

量子コンピュータで広がる世界

藤井 啓祐

本稿では、量子力学の原理で動作する量子コンピュータが得意とするタスク、その潜在能力、それが実現することによってどのような世界が実現するかに迫っていききたいと思います。

量子コンピュータでできること

状態が巨大なベクトルで、時間発展が巨大な行列で与えられるような量子力学系を用いてコンピュータを作ろうというのが量子コンピュータです。量子力学、および、量子コンピュータが持つ性質を用いると、どのような問題を解くことができるか見ていきましょう。

得意技1：量子の世界そのものの計算

● 従来型コンピュータでは手に負えない計算量

量子系のエネルギーや時間発展(時間が進むことで物理系が変化すること)を求めるためには、巨大な行列の対角化(行列計算テクニックの1つ、詳しくは第3部 Appendix 1で解説)を行う必要があります。これは従来コンピュータでやるとなかなか難しいです。

例えば、10PFLOPS(ペタフロップス;1秒間に、1京回=10000兆回の実数演算ができる)を誇る京コンピュータでも100万次元の行列の対角化に1時間を要します。100万次元は量子の世界の粒子(量子ビット)で数えると、たった20個($2^{20} = 10^6$)です。なので、これだけのコンピュータをもってしても20個の粒子からなる系のエネルギー(正確にはエネルギーに対応するハミルトニアンという物理量)を対角化するのが限界というのが現状です。もちろん厳密な方法にこだわらなければさまざまな方法を適用できます。しかし、時間発展の計算となると、それでも粒子数に対して指数的にスケールする計算量のため、100粒子にも満たない段階でいずれ従来型コンピュータでは手に負えない状況になります。

● 量子コンピュータなら量子系をそのまま計算できる

量子コンピュータがあれば、このような量子系の時

間発展はそのまま量子の世界で実行できます。そもそも物理法則が巨大な行列に従って巨大なベクトルを更新するようにできているからです。このように制御可能な量子系を用いて他の量子系をシミュレーションするアプローチは広く量子シミュレーションと呼ばれています。

また、量子コンピュータ上のアルゴリズムをうまく構成することで、量子コンピュータ上で巨大な行列を対角化できます。このようなアルゴリズムは、量子位相推定アルゴリズムと呼ばれ、さまざまな量子アルゴリズムに利用されています。ただし、行列は巨大であってもよいですが、そのような行列が量子コンピュータ上の命令セットで効率よく実行できる必要があります。

ハミルトニアンによる時間発展などがそのような例で(物理的な時間発展は物理法則を命令セットとして効率よく実装されているのだから)、ハミルトニアンを対角化しエネルギー固有値を量子コンピュータ上で取得できます。

● 量子計算の実現による恩恵

量子系のエネルギーや時間発展が計算できるようになるとどのようなメリットがあるでしょうか。1つは、材料や分子を原子レベルで設計しその性質をシミュレーションできるという点があります。

私たちの身の回りにある水分子などの分子は、水素原子や酸素原子などの複数の原子の上を電子が1点に存在するのではなく波動関数として広がりを持っていることによって形成されています。高校の化学で習った共有結合というのは電子が波動関数として空間的に広がりを持ち、それらを原子が共有していることによる結合(エネルギーが低くなり安定する)ということでした。どのような分子が安定的に存在するか、その分子がどのような性質を持つか、それらを組み合わせるとどのような化学反応が起こるか、といったものはミクロな世界の量子力学のルールによって決まります。

これまでは従来コンピュータを用いたアプローチを中心にこれらの分子や材料の性質を調べてきました