連載

5分で分かる!? 有名論文ナナメ読み

藤井啓祐（大阪大学基礎工学研究科）

John M. Martyn, Zane M. Rossi, Andrew K. Tan, and Isaac L. Chuang : Grand Unification of Quantum Algorithms

PRX Quantum 2, 040203 (2021)

本論文の位置付け

本論文は，「量子アルゴリズムの大統一理論」と壮大なタイトルとなっているが，ここで紹介されている量子特異値変換アルゴリズムはここ数年の量子アルゴリズム研究における大きな進展の集大成となっている．タイトルに恥じず，量子特異値変換アルゴリズムは，これまでの代表的な量子アルゴリズムをその特殊例として包含し，量子コンピュータにおける高速化の仕組みの深い洞察を与えている．かなり高度な内容を含むが，できるだけ概観が分かるように解説してこう．

量子コンピュータとは

量子コンピュータとは量子力学の原理で計算を行う次世代のコンピュータである．従来のコンピュータでは，ビット列 $x \in \{0, 1\}^n$ で情報が表現されているが，量子力学の世界では異なるビット列の重ね合わせ状態が許されており，状態はそれら重ね合わせの重みを表す複素数 c_x を用いて，複素ベクトル

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_{0\ldots0} \\ \vdots \\ c_{1\ldots1} \end{pmatrix}$$

で表される．$|\cdot\rangle$ はブラケット表記と呼ばれ，単に列ベクトルを表しているシンボルにすぎない．この n 個の量子ビットを表すベクトルの次元は 2^n である．この状態に対して測定をすると $p_x = |c_x|^2$ の確率でビット列 x が得られる．量子コンピュータ上での量子演算はこのベクトルに作用する $2^n \times 2^n$ ユニタリ行列である．

量子アルゴリズム

さて，このような量子コンピュータのルールでどのような問題を古典コンピュータよりも高速に解くことができるかを考えるのが量子アルゴリズムの分野である．少し古いが代表的な例として素因数分解問題を多項式時間で解くことができる Shor の素因数分解アルゴリズムや，構造化されていないデータベースから特定の条件を満たすデータを取り出すことができる Grover データベース探索アルゴリズムが知られている．前者は，一般化すると，あるユニタリ行列やエルミート行列の固有値を求める，位相推定アルゴリズムに属する．位相推定アルゴリズムは，ユニタリ行列 U に対して，

$$U|\lambda\rangle = e^{i\phi}|\lambda\rangle$$

を満たす ϕ（固有値の位相）を計算するアルゴリズムである．データベース探索アルゴリズムは，データの重ね合わせ状態として与えられた初期状態 $|\mathrm{initial}\rangle$ から，特定の条件を満たした状態 $|\mathrm{target}\rangle$ を見つけ出す（増幅する）アルゴリズムである．詳細は省略するが，データベース探索アルゴリズムは，初期状態 $|\psi_{in}\rangle$ を $|\mathrm{target}\rangle$ 成分と，それと直交する $|\mathrm{target}^{\perp}\rangle$ に分解し，この 2 次元部分空間での回転操作

$$\cos(k\theta)|\mathrm{target}\rangle + \sin(k\theta)|\mathrm{target}^{\perp}\rangle$$

を実現していることになる．初期状態を N 個のアイテムのあるデータの重ね合わせとすると，θ は $\theta=O(1/\sqrt{N})$ で与えられ，その振幅は $1/\sqrt{N}$ になる．$k=1$ で測定すると $1/N$ の確率でしか欲しいアイテムが得られないが，k を増やしていき 2 次元部分空間での回転を実行すると，$O(\sqrt{N})$ 回の操作で 1 に近い確率で欲しいアイテムが得られる．古典の場合は $O(N)$ の繰り返しが必要なので，2 乗加速されていることになる．

特異値変換量子アルゴリズム

量子特異値変換は，与えられた行列 A に対して，その特異値に対して所望の関数 f を作用させる

$$A=W\Sigma V\rightarrow Wf(\Sigma)V$$

量子アルゴリズムである．ここで，U，V はユニタリ演算子，Σ は特異値を対角要素に持つ対角行列であり，$f(\Sigma)$ は，対角要素のそれぞれに f を作用させたものである．この量子アルゴリズム，量子信号処理（quantum signal processing），量子ビット化（qubitization），ブロック符号化（blockencoding）という 3 つの重要な要素から構成される．まず，量子信号処理は，ある与えられたパラメータ a に依存する 1 量子ビットに作用する量子ゲート $W(a)$ が与えられたときに，ほかの 1 量子ビットゲートと組み合わせることで，別の 1 量子ビットゲート $W(f(a))$ を構成する方法である．この構成法は，NMR（核磁気共鳴）実験において信号のコントラストを改善するために構築されたパルス列に由来し，量子信号処理と呼ばれている．お気づきかもしれないが，この量子信号処理をうまく利用することで特異値に対して関数 f を作用させることになる．

どのように一般の行列 A に量子信号処理を利用するかを説明しよう. まず, そもそも量子コンピュータ上で実行可能な操作はユニタリ行列で記述される．よって，この行列 A をユニタリ行列 U の部分空間（ブロック要素）に埋め込む必要がある：

$$U=\begin{pmatrix} A & \sqrt{I-A^2} \\ \sqrt{I-A^2} & -A \end{pmatrix}.$$

このとき U は A のブロック符号化と呼ばれる．A は一般に高次元の行列なので U の作用は複雑に思えるかもしれないが，実は，A の特異ベクトルから構成される 2 つのベクトル（それぞれ U を直和分解したそれぞれのセクターに存在）によって貼られる 2 次元部分空間上の単なる回転になっている．この回転における回転角は k 番目の特異値 σ_k に依存している．この 2 次元部分空間上の回転を 1 つの量子ビットの回転と見立てる，量子ビット化をすることによって，先ほどの 1 量子ビットに対する量子信号処理を適用することができ，それぞれの特異値に対して関数 f を作用させることができる．

量子アルゴリズムの大統一理論

量子特異値変換が量子アルゴリズムの大統一理論と呼ばれるに相応しい理由は，これまでのメジャーな量子アルゴリズムはほぼすべてこの量子特異値変換の特殊例として与えられるからである．量子系の時間発展をシミュレーションするハミルトニアンシミュレーションは，エルミート行列の固有値 λ に対して, $e^{-i\lambda t}$（t は時間）という変換にほかならない. 逆行列計算を行う量子アルゴリズムは与えられた行列（エルミート行列とする）の固有値 λ を $1/\lambda$ へと変換することになる．位相推定アルゴリズムは関数 f を閾値関数にしておき，位相を 2 分探索すれば実行することができる．データベース探索は，そもそも量子ビット化と量子信号処理の最も素朴な例であり，特定の状態が含まれている要素を a としてパラメータ化したときに，その a を 1 に近い関数へと変換する操作になっている．以上のように，これまでまったく異なる経緯で発見されてきた量子ア

ルゴリズムは，すべて量子特異値変換であったと理解することができる．さらに，量子特異値変換をより一般的に使うことで，既存の量子アルゴリズムを再現するだけではなく，誤差に対する計算量などの性能を既存の量子アルゴリズムに比べ指数関数的に改善できるケースもいくつか見つかっている．これまで偶然に発見された，量子アルゴリズムがこの量子特異値変換アルゴリズムから派生するということは，おそらくまだ誰も見つけていない量子アルゴリズムもますます見つかるのではないかと期待される．今後の発展に注目したい．

(2022 年 3 月 10 日受付)

藤井啓祐（正会員）
fujii@qc.ee.es.osaka-u.ac.jp

2011 年 3 月京都大学大学院工学研究科 博士課程終了．博士（工学）．大阪大学（特任研究員），京都大学（特定助教），東京大学（助教），京都大学（特定准教授）を経て，2019 年 4 月から，大阪大学大学院基礎工学研究科システム創成専攻，教授．大阪大学 QIQB センター副センター長，理研 RQC チームリーダー，IPA 未踏ターゲット事業プログラムマネージャー等を兼任．株式会社 QunaSys 最高技術顧問．専門分野は量子情報・量子計算分野．