和虛部、 $|001\rangle$ 與 $|101\rangle$ 分別是 f_2 的實部和虛部、 $|010\rangle$ 與 $|110\rangle$ 分別是 f_3 的實部和虛部、 $|011\rangle$ 與 $|111\rangle$ 分別是 f_4 的實部和虛部。

四、量子電路比較

參數設定分別為： $\omega = 1, m = 1$, 矩陣大小 = 4, $\Delta x = 1$ 。本研究在 IBM 平台上使用了 x 兩台量子電腦做模擬，分別在2024/10/22、2024/10/28連線 IBM_brisbane、IBM_sherbrooke，使用的是未經過量子閘優化的量子電路，其餘則是分別在2024/10/22、2024/10/27、2024/10/31、2024/11/01連線 IBM_brisbane、IBM_sherbrooke、IBM_sherbrooke、

IBM_sherbrooke，使用經過優化的量子電路。

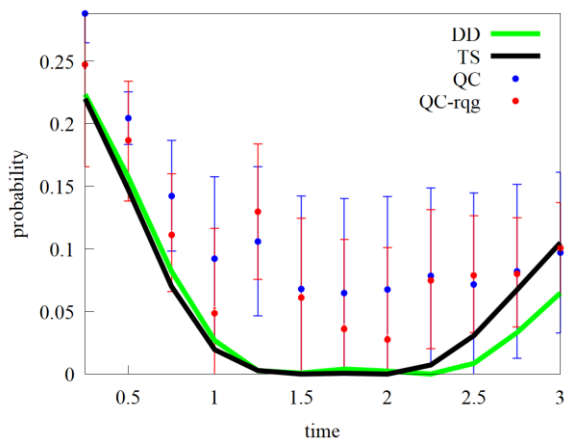


圖 11-1 量子電腦減少量子閘：輸出 $|000\rangle$

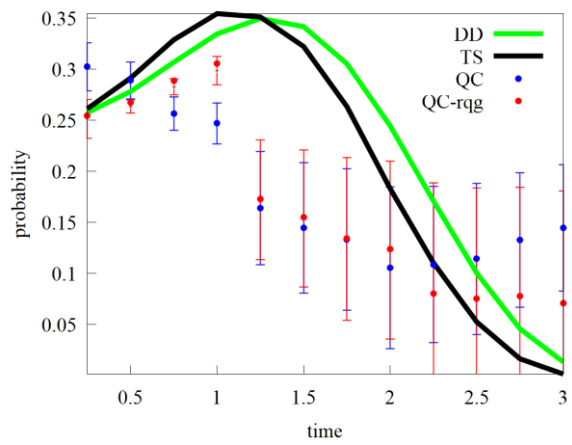


圖 11-2 量子電腦減少量子閘：輸出 $|001\rangle$

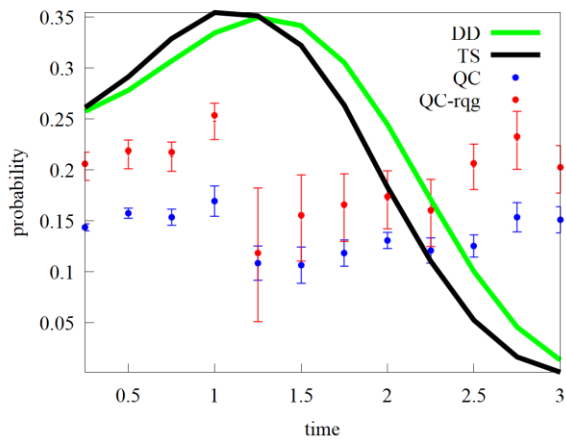


圖 11-3 量子電腦減少量子閘：輸出 $|010\rangle$

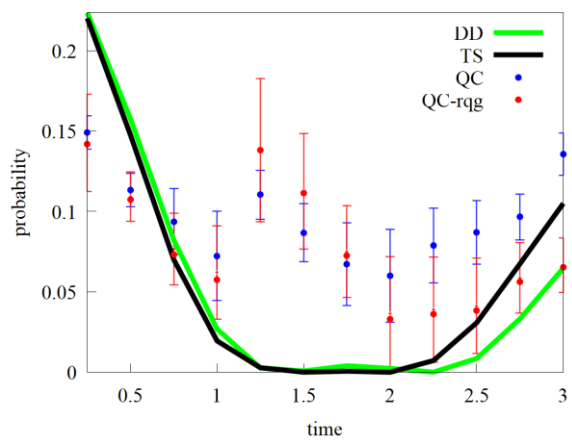


圖 11-4 量子電腦減少量子閘：輸出 $|011\rangle$

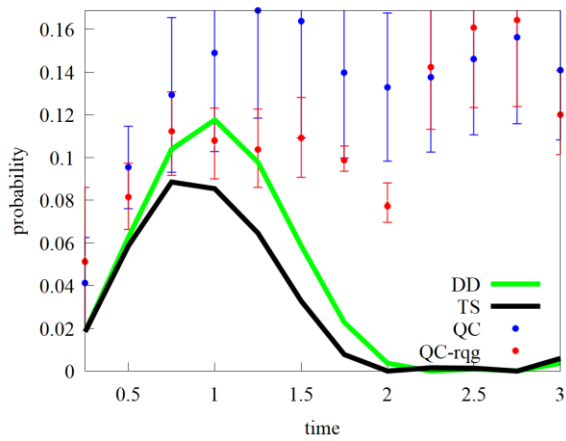


圖 11-5 量子電腦減少量子閘：輸出 $|100\rangle$

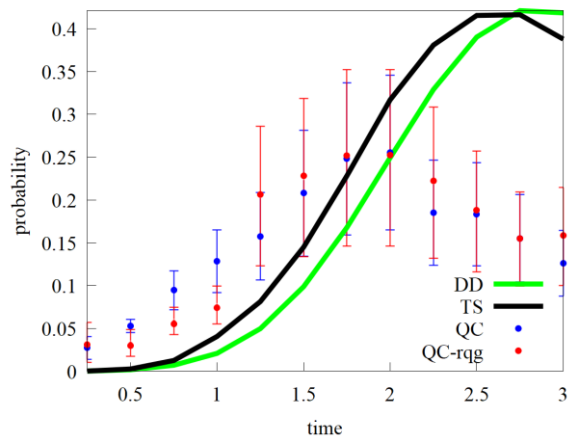


圖 11-6 量子電腦減少量子閘：輸出 $|101\rangle$

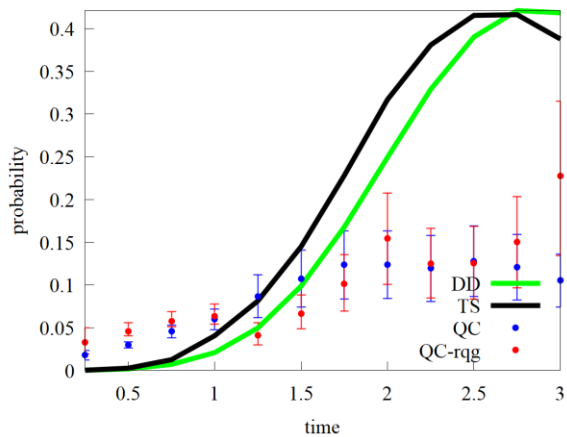


圖 11-7 量子電腦減少量子閘：輸出 $|110\rangle$

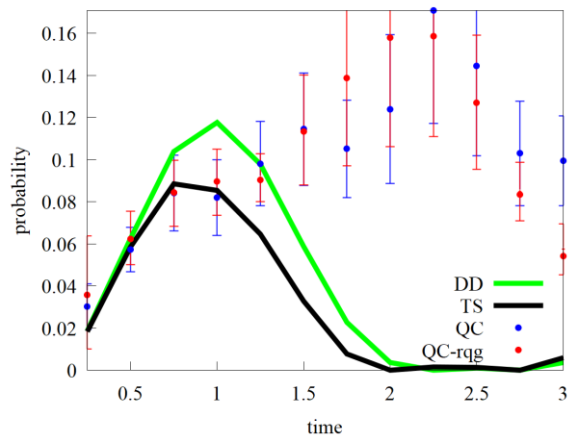


圖 11-8 量子電腦減少量子閘：輸出 $|111\rangle$

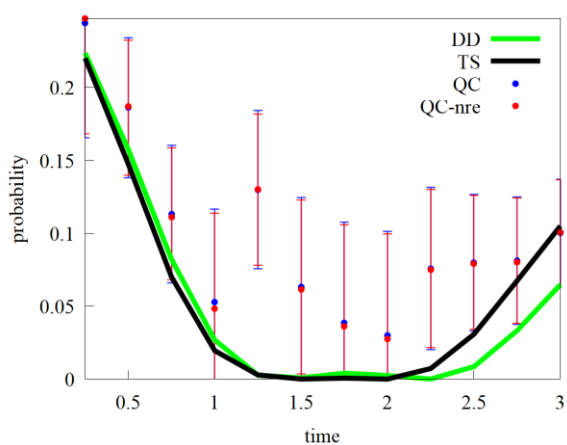


圖 11-9 量子電腦修正輸出錯誤：輸出 $|000\rangle$

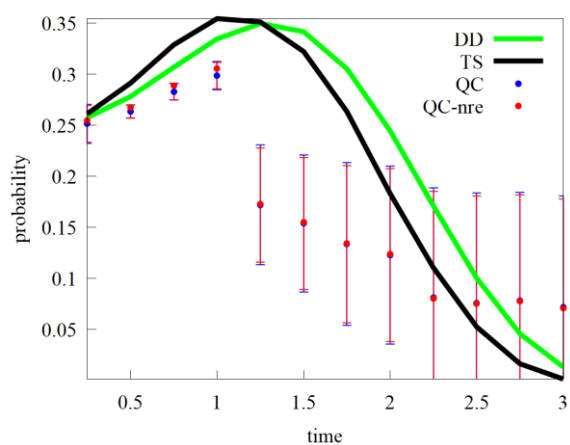


圖 11-10 量子電腦修正輸出錯誤：輸出 $|001\rangle$

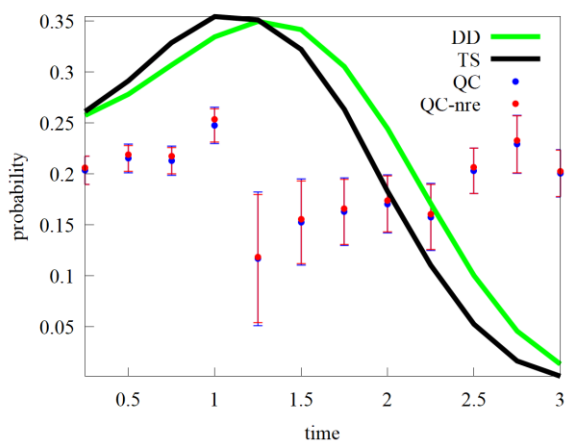


圖 11-11 量子電腦修正輸出錯誤：輸出 $|010\rangle$

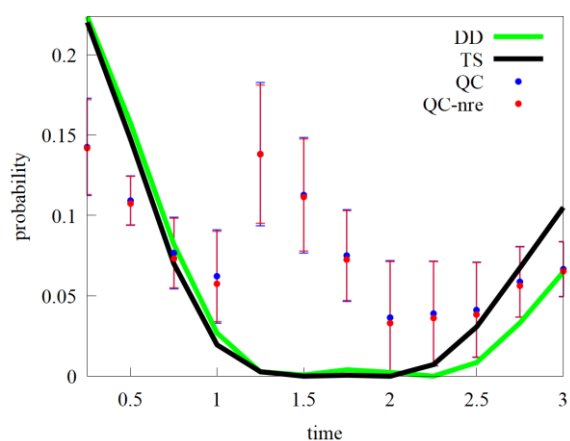


圖 11-12 量子電腦修正輸出錯誤：輸出 $|011\rangle$

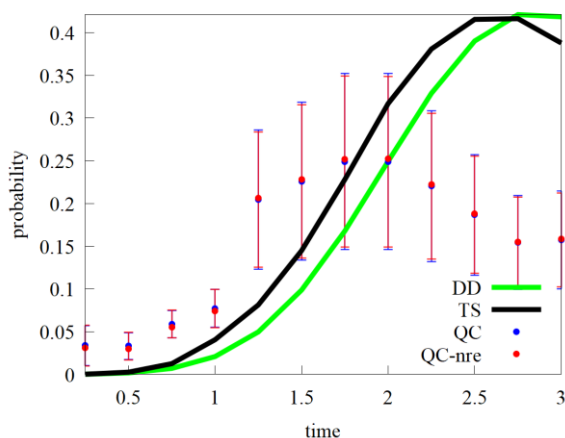
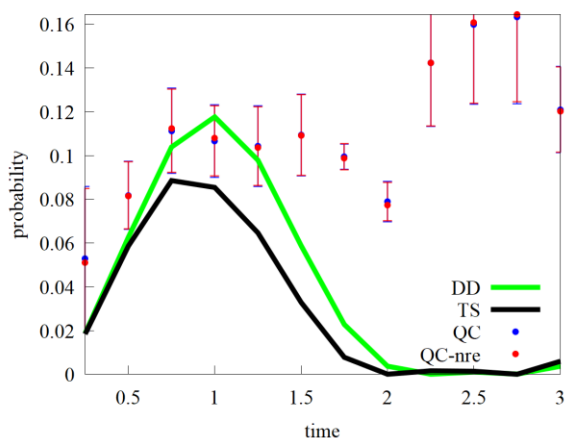


圖 11-13 量子電腦修正輸出錯誤：輸出 $|100\rangle$ 圖 11-14 量子電腦修正輸出錯誤：輸出 $|101\rangle$

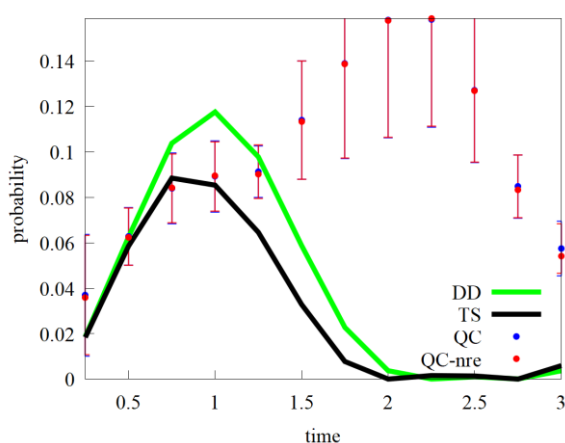
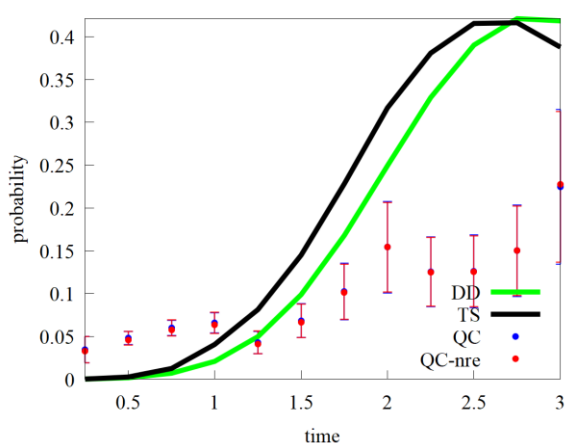


圖 11-15 量子電腦修正輸出錯誤：輸出 $|110\rangle$ 圖 11-16 量子電腦修正輸出錯誤：輸出 $|111\rangle$

(一) 圖 11-1 至圖 11-8 為減少量子閘(reduce quantum gate，本文在圖中簡稱為 rqq) 比較。圖中紅點代表減少量子閘的量子電路模擬，藍點是未減少量子閘的模擬。綠線為對角化矩陣理論值、黑線為在傳統電腦上將 Trotter-Suzuki 形式 $e^{(A+B)} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{\frac{A}{n}} * e^{\frac{B}{n}})^n$ 中的 n 設為 2 的理論值。橫軸為演化的時間單位，縱軸為量子位元的可能性，發現紅線與理論值較接近，而藍線較偏離理論值。

(二) 圖 11-9 至圖 11-16 為修正輸出錯誤(fixed readout error，本文在圖中簡稱為 fre) 比較。圖中紅點代表未修正輸出錯誤的結果，藍點則是修正過的。綠線與黑線定義與減少量子閘的圖相同。我們發現修正此錯誤的效果並沒有修正量子閘顯著，但觀察圖 11-10、圖 11-11 我們發現此操作還是可以減少誤差。

柒、討論

一、特徵值比較

(一) 在量子諧振子是週期性的情況下，可以使用更少的量子閘完成時間演化算符的模擬。此做法能減少量子電腦計算時的誤差，並且得到相同正確的結果。因為週期性情況的位置取值以物理意義上來說就是終點即起點，而我模擬的是量子諧振子，在這邊證明了週期性情況對求特徵值沒有顯著影響。

(二) 在質量或空間步長等參數增加的時候，矩陣特徵值都會有不合理論值的情形，唯有角頻率是在數值小的時候較不準確，這個現象出現的原因也有待理論的解釋。

二、電路設計

(一) 將電路的實虛部拆開可以幫助了解諧振子的相態，雖然在觀察諧振子隨時間演化的時候，相態不會是我主要關注的重點，但多了這一個資訊，可以方便在日後進行特徵值的展開。如果要尋找矩陣的特徵值可能會需要傅立葉變換 (Fourier transform)，而我不確定在多了相態之後，會不會使特徵值的尋找更加準確。這將會是日後可以探討的議題。

(二) 原本推測 Toy Model 誤差是 Trotter-Suzuki 造成的結果，但將 Trotter-Suzuki 的 n 調大之後，誤差並沒有顯著下降，因此需推測量子電路本身存在其它誤差原因有待了解。

三、諧振子展開

(一) 透過兩兩相消的量子閘，可以將原本多達48個的 **CNOT** 閘的單位時間演化算符減少到剩下32個，這個方法也在之後的模擬很大程度的減少了誤差。

(二) 在 Trotter-Suzuki 近似法形式中 n 取值關乎於量子電腦產生的誤差能否平衡理論本身計算的誤差，選擇一個大小合適的 n 可以增加模擬的準確度。而在推廣到更大型矩陣時，此 n 值可能會有變化，需要再以實驗測試。

四、量子電腦實作

(一) 我發現簡化量子電路造成的誤差影響大於輸出錯誤造成的誤差，這可以從理論簡單的表明。每一個 **CNOT** 閘造成的誤差約為千分之一，而輸出錯誤可以修正的誤差約在百分之一左右，多個 **CNOT** 疊加之後產生的誤差會大於輸出錯誤產生的誤差。觀察時可能

會覺得在圖 11-10 或圖 11-11 的時候誤差百分率比較大，這是因為這些數據本身比較小，如果誤差的 counts 數量相同，數據小的點分母比較小，誤差百分率也會比較大，可以透過這些數據點觀察到輸出錯誤修正產生的影響。

（二）我觀察到在演化不超過 1 個時間單位的時候，數據較為貼合理論曲線，但 1 個時間單位之後數據便會偏離理論值，這可能是因為我使用了 $U(t = 1)$ 時間演化算符，這個算符將會使量子閘的誤差增加兩倍，導致數據被大量的雜音干擾。此時無論是減少量子閘還是修正輸出錯誤，都不會有顯著的效果，因為雜音的大小已超過這些誤差修正能夠修正的範圍。

（三）到量子閘數量增加到臨界值，也就是約 2 個時間單位的地方可以觀察到同質 (homogeneous) 現象，也就是因為雜訊造成的干擾過於巨大，量子位元的可能性最後會趨近到 $\frac{1}{2^N}$ ，其中 N 是量子位元的數量。以本研究為例，本研究使用 3 個量子位元，也就代表在同質現象發生時，所有狀態的輸出機率都會約等於 $1/8$ ，而回頭檢查數據點發現此理論是正確的，此時量子位元的可能性與量子電路已經無關，沒有辦法再由可能性獲得更多資訊了。

捌、結論

本研究體現量子諧振子在量子電腦上之模擬。首先比較不同矩陣的特徵值，發現在矩陣越大、空間步長越小、質量為 1、角頻率較大時的特徵值會較精準。而使量子諧振子成為週期性狀況，特徵值沒有明顯改變。再來我們設計了時間演化算符的展開方式，將 48 個 CNOT 閘成功減少到 32 個，並且創造了實虛部分開的量子閘展開方式。然後是諧振子演化算符的展開，特別注意的是我獨創了位置演化算符的展開方式，並成功透過對稱性減少量子閘的數量。最後將電路連線到 IBM 量子電腦上，發現減少量子閘與修正輸出錯誤都可以使模擬出的矩陣更加接近理論值，並且在量子閘數量不過多的範圍內，時間演化算符在量子電腦上能夠被模擬出來。

玖、未來展望

量子電腦不同於傳統的計算方式，已被證明在很多的主題中可以更快且更有效率的計算。期望在未來，可以使用更多量子位元模擬此系統，得知諧振子的更多性質。更多的性質

類似於特徵值的計算，因為實虛部分離表示了量子諧振子的相態，因此有望可以透過傅立葉變換的方式得到矩陣正確的特徵值，並與文獻探討中的特徵值計算做比較。另外，本文發展出模擬時間演化算符的量子電路，期望在未來可以利用此時間演化電路模擬其它隨時間演化的物理系統，如何將其它系統中的哈密頓算子套用至此電路中，將會是未來研究的重要課題。

拾、參考資料

- [1] Sakurai, Jun John, Napolitano, Jim (2020)。Modern Quantum Mechanics (第三版)。Cambridge University Press。
- [2] Nielsen, Michael A./ Chuang, Isaac L. (2011)。Quantum Computation and Quantum Information。Cambridge University Press。
- [3] Benjamin D.M. Jones David R. White George O. O'Brien John A. Clark (2019)。Optimising trotter-suzuki decompositions for quantum simulation using evolutionary strategies, GECCO '19, 103-137。 <https://dl.acm.org/doi/abs/10.1145/3321707.3321835>
- [4] Smith, A., Kim, M.S., Pollmann, F. et al. Simulating quantum many-body dynamics on a current digital quantum computer. npj Quantum Inf 5, 106 (2019)。 <https://doi.org/10.1038/s41534-019-0217-0>
- [5] R. Miceli and M. McGuigan (2018)。Quantum Computation and Visualization of Hamiltonians using Discrete Quantum Mechanics and IBM QISKit,。New York Scientific Data Summit (NYSDS),。
- [6] Seth Lloyd (1996)。Universal Quantum Simulators。DOI : 10.1126/science.273.5278.1073。 <https://www.science.org/doi/10.1126/science.273.5278.1073>

【評語】160006

這個工作利用量子電腦計算諧振子隨時間演化算符。此作者採用在位置基底下表現時間演化算符矩陣進行運算，設計了量子電路，並提出一個可以減少誤差的方法。這個工作很紮實也具有創意。建議可以去探索一下為什麼增加 Trotter-Suzuki 的步數，沒有增加精確度。