

解 説



逆計算：計算の理論における逆問題

1. 計 算 の 物 理 モ デ ル

—量子計算機を中心にして—

井 宮 淳†

1. まえがき

ある法則に従って時間の進行とともに刻々と状態が変化する系を力学系と呼ぶ。通常は状態の変化は時間に関する1階の連立方程式であたえられる。たとえば、惑星運動のように古典力学によって支配される物理系の方程式が力学系の例である^{1)~10)}。また、量子力学の波動方程式も系を支配する力学系である^{11)~14)}。

チューリング機械や有限オートマトンなどの計算機科学の基本概念である抽象機械はテープ上の記号や内部状態、記号の列からなる言語の変換を記述したものである^{15)~18)}。抽象機械の変換に時間の概念を導入すると、抽象機械は記号や内部状態、言語の時間的変化を記述する力学系と考えることができる。このような抽象機械に対応する力学系を本稿では仮に計算記号力学系(Dynamical systems for computation)と呼ぶことにする*。通常の微分方程式によって支配される力学系に対して記号力学系は時間に関して離散的に変化する力学系の例でもある¹⁹⁾。したがって、計算記号力学系とアルゴリズムの関係から Church の提唱²⁰⁾をアルゴリズムは力学系である。そして、力学系はアルゴリズムである。

と読み変えることもできる。

微分方程式によって記述される力学系では、時間変数 t を $-t$ に置き換える変換、すなわち時間反転によって方程式が変化しない可逆系と、そうでない非可逆系がある。また、時間を遡ってあ

る状態から初期状態を決定できる系がある。これは制御理論における可観測の概念に対応するので、仮に可観測系と呼ぶことにする。一般の惑星運動を理想化した2体力学系が可逆系の代表である。そして、閉じた系における量子力学系が時間を遡ってある状態から初期状態を決定できる可観測系の代表である。

可逆チューリング機械の構成法が指摘される以前には、計算記号力学系の可逆性や可観測性に関する理論的考察はほとんど行われなかつた³⁹⁾。本稿では、時間を遡ることのできる代表例である閉じた量子力学系とチューリング機械との関係^{21)~26)}について解説する。そして、実は、計算記号力学系が可観測な力学系であることを紹介する。以下では、まず、力学系としての波動方程式の構造についてまとめる。そして、Deutsch の量子計算機とチューリング機械との関係^{23), 24)}について紹介する。また、可逆計算記号力学系の実現可能性について展望を述べる。

2. 計算機としての力学系

本章では、量子力学を記述する波動方程式の数学的からくりを本稿に必要な範囲でまとめる^{11)~13)}。量子力学で対象とする物理量は可分なヒルベルト空間 \mathcal{H} の要素として表現される^{12)~14)}。 \mathcal{H} の要素 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots)^T$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots)^T$ の内積を

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=1}^{\infty} \overline{x_n} y_n \quad (1)$$

とすれば、 $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}$ が \mathbf{x} の長さである*。ただし、 $\overline{x_n}$ は x_n の共役複素数である。さて、 \mathcal{H} において

* 長さが有限の要素からなる無限次元のベクトル空間を一般化した空間をヒルベルト空間という。

† Dynamical Systems, Quantum Mechanics, and Computers—Physical Bases of Computation by Atsushi IMIYA (Dept. of Information and Computer Sciences, Faculty of Engineering, Chiba University).

†† 千葉大学工学部情報工学科

* 記号力学系とはもともと、符号伝送系の計算モデルとして導入された概念である。本稿では、この考えをオートマトン、チューリング機械による言語の生成まで拡張して考えている。

$$i\alpha \frac{dx(t)}{dt} = Hx(t), t > 0 \quad (2)$$

なる力学系（微分方程式）を考える。ここで、 α は実数、 $i=\sqrt{-1}$ であり、 H は正値自己共役作用素である*。 H はハミルトン作用素と呼ばれ物理系の決める作用素である。式(2)の解は

$$x(t) = \exp\left(-\frac{i}{\alpha} Ht\right) x(0) \quad (3)$$

で与えられる。

\mathcal{H} の恒等変換 I に対して、 $A^0=I$ とすれば、作用素 A の指数関数は、

$$\exp(A) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!} \quad (4)$$

で定義される。

式(3)において時間変化を表す項を $U(t)$ とおくことにする：

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\alpha} Ht\right) \quad (5)$$

このとき、 H^* を H の共役作用素とすれば**、

$$U(t)^* = \exp\left(\frac{i}{\alpha} H^*t\right) = \exp\left(\frac{i}{\alpha} Ht\right) \quad (6)$$

より、

$$U(t)^* U(t) = I \quad (7)$$

となり、 $U(t)$ がユニタリー作用素であることが分かる。したがって、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E(t) &= \frac{d}{dt} \|x(t)\|^2 \\ &= \frac{d}{dt} (U(t)x(0), U(t)x(0)) \\ &= \frac{d}{dt} (x(0), U(t)^* U(t)x(0)) \\ &= \frac{d}{dt} \|x(0)\|^2 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (8)$$

より、解のエネルギー $E(t)=\|x(t)\|^2$ が時間に関して不変であることが分かる。

有限の時間間隔 τ で式(3)の変換を考えると、

$$U = \exp\left(-\frac{i}{\alpha} H\tau\right) \quad (9)$$

と置けば、

$$x(n\tau) = U^n x(0) \quad (10)$$

となる。

次に、ハミルトン作用素 H の固有値は、仮定

* ヒルベルト空間の要素に対する変換作用素という。線形な変換の場合には無限個の要素からなる行列を考えればよい。

** 転置共役行列の一般化である。

よりすべて正数である^{13), 14)}。また、以下では固有値が可算個（可算無限個）である場合を考える。そこで、

$$\infty > \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq \dots > 0 \quad (11)$$

によって固有値に番号を付けることにする。そして、 λ_n に対応する長さを 1 に規格化した固有ベクトルを u_n とする：

$$Hu_n = \lambda_n u_n, \|u_n\| = 1 \quad (12)$$

$\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ は \mathcal{H} の正規直交基底となるから、 \mathcal{H} の要素を

$$x = \sum_{n=1}^{\infty} a_n u_n \quad (13)$$

なる形式に展開できる。

一方、

$$\exp(H)u_n = e^{\lambda_n} u_n \quad (14)$$

であるから、

$$u_n(t) = U(t)u_n = u_n \exp\left(-i\frac{\lambda_n}{\alpha} t\right) \quad (15)$$

と置けば、時間 t における状態は

$$x(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n u_n(t) \quad (16)$$

と表すことができる。また、

$$a_n(t) = a_n \exp\left(-i\frac{\lambda_n}{\alpha} t\right) \quad (17)$$

と置けば、

$$x(t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) u_n \quad (18)$$

と表すことができる。本稿では、式(16)を解の S 表現と呼び、式(18)を解の H 表現と呼ぶことにする*。S 表現では、基底関数が時間的に変動し、H 表現では基底関数の重みが時間とともに変化する。

u_n を基準の座標軸とした場合 $U(t)$ の第 mn 要素 $u_{mn}(t)$ は

$$u_{mn}(t) = (u_n, U(t)u_m) \quad (19)$$

で与えられる。

上では、 H と方程式の形式を決めてその解の性質を調べてきたが、作用素の指数関数の性質より、

$$H = -\frac{\alpha}{i} \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - I}{t} \quad (20)$$

によって、変換 $U(t)$ から H を決定できることが分かる。

さて、力学系は時間の進行による解（軌道）の

* S, H はそれぞれ、Schrödinger, Heisenberg の頭文字である。

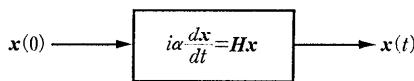


図-1 量子力学系のブロック図

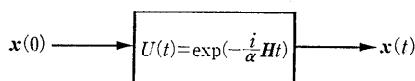


図-2 図-1 の力学系の解の軌道の計算

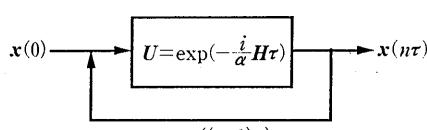


図-3 標本化した軌道の計算

性質を完全に記述している。図-1, 2, 3 にそれぞれ式(2), (3), (10)の力学系の初期状態からある状態にいたる性質をブロックダイアグラムで表す。初期状態 $x(0)$ を入力、時間 T の状態 $x(T)$ を出力として入力から出力を計算することを考えると、図-1, 2, 3 から力学系の決める作用素 $U(t)$ が入力から出力を計算する計算機と考えることができる事が分かる。これは、可逆力学系、非可逆力学系どちらの力学系についてもいえる性質である。

3. チューリング機械と量子計算機

まず、チューリング機械を閉じた系における計算記号力学系として定式化することから始める。整数の集合を \mathbf{Z} とし、チューリング機械のテープのコマの位置に通し番号を付ける。テープ上に書かれる有限個の記号の集合を Σ とし、 Σ の要素の零個以上の要素からなる列の集合を \mathbf{S} すると \mathbf{S} の要素 s がテープの状態を表すことになる。ただし、列 s の中で実際に計算に利用される部分は有限の長さの意味のある記号の部分であり、その部分をはさんでプランク記号が両側に無限個並ぶことになる。そして、チューリング機械の有限個の内部状態の集合を \mathbf{Q} とする。このとき、

$$\begin{aligned} y &\in \{x-1, x, x+1 \mid x \in \mathbf{Z}\} \\ q, q' &\in \mathbf{Q} \\ s, s' &\in \mathbf{S} \end{aligned} \quad (21)$$

と置けば、チューリング機械を $\mathbf{Z} \times \mathbf{Q} \times \mathbf{S}$ からそれ自身への写像 δ

$$(y, q', s') = \delta((x, q, s)) \quad (22)$$

と考えることができる。すなわち、初期状態を $s(0) = (x_0, q_0, s_0)$ (23)

とし、式(22)の変換に時間 τ だけかかるとき、時間 $n\tau (n \geq 1)$ の機械の状態 $s(n\tau)$ を、

$$s(n\tau) = \delta(s((n-1)\tau)) \quad (24)$$

$$s(n\tau) = \delta^n(s(0)) \quad (25)$$

とする計算記号力学系と考えることができる。ただし、 δ^n は $s(0)$ への写像 δ の n 回の適用を表している。そして、 δ の N 回の適用の後に内部状態が終了状態 q_e になったとき：

$$(z, q_e, s_e) = \delta^N(s(0)) \quad (26)$$

のテープ上の列 s_e が出力となる。図-4 に閉じた計算記号力学系としてのチューリング機械の解釈を示す。

以上の考察から、力学系とチューリング機械と共に、状態の時間変化を記述する機構であることが分かる。さらに、式(22)より、関数 δ を 1 対 1 変換になるように記述すれば、出力から入力を復元できる計算機、すなわち可逆チューリング機械が実現できることになる。

次に、Deutsch²³⁾の考えに従ってチューリング機械の動作を式(10)の中に埋め込むことを考える^{23)~25)}。Dirac は \mathcal{H} の基底ベクトル \mathbf{u}_n を $|n\rangle$ と書く略記方を提案し、ケットベクトルと呼んだ、また、ケットベクトルの双対ベクトル $\langle n|$ をブラベクトルという^{*}。そして、二つのベクトルの内積は

$$\langle \mathbf{u}_m, \mathbf{u}_n \rangle = \langle m | n \rangle \quad (27)$$

となる。さらに、式(13)を

$$|\mathbf{x}\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n |n\rangle \quad (28)$$

と記述できる。

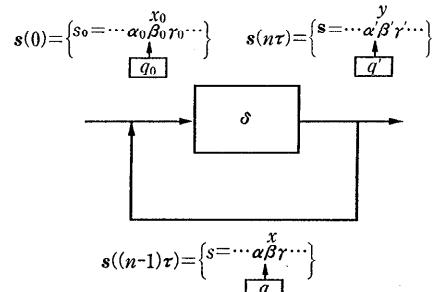


図-4 閉じた記号力学系としてのチューリング機械

* ブラベクトルはケットベクトルの転置共約ベクトルである。

さて、内部状態 $q \in \mathbf{Q}$ をすべて M ビットの 2 進数で符号化する。ただし、後で述べるように 1 ビットだけ、たとえば第 1 ビットだけは停止信号として特別な用途に利用する。さらに、 $s \in \mathbf{S}$ を 2 進数で符号化する。このとき、 $(x, q, s) \in \mathbf{Z} \times \mathbf{Q} \times \mathbf{S}$ と \mathbf{Z} の要素との間には 1 対 1 の対応を考えることができる。そこで Deutsch はまず、 \mathcal{H} の基底ベクトルを

$$\begin{aligned} |x; q; s\rangle \\ = |x; n_0 n_1 \dots, n_{m-1}; \dots m_{-1} m_0 m_1 \dots\rangle \end{aligned} \quad (29)$$

によって符号化し、計算の初期状態を

$$\begin{aligned} |\mathbf{x}(0)\rangle &= \sum_{s \in \mathbf{S}} a_s |0; o; s\rangle \\ \sum_{s \in \mathbf{S}} |a_s|^2 &= 1 \end{aligned} \quad (30)$$

とした。ただし、有限個の a_s だけが非零の複素数であり、またテープ上の記号に関する仮定より、無限個の m_i が 1 であるときは、 a_s を零とする。そして、計算過程を

$$|\mathbf{x}(n\tau)\rangle = \mathbf{U}^n |\mathbf{x}(0)\rangle \quad (31)$$

と表すことを考えた。Deutsch はこの計算機を量子計算機と呼んだ。ここで、計算中は $n_0 = 0$ とし、停止時に n_0 を 1 にすることにした。これは、量子力学系では系の外からの観測によって状態が変化するため計算終了時まで、テープの状態を外部から観測できないことを解決するための操作である。

ヘッドは一度に左右に 1 コマ以上動かないことから、状態の時間変化を決める行列の要素は式(19)より

$$\begin{aligned} u(x'; q'; s', x; q; s) \\ = \{\delta_{x' x+1} u^+(q'; m_{x'}; q; m_x) \\ + \delta_{x' x-1} u^-(q'; m_{x'}; q; m_x)\} \\ \times \prod_{y \neq x} \delta_{m_y m_y} \end{aligned} \quad (32)$$

となる。ここで、 u^+, u^- は共に $q', m_{x'}, q, m_x$ の関数であり、行列 \mathbf{U} がユニタリー行列となるように決めるところにする。関数の組 $\{u^+, u^-\}$ の設定によって種々の計算機が存在することになる。

前章で解説したように、状態の時間変化、すなわち計算過程がユニタリー作用素であることから、量子計算機は可逆計算機であり、しかも計算過程において系のエネルギー

$$E = \langle \mathbf{x} | \mathbf{x} \rangle = \sum_{s \in \mathbf{S}} |a_s|^2 \quad (33)$$

を保存する計算機であることが分かる。

Deutsch はまた、量子計算機すべての帰納関数が計算できることを示し、万能量子計算機が構成できることを示した。そして、特別な場合として、すべての時間で一つ一つの基底関数そのものが計算過程の状態を表す場合に、量子計算機が可逆チューリング機械になることも指摘した。可逆チューリング機械³⁹⁾は通常のチューリング機械を模倣できる。また、量子計算機から可逆チューリング機械を構成できる。したがって、量子計算機は少なくともチューリング機械と同等の計算能力をもつことが分かる。実際、Deutsch²³⁾ や Jozsa²⁵⁾、Deutsch と Jozsa²⁶⁾ は量子計算機が本質的に並列計算機であることから、ある種の問題を量子計算機によってチューリング機械よりも速く計算できることを示した。

また、彼らは量子計算機は計算中に計算過程を力学系の外から観測できないのに対して、チューリング機械はすべての時間で計算過程を力学系の外から観測できることから古典力学に基づく計算機であることを指摘した。これらの詳細に関しては文献 21)～26) を参照されたい。

4. む す び

本稿で解説した量子計算機をモデルとする実際の計算機が実現できるのであろうか。すなわち、チューリング機械が現在の von Neumann 型計算機の抽象化モデルであるように、量子力学の決める力学系を抽象モデルとする計算機が実際に設計できるかどうかは問題である。

可逆チューリング機械のビリヤードモデル³⁹⁾は可逆チューリング機械の物理モデルであるから、ある種の量子計算機の理想状態での実現と考えることもできる。一方、粒子の完全弾性衝突をソリトンによって波動の衝突として電気的あるいは光学的に実現できることが知られている^{17), 27)}。たとえば、光ソリトンやある種の有機鎖上を伝搬するソリトンによって計算の基礎となるスイッチング回路を構成する試みがある。これによって可逆素子を実際に構築できれば、ビリヤードモデルに基づく計算機をそのまま基板の上に実装できることになるだろう^{27)～30)}。

本稿では触れなかったが、Stern は量子力学の観測理論と論理計算の表現形式の関係を指摘し、行列論理なる体系を構築した。そして行列論理

に基づく光並列計算機の実装法、さらに行列論理と知性との関係について検討している^{31),32)}。Penrose³³⁾ や Donald³⁴⁾ は量子計算機、人工知能、神経回路、脳科学、知性の関係について斬新な議論を展開している。また、スピンのパリティーに基づいた暗号理論など量子力学に基づいた情報理論の新展開などの詳細については文献 15), 35)~37) やその参考文献を参照されたい。また、逆計算と Maxwell の悪魔との関係については文献 38), 39) およびその文献を参照されたい。

なお、3.において示したチューリング機械を閉じた計算記号力学系と考える立場は本稿において初めて明確に提案したものである。

参 考 文 献

- 1) Hirsch, M. W. and Smale, S.: *Differential Equations, Dynamical Systems, and Linear Algebra*, Academic Press; New York (1974) (田村一郎、水谷忠良、新井紀久子訳：力学系入門、岩波書店 (1976)).
- 2) Arbib, M. A.: *Automata Theory and Control Theory—A Rapprochement*, Automatica, Vol. 3, pp. 161–189 (1966).
- 3) Zadeh, L. A. and Desor, C. A.: *Linear System Theory, the State Space Approach*, McGraw-Hill; New York (1963) (関根泰次、齊藤正男、正田英介訳：線形系の理論、コロナ社 (1971)).
- 4) Nicolis, G. and Prigogine, I.: *Self-Organization in Nonequilibrium Systems from Dissipative Structures to Order through Fluctuations*, John Wiley & Sons; New York (1977) (小畠陽之助、相沢洋二訳：散逸構造—自己秩序形成の物理学的基礎一、岩波書店 (1980)).
- 5) 深尾毅：分散システム論—熱力学的システム論一、昭晃堂 (1987).
- 6) Smale, S.: The Fundamental Theorem of Algebra and Complexity Theory, Bulletin of the American Mathematical Society, New Series, Vol. 4, pp. 1–36 (1981).
- 7) Hirsch, M. W. and Smale, S.: On Algorithms for Solving $f(x)=0$, Communications on Pure and Applied Mathematics, Vol. 32, pp. 281–312 (1979).
- 8) Blum, L. and Shub, M. and Smale, S.: On a Theory of Computation and Complexity Over the Real Numbers : NP-Completeness, Recursive Functions and Universal Machines, Bulletin of the American Mathematical Society, New Series, Vol. 21, pp. 1–46 (1989).
- 9) Smale, S.: Some Remarks on the Foundations of Numerical Analysis, SIAM Review, Vol. 32, pp. 211–220 (1990).
- 10) Zapatin, R. R.: Pre-Regge Calculus : Topology via Logic, International Journal of Theoretical Physics, Vol. 32, pp. 279–299 (1993).
- 11) Dirac, P. A. M.: *The Principle of Quantum Mechanics*, 4th edition, Oxford University Press; London (1958) みすず書房 (1963).
- 12) von Neumann, J.: *Die Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Springer-Verlag; Berlin (1932) (井上健、広重徹、恒藤敏彦訳：量子力学の数学的基礎、みすず書房 (1958)).
- 13) 竹内外史：線形代数と量子力学、裳華房 (1981).
- 14) Yosida, K.: *Functional Analysis*, 5th edition, Springer-Verlag; Heidelberg (1978).
- 15) Harken, R. ed.: *The Universal Turing Machine A Half-Century Survey*, Oxford University Press; Oxford (1988).
- 16) Chaitin, G. J.: *Information, Randomness and Incompleteness*, Papers on Algorithmic Information Theory, World Scientific Publishing; Singapore (1987).
- 17) Stewart, I.: *The Problems of Mathematics*, 2nd edition, Oxford University Press; Oxford (1992).
- 18) Turing, A. M.: *Collected Works of A. M. Turing*, Ince, D. C. ed.; *Machine Intelligence*, Britton, J. L. ed.; *Pure Mathematics*, Saunders, P. T. ed.; *Morphogenesis*, North-Holland; Amsterdam (1992).
- 19) 那須正和：記号力学系の理論スライディングプロック写像、セル構造オートマトンの並列写像に関する、電子通信学会技術研究報告、情報理論研究会 IT-89-68 (1989).
- 20) 広瀬健：帰納的関数、共立出版 (1989).
- 21) Margolus, N.: Quantum Computation, pp. 487–497, Annals of the New York Academy of Sciences, Vol. 480, Greenberger, E. D. ed., New Techniques and Ideas in Quantum Measurement Theory (1986).
- 22) Benioff, P.: Quantum Mechanical Hamiltonian Models of Computer, pp. 475–486, ibid.
- 23) Deutsch, D.: Quantum Theory, the Church-Turing Principle and the Universal Quantum Computer, Proc. of Royal Society of London series A, Vol. 400, pp. 97–117 (1985).
- 24) Deutsch, D.: Quantum Computational Networks, Proc. of Royal Society of London series A, Vol. 425, pp. 73–90 (1989).
- 25) Jozsa, R.: Characterizing Classes of Functions Computable by Quantum Parallelism, Proc. of Royal Society of London series A, Vol. 435, pp. 563–574 (1991).
- 26) Deutsch, D. and Jozsa, R.: Rapid Solution of Problems by Quantum Computation, Proc. of Royal Society of London series A, Vol. 439, pp. 553–558 (1992).
- 27) Davydov, A. S.: *Soliton in Molecular System*, 2nd edition, Kluwer Academic Publishers; Dordrecht (1991).
- 28) Dassow, J. and Jürgensen, H.: Soliton Automata, Journal of Computer and System Science,

- Vol. 40, pp. 154-181 (1990).
- 29) Gécseg, F. and Jürgensen, H.: Automata Represented by Products of Soliton Automata, *Theoretical Computer Science*, Vol. 74, pp. 163-181 (1990).
- 30) Jiang, Z.: An Energy-Conserved Solitonic Cellular Automaton, *Journal of Physics A*, Vol. 25, pp. 3369-3381 (1992).
- 31) Stern, A.: *Matrix Logic*, Elsevier Science Publishers; Amsterdam (1988).
- 32) Stern, A.: *Matrix Logic and Mind, a Probe into a Unified Theory of Mind and Matter*, Elsevier Science Publishers; Amsterdam (1992).
- 33) Penrose, R.: *The Emperor's New Mind Concerning Computers, Minds and the Laws of Physics*, Oxford University Press; Oxford (1989).
- 34) Donald, M.J.: Quantum Theory and the Brain, *Proc. of Royal Society of London series A*, Vol. 427, pp. 43-93 (1990).
- 35) Bennett, C. H., Bessette, F., Brassard, G., Salvail, L. and Smolin, J.: Experimental Quantum Cryptography, *Journal of Cryptography*, Vol. 5, pp. 3-28 (1992).
- 36) Wiesner, S.: Conjugate Coding, *SIGACT news*, Vol. 15, pp. 78-88 (1983).
- 37) Ekert, A. K.: Quantum Cryptography Based on Bell's Theorem, *Physical Review Letters*, Vol. 67, pp. 661-663 (1991).
- 38) Leff, H. S. and Rex, A. F.: *Maxwell's Demon Entropy, Information, Computing*, Princeton University Press; Princeton (1990).
- 39) 本特集の2, 3. (森田憲一著) とその参考文献を参照。

(平成5年10月20日受付)



井宮 淳 (正会員)

学士, 修士, 博士を東京工業大学において修了, 工学博士. 1985年, 金沢大学工学部に勤務. 1990年千葉大学工学部に転任. 現在情報工学科助教授. 本会学会誌編集委員会基礎・理論WG幹事, コンピュータビジョン研究会幹事, The New York Academy of Sciences 会員. 離散位相幾何学の計算論に興味をもつ.

