

## 量子情報科学：量子、情報、ゲノムー10年の講義を振り返って

はじめに

この講義は、2004年から、ほぼ毎年、(1.5時間×)15コマの講義として、行ってきた。その性格は、多分に人材育成と理工学系の大学院の共通の入門的な講座となることをめざした実験的なものであった(最初は、2004・2008年度の、文部科学省の新興分野人材養成プログラム「ナノテク・バイオ・IT融合教育プログラム」の一環としてスタートした)。この講義は、情報学、計算回路、熱力学、統計力学、量子力学、多粒子系の量子力学、量子情報・量子計算、計算化学と情報化学、バイオインフォマティクス、暗号理論など、多岐にわたるもので、一種の大学院の教養科目のような趣を呈することになった。以下では、この講義を10年担当した経験を踏まえて、この講義の意義と、これからの課題について、簡単に考察してみる。

講義内容と変遷

最初、この講義は、大枠としては、人材養成を念頭においていた。こうした学際的な視点に立った時、学会などの結成を通じて、最初に専門領域としての活動が始まったのは、医学との境界領域であり、その分野は、Medical Informatics 医療情報学、と呼ばれていた。その活動が始まったのは、1970年代からだだったが、学会となったのは、1980年頃である。その後、化学と情報計算の境界に計算化学と情報化学が、(分子)生物学との境界にバイオインフォマティクス(生命情報工学)が生まれた。

本講義は、そうした状況を踏まえ、これまであまり意識されてこなかった、「物理学における情報の概念」をとりあげ、多体問題(多粒子系の量子力学)の密度行列による記述や量子統計とエントロピーの概念を紹介することをめざしていた。ところが、こうした課題を講義しているうちに、マックスウエルのデモンをめぐる考察の歴史(1)や、量子情報・量子計算機に関する関心の高まり(2)を知ることとなった。だが、これらに関する成書は、前者で500頁、後者で700頁に近く、教科書としても、副読本としても、分量が多過ぎるものだった。また、受講者たちが、それらを読みこなすことは、極めて難しいと判断した。

とくにこの講義では、受講者を自然科学系一般の専攻生と考えているため(実際には、教官も時々覗かれていたが)、前提知識がバラバラで、その中心課題である量子力学でさえ、十分理解されているとは限らないのが実情だった。そのために、あまり各論に深く踏み込まず、しかも全体としてある種の調和が取れた内容にする必要を感じた。例えば、現在の量子情報・量子計算の解説の多くは、実際の量子力学の系の計算を扱ったり、普遍的な計

算が扱ったりできるわけではない。極めて特殊な分野である。それを何のために学ぶかという動機づけが大変難しいと感じた。また、時間的にも、多くの内容を半期でこなすのは、かなり無理があるように思われた。また、受講生の理解を促進するには、演習を多く課す必要も感じたが、そうした問題をつくることは、そうやさしいことではなく、時間も掛かる。

そのために、この講義は、10年目となる現在も、まだ、不完全なものであり、講義ノートも、不十分である。しかしながら、こうした講義を行ってきた経験は、いろいろに生かすことができるのではないかと、という印象ももっている。その最も大きな意義は、次の2点に要約される。

(1)「自然科学と情報計算学(技法)の境界領域」は、ひとつの学際領域として発展していくと予感されること。

(2)この分野は、数学、自然科学(物理、化学、生物学とそれらの境界、および応用)、工学とならぶ、もうひとつの大きな学問領域になりうる。それは、人間の知性や思考を研究し、その過程を最終的には、物理学の問題として捉え、さらにそれらの能力を拡大することを目的とする学問領域である、

人間は、自然を認識しようとする試みを通じて物理、化学、生物学などの学問を発展させてきた。しかし、実際の(我々人間を含む)自然には、どこまでが物理学で、どこまでが化学で、どこからが生物学と言うような区別はない。その意味で学は一つである。それに対して、情報と計算の技法や学問は、自然科学の手段とみなされているが、実は、数学でも自然科学でも、工学でもなく、人間の考える技(art)の要素が多分に含まれている。現在、計算機や情報工学などの教育内容を見ると、体系というものがあまりない。このことは、情報や計算という概念が自然科学の基礎である、物理学の中で論じられてこなかったこととも関係していると思われる。

ペンローズは、知性や心を物理学の視点から考察した興味深い著書(3)、(4)を出しているが、彼の提唱している心の働きに関する仮説には、批判が多い。量子情報・量子計算の物理学的な基礎は量子纏れにあるが、それは、量子力学的状態がマクロ的にも観察されうるという、シュレディンガーの猫に象徴される現象と関係している。

脳や心が部分的に、そうした量子状態を保持しているかは、自然科学の課題としても非常に興味深いものであり、この講義でも究極の課題として提示している。こうした考えが正しいか、あるいは見当違いかは、まだ、わからないが、この講義がめざす最終的な目標のひとつも、Quantum Biologyにある。

20世紀において、量子力学がつけられたことで、化学が物理とつながり、DNA(ゲノム)の2重らせん構造モデルが提出されたことで、生物学が化学とつながった。21世紀は、情報計算技法(学)が、こうした自然科学とつながり、さらに広い学問領域となるとも考え

られる。この講義がそうした未来を先取りしているとするれば、この講義をさらに敷衍すれば、自然科学系の大学院の共通講座として認知されてもよい可能性があるとも考えられる。

### 情報学と計算技法

このテーマの講義では、情報計算学をシャノン流の通信の基礎というよりは、人間の思考を支援する技法の研究と定義した。ここでは、Turing Machine の概念を、わりやすく説明する必要があり、また、数学の形式化の歴史（ゲーデルの完全性定理と不完全性定理）、ブール代数と計算回路を紹介した。その目的は、計算機の基本的な概念を理解することによって、計算を単なる応用ではなく、数学との関係がどこにあるかを明らかにし、ひいては生物の計算機的な特徴を理解することにも、つなげることであった。

これまで化学と情報計算、生物学と情報計算、医療情報学などの新しい領域は、「実験や臨床医学に従属、あるいは奉仕する応用の学」とみなされていた。そうした考えを打破して、これらの技法の基礎を考え、さらに新しい応用を工夫する人材を養成する必要があると感じている。

また、例えば、特異値分解や、主成分分析、SVM(Support Vector Machine)、SOM などの技法が自然科学だけでなく、さまざまな分野で使われていることを理解し、人材養成の観点から、仕事の巾を広げられることを実感してもらえ、ことも重要だと感じた。

情報計算技法を、「人間の思考、すなわち思惟を計量的に研究、拡大する手段」という考えは、まだ、普遍的ではない。例えば、統計学もこの中に入るが、統計学は、それだけで独立していると考えられており、線形計画法や動的計画法なども、Algorithm、OR (Operations Research) の技法などと分類されている。こうした視点は、この講義の特徴の一つである。

計量的な思惟の方法論とは、帰納、演繹、発想、計画など、アリストテレスの時代からよく知られている人間の基本的な思考パターンに対応する計量技法と、データベースや知識ベース、グラフィックスなどを統合した環境を基盤とする。こうした考え方は、現在話題になっている、ビッグデータ、データサイエンティストなどの仕事にも共通するところが多いと思われる。このような専門家が必要とされているひとつの分野は、遺伝学とゲノム学 Genetics/Genomics である。そうした人材の育成は、人材養成でも、大きな課題である。

### 古典物理学における統計、エントロピー、情報

本講義では、次に「物理学と情報計算」という新しい領域を想定して、その基礎となる、熱力学や統計力学などの古典物理学における統計、情報、エントロピーなどの概念を、再考することを試みた。

そのためにまず、熱力学と統計力学の簡単な復習からスタートした。ここでは、クラウジウスのエントロピーと、ボルツマンのエントロピーと、情報学的なエントロピーを比較して、その関係を考察した。また、熱力学の第2法則とマックスウエルのデモンの関係を紹介した。さらに、1ビットの情報をうるために  $kT \ln 2$  のエネルギーが必要と考えられていた (Maxwell のデモンに関するシラード L. Szilard の考察) が、情報を消す時にだけに、これだけのエネルギーがいること (Landauer の原理) を紹介した。また、カルノーの理想的な熱機関が可逆的なように、未来の計算回路は、可逆的でなければならない、という考えを紹介した。後者は後に、量子回路の特徴の一つとなった。

熱力学のエントロピーや第2法則や、ボルツマンの原理などを、初学者に、理論的にやさしく説明することは難しく、よい教科書もない。統計、エントロピー、情報の概念を持ち込むことで、古典的な熱力学や統計力学の諸概念は、むしろわかりやすくなると思われる。これは、将来課題の一つである。

## 2 状態系の量子力学 - ミニマム量子力学

次に、量子力学の入門として、スピン 1/2 の電子を例とした、「2 状態系」を詳しく解説した。これは2次元の複素数のベクトル空間 (Hilbert 空間) の知識を基礎とするので、簡単な線形代数を復習する必要がある。エネルギー、座標や運動量、角運動量など違って、スピンは、古典的な対応がない「純粋」の物理 (観測) 量である。しかも、2 状態系のモデルはいくつかあるが、それらの記述は、基本的に同じである。さらに、スピンは、素粒子に関わる観測量を考える、絶好の入門になる。また、(3次元の) 現実空間における回転を表現する  $SO(3)$  と、スピン観測軸と回転に対応する  $2 \times 2$  の行列 ( $SU(2)$ ) とは、対応関係にある ( $SU(2)$  は、 $SO(3)$  の 2 価表現)。2 状態系は、量子力学と群論の関係、交換関係と Lie 代数などの関係を学ぶには、もっとも簡単なモデルになる。

例えば、化学においても、量子化学や軌道や化学結合の考えには、量子力学の理解が必要であり、水素原子に関するシュレディンガー方程式を解くことは、必須の学習課題であるが、ディラックのブラ、ケット記法や、線形の重ね合わせ、観測量のスペクトル分解、固有値と期待値、規定ベクトルの変換、ユニタリ変換やエルミート性など、量子力学の基本的な概念と計算法を学ぶ機会は、少ないと思われる。

スピン 2 状態系を学ぶことは、キュービット qubit と呼ばれる量子情報・量子計算の基本となる量子力学的な状態の性質を理解するのに、必須の入門課題である。だが、それだけでなく、量子力学の本質的を理解するのに、最も簡単で、深いモデルになっている。したがって、内容を多少充実したら、この部分は、それだけで、もっとも効率的な、「最小の量子力学」入門になると考える。ここでも、残念ながら、初歩的な入門書で適当なものはみあたらなかった。この講義では、J. J. Sakurai の Modern Quantum Mechanics を参考とした。この教科書は、実用性と理論との説明のバランスがよく、非常に優れているが、入

門としては、そのままでは、難しすぎるように思われた。Feynman の有名な教科書シリーズにも、2 状態系の詳しい記述がある。これらを参考にして、必要な数学的な話題を加えた入門書は、有用であろう。

### 多粒子系の量子力学

多粒子系の状態を単一粒子系の状態のテンソル積で表現することが、量子情報・量子計算の基本である。多電子系を扱う、量子化学は、多粒子系の重要な実例である。多粒子系の量子力学の基本課題は、近似法である。我々の講義の場合、対象となるのは、混合状態にある多粒子系であり、それを記述する基本は、密度行列である。

量子情報・量子計算の基本となる量子状態は、量子纏れがある複合系であり、とくに 2 つの部分系に分割できる系がしばしば、登場する。

そうした複合系の記述は、密度行列となり、その基礎になる量子状態を表す状態ベクトルは、いわゆる縮約された密度行列の固有関数系で展開され、その展開係数が、密度行列の固有値の平方根となる。これがシュミット分解である。シュミット分解を、行列で考えると、特異値分解となる。そこで、この特異値分解に関する知識がいる。ところが特異値分解について詳しく解説している線形代数の教科書は、ほとんどない（最近翻訳された、J. R. Shott の本、豊田秀樹ら共訳、「統計学のための線形代数、朝倉書店、では、一章が割かれてる）。そこでこの講義では、密度行列 Density Operator や、多体粒子系の状態ベクトル表現、縮約された密度行列など、シュミット分解などについて、紹介し、また、量子化学の計算技法、量子統計力学の枠組み、第 2 量子化まで、簡単に解説した。

この部分は、スピン 1/2 系の表現を、多粒子 (n-qubits) に拡張して、量子情報・量子計算につなぐ部分であるが、概念的な話とはともかく、多粒子系の適切な近似計算技法と、量子情報・量子計算とをつなぐ、理論は、まだあまりない。ただ、将来の方向としては、「物理学の多粒子系の計算や量子化学の問題を、量子シミュレータで解く」、というこれも Feynman のアイデアを出発点とする未来型の構想がある。

### 量子情報・量子計算入門

次に、キュービット qubit (quantum bit) と、そのユニタリ変換、その組み合わせである量子回路を基礎とする、量子情報を量子計算の概念を紹介する。ここでは、キュービットとユニタリ変換が、古典的（現在の）コンピュータのソフトウェアにあたる。この部分は、イメージがはっきりしているが、実際の回路を構築することは、(量子) 光学的な装置やイオントラップなどが多様な物理現象を利用することが、試みられている。また、情報伝送も、同じような実験が試みられている。

どちらかと言えば、量子光学の技術を応用した情報通信の実験が先行しており、何らか

の実用の域に到達するのは、確実であるように見える。これに対して、量子計算機としての応用としては、ある種の関数を推定する、1992年の Deutshe-Jozsa Algorithm、大きな数の因数分解を、量子フーリエ変換を使って実行する 1994年の P. Shor's Algorithm、「隠された数」を判定する高速DB検索を実行する、1996年の L. Grover's Algorithm の他は、訴えるようなものがなかったが、最近では、線形代数の問題を高速に解く方法などが、発表され身近なものになってきた。

ただ、フーリエ変換を利用した、素因数分解は、これまでは、ほとんど唯一の応用例であったが、仮に実現したとした場合のインパクトは大きく、ネット時代の通信の基盤を揺さぶるものである。現在、ネット社会は、高度に発展してきたところで、プライバシーや機密保持など、さまざまな問題が噴出してきている。量子情報・量子計算の技術は、ネット社会を支えている重要技術に関係しているから、大学院レベルの研究者の教養として、問題本質を理解しておく必要がある。この講義は、それには不十分であるが、そし牛田方向への発展も意義があるだろう。

なお、暗号技術には、オイラーの小定理やオイラー関数など、初歩的な数論が使われている。量子情報と量子計算に関し、今盛んに研究されているのは、量子纏れを観測したり、量子状態を操ったりする量子工学的な実験であるが、そうした試みは、量子光学で盛んであり、昨年のノーベル物理学賞は、そうした仕事に与えられている。また、暗号問題を含め、量子情報の応用は、安全な通信をめざしており、実験的な進歩が著しい領域となっている。

#### 将来の展開

だが、そうした通信技術を除くと、応用例はまだ少なく、量子計算機の実用化は、相当遠い「夢」になっている。だから、この講義を理系大学院の共通の共通講座にすることには、異論があるかもしれない。だが、研究者の関心は高まり、その数も増えているように思われる。その領域やこれから期待される研究方向を以下に大別する：

(1) 量子計算のソフトウェアに当たる、アルゴリズムの研究は、それだけで研究者の関心を惹いている。ここではやはり、線形代数とのつながりが深く、応用としても、大規模な線形問題を解く、というような問題が実用性もあり、関心を高めている。これまでは、素因数分解に基礎になる、フーリエ変換に関係したアルゴリズムが注目されていたが、最近では、SVM(Support Vector Machine)なども研究対象になっている。

また、公開カギなど、ネット社会を支える暗号技術の基礎や、ハードウェアについても、まとまった講義ができれば、有益であろう。

(2) 量子力学の発展をしらべる計算や、量子化学のような多粒子系の計算を、実行するアルゴリズムや、シミュレータなどの研究。これはもともと量子力学系をシミュレートする Feynman のアイデアにヒントをえている。

(3) 物理学の多体問題や量子化学などを含む、複合系の量子力学。現在の量子計算機が、かなり単純化されたモデル系を研究しているのに対し、量子纏れが本質的な役割を果たす、物理学や化学の複雑な現象を、量子纏れの計量法などを考察しながら、考える研究。

(4) 上記のひとつ例が、量子纏れあるいは quantum coherence が、ある程度マクロ的な領域でも保たれているのではないかという仮説の下に、ある種の生物現象に、量子力学の影をみつける Quantum Biology と呼ばれる研究である。ここでは、光合成の電子の動きや、渡り鳥の眼の方向探知機能や、匂いの仕組みなどが研究されている。

この講義のもうひとつの狙いは、神経系や脳の機能と、知性や心の働きの解明に、量子力学が必要な日が来るのではないか、という思想である。ペンローズの2冊の本は、そうした考察の例である。

おわりに

10年間の講義を通じてこの講義で紹介したことは、これからもそれぞれ発展していくと思われる。また自然科学系の大学や大学院教育にも新たなヒントを提供するだろう。ひとつの具体的な提案は、この講義を含む、「自然科学と情報計算技法の境界領域」は、自然科学系の学部あるいは大学院の共通講座として、実施する意義があると思われる。

この講義は、熱力学、統計力学、量子力学、情報学などを一度は学んだことのある研究者や社会人にとっても、それらの課目を、量子情報・量子計算という新しい視点から、捉えなおしてみる機会を提供する機会となると思われる。とくに、社会人の再教育講座として、有意義だと考える。

また、ここで提唱しているような内容は、とても一人で教えられるものではなく、まあ、教えられる人も少ないであろう。したがって、大学間や大学と企業などが連携した人材養成、公開講座の形で、ネット配信などを考慮して、実験してみるのがよいと考える。

永く、この講義を企画、運営して下さった、広島大学の相田美砂子教授と事務関係者に感謝する

(神沼二眞、サイバー絆研究所)。

参考文献

- (1) H.S. Leff and A.F. Rex, Maxwell Demon 2: Entropy, Information, Computing, Adam Hilger, 2003.
- (2) M. Nielson and I. Chuang, Quantum computation and quantum information, Cambridge University Press, 2000.
- (3) Roger Penrose, The Emperor's New Mind-Concerning Computers, Minds, and Laws of Physics, Oxford Univ. Press/Penguin Books, 1989  
(日本語訳、林一訳、皇帝の新しい心—コンピュータ・心・物理法則、みすず書房、1994)
- (4) Roger Penrose, Shadows of the Mind, Oxford Univ. Press, 1994  
(日本語訳、林一訳、心の影〈1・2〉意識をめぐる未知の科学を探るみすず書房、2001/2002)

全体をとおして学習できる教科書としては、

- Richard P. Feynman (J.G. Hey and R.W. Allen eds.), Feynman Lecture on Computation, Addison Wesley, 1996 (原康夫他訳、ファイマン計算機科学、岩波書店、1999年)。
- J.J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics (revised ed.), 1994, pp.223-232
- C. P. Williams, Explorations in Quantum Computing, Springer, 2010.  
(<http://www.springer.com/computer/theoretical+computer+science/book/978-1-84628-886-9>)
- S. Dasgupta, C. H. Papadimitriou, and U. V. Vazirani, **Algorithms**, McGraw-Hill, 2006.  
Text at UC Berkeley and UC San Diego
- Steven M. Girvin, Basic Concept in Quantum Information, World Scientific Review Vol. 9?, 2013.
- Simon Sigh, The Code Book, Fourth Estate, 1999.