
量子固有値変換/量子特異値変換

Kaoru Mizuta
The University of Tokyo

2023年11月24日

第1章 量子固有値変換/量子特異値変換

量子計算における近年の重要な進展である量子固有値変換 (Quantum eigenvalue transformation, QET) と量子特異値変換 (Quantum singular value transformation, QSVT) について解説する。量子固有値変換はエルミート行列の各固有値の多項式変換を行う量子アルゴリズムとして G. H. Low と I. L. Chuang によって 2016 年に提案され [LC17, LC19]、後の 2018 年にその一般の行列への拡張である量子特異値変換が A. Gilyén らによって定式化された [GSLW19]。量子固有値変換/量子特異値変換の特筆すべき点は、探索問題, 固有値計算, 線形方程式問題に加え量子多体系のシミュレーションなど、量子加速が期待される重要な問題に対する量子アルゴリズムをその特別な場合として包含し、様々な量子アルゴリズムを統一的に記述することである (量子アルゴリズムの大統一理論と呼ばれる [MRTC21])。加えて、量子固有値変換/量子特異値変換によって“再定式化”された量子アルゴリズムが、従来のアルゴリズムよりも計算コストが小さくなりまた理論的に達成可能な最も良い計算コストを達成したケースも多くある。量子固有値変換/量子特異値変換の実装は、補助量子ビットや非局所的な制御ゲートを必要とするために大規模な誤り耐性量子計算機で可能となると見込まれるが、そのような将来の量子計算機では最も高速かつ高精度に量子計算を行う統一的・標準的な手法として期待されている。

1.1 導入: 量子固有値変換/量子特異値変換とは

有限次元の Hilbert 空間 \mathcal{H} 上のエルミート演算子 $H : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ を考える。Hilbert 空間の次元が d のとき $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^d$ であり、演算子 H は $d \times d$ 行列として書ける。エルミート性から H は対角化可能であり、固有値 $\lambda_n \in \mathbb{R}$ と固有状態 $|\lambda_n\rangle \in \mathcal{H}$ の組を用いて

$$H = \sum_{n=1}^d \lambda_n |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n| \quad (1.1)$$

のようにスペクトル分解できる。演算子 H を引数にもつ関数 $f(H)$ を各固有値 λ_n の変換

$$f(H) = \sum_{n=1}^d f(\lambda_n) |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n| \quad (1.2)$$

によって定めよう。量子固有値変換は、任意の初期状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して

$$|\psi\rangle \rightarrow (\text{量子ゲート, 量子測定}) \rightarrow f(H) |\psi\rangle \quad (1.3)$$

とするような変換を指す。

量子特異値変換は、エルミートな正方行列 H を対象とした量子固有値変換をエルミートと限らず正方行列とも限らない一般の有限次元行列に拡張したものである。次元 d_1, d_2 の Hilbert 空間 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$

に対して、演算子 $A: \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ は $d_2 \times d_1$ 行列として書ける。一般の行列に対しては必ずしも対角化可能とは限らない一方で、常に次のような特異値分解ができる:

$$A = \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} \sigma_n |v_n\rangle \langle u_n|, \quad \sigma_n \geq 0, \quad |u_n\rangle \in \mathcal{H}_1 \simeq \mathbb{C}^{d_1}, \quad |v_n\rangle \in \mathcal{H}_2 \simeq \mathbb{C}^{d_2}. \quad (1.4)$$

ここで、 $\sigma_n, |u_n\rangle, |v_n\rangle$ はそれぞれ特異値、右特異ベクトル、左特異ベクトルという。特異値 σ_n はエルミート行列 $A^\dagger A$ または AA^\dagger の固有値の非負の平方根として得られ、特異ベクトル $|u_n\rangle$ ($|v_n\rangle$) は $A^\dagger A$ (AA^\dagger) の固有値 σ_n^2 の固有ベクトルとなっている。一般の行列 A に対して量子特異値変換を、各特異値 σ_n を $f(\sigma_n)$ に置換する操作で定める。エルミートな場合と異なり、特異ベクトルの左右の区別があるので関数は以下の4種類が定義可能である:

$$f(A) = \begin{cases} \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} f(\sigma_n) |v_n\rangle \langle u_n|, & : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2, \\ \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} f(\sigma_n) |u_n\rangle \langle v_n|, & : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1, \\ \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} f(\sigma_n) |u_n\rangle \langle u_n|, & : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1, \\ \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} f(\sigma_n) |v_n\rangle \langle v_n|, & : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_2. \end{cases} \quad (1.5)$$

量子特異値変換は、Hilbert 空間 \mathcal{H}_1 あるいは \mathcal{H}_2 上の任意の量子状態 $|\psi\rangle$ に対して

$$|\psi\rangle \rightarrow (\text{量子ゲート, 量子測定}) \rightarrow f(A) |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \text{ or } \mathcal{H}_2 \quad (1.6)$$

とするような変換を指す。

量子固有値変換/量子特異値変換は行列の固有値/特異値を関数によって変換するという単純な操作であるものの、その行列や関数の選択次第で様々な量子計算のタスクを実行することができる。例えば、量子加速が期待される最も代表的な例である量子多体系のシミュレートなど、以下のような例がある(詳細は後述する)。

- ハミルトニアンシミュレーション

$d \times d$ のエルミート行列 H を量子多体系のハミルトニアンとして、与えられた状態 $|\psi\rangle$ を初期状態とする Schrödinger 方程式の解 $e^{-iHt} |\psi\rangle$ を用意することをハミルトニアンシミュレーションと呼び、量子計算で古典計算と比べた指数加速が期待されるタスクである。関数 $f(H)$ を行列指数関数

$$f(H) = \sum_{n=1}^d e^{-i\lambda_n t} |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n| = e^{-iHt} \quad (1.7)$$

とする量子固有値変換 $|\psi\rangle \rightarrow e^{-iHt} |\psi\rangle$ はまさにハミルトニアンシミュレーションとなっている。

- 線形方程式問題

$d_2 \times d_1$ の可逆な疎行列 A を考える。 d_2 次元の定数ベクトルである量子状態 $|b\rangle$ が与えられた時に連立方程式

$$A|x\rangle = |b\rangle \quad (1.8)$$

の解 $|x\rangle = A^{-1}|b\rangle \in \mathbb{C}^{d_1}$ を用意するという問題は線型方程式問題と呼ばれ、量子計算で古典計算よりも指数的に速く解ける問題と期待される。関数 $f(A)$ を逆行列

$$f(A) = \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} (\sigma_n)^{-1} |u_n\rangle \langle v_n| = A^{-1} \quad (1.9)$$

とする量子特異値変換 $|b\rangle \rightarrow A^{-1}|b\rangle$ は、線型方程式問題を解く量子アルゴリズムとなっている。

上記の例は量子固有値変換/量子特異値変換の最もわかりやすい応用であるが、その他にも Grover 探索, 量子位相推定, 素因数分解など量子加速のある基本的かつ重要な量子アルゴリズムも含まれる。このことから、この理論は量子アルゴリズムの大統一とも言われる。また、単純に既存の量子アルゴリズムを再定式化するだけでなく、時にはその計算コストも従来の手法よりも良くそして理論的に最も良くなる (最適となる) ことも知られ、将来的な誤り耐性量子計算機で最も標準的な量子アルゴリズムとして有望視される。

以降ではまず量子固有値変換/量子特異値変換の定式化を議論する。具体的には、

- ブロック埋め込み (Block-encoding) [1.2 節]
- 量子ビット化 (Qubitization) [1.3 節]
- 量子信号処理 (Quantum Signal Processing, QSP) [1.4 節で導入, 詳細は 1.6 節]

という3つのステップからなり、一般にはユニタリーとは限らない変換 $|\psi\rangle \rightarrow f(H)|\psi\rangle, f(A)|\psi\rangle$ をユニタリーな量子回路に加えて補助系と量子測定を組み合わせて可能とする。定式化において特に重要なことは、どのような関数 f が量子固有値変換/量子特異値変換で実装可能か、そしてその関数 f を実装するために必要なリソース (回路深さ, 補助量子ビット数) はいくらか、ということである。結論から言うと、一般的な有限次数の多項式関数

$$f(x) = \sum_{n=0}^q c_n x^n, \quad c_n \in \mathbb{C} \quad (1.10)$$

がほとんど全て実装可能であり、その回路深さは多項式の次数 q に比例する。極めて単純な結論とも言えるが、多項式関数は Taylor 展開や Jacobi-Anger 展開などの多項式近似を通じて解析的な関数をほとんど網羅しており、それが様々な量子アルゴリズムを包含していることに繋がっている。また多項式関数の次数が計算コストと直結していることは、量子アルゴリズムを高速化することはそれを実行する次数の低い多項式を発見することと等価であるという、新たな視点を与える。

まずエルミート行列に対して有効な量子固有値変換について 1.2 節-1.4 節で導出したのち、1.5 節で一般の行列に対する量子特異値変換への拡張を行う。

1.2 ブロック埋め込み (Block-encoding)

1.2.1 定義

ここではまず、量子固有値変換/量子特異値変換の基本的な構成要素であるブロック埋め込みを導入する。エルミート行列 H に対して、そのブロック埋め込み O_H とは H に比例する項をブロック対角成分に持つようなユニタリー行列を指す。すなわち、

$$O_H = \begin{pmatrix} H/\alpha & * \\ * & * \end{pmatrix}, \quad \alpha > 0 \quad (1.11)$$

となり、 $O_H^\dagger O_H = I$ を満たすような行列を指す。このようなユニタリー行列は、量子計算でブロック埋め込みとして考えられるよりも前に既に線形代数の文脈でユニタリー拡張 (unitary dilation) と

して知られていた。与えられたエルミート行列 H に対して (1.11) 式で書けるユニタリー行列の存在は必ずしも自明ではないが、それによると以下のような条件で存在性が言える。

Proposition 1. (ブロック埋め込みの存在)

(1.11) 式を満たすブロック埋め込み O_H が存在するための必要十分条件は、 $\alpha \geq \|H\|$ である。

Proof. — (\Rightarrow) ブロック埋め込み O_H が存在するとき、そのユニタリー性より

$$1 = \|O_H\| \geq \left\| \frac{H}{\alpha} \right\| = \frac{\|H\|}{\alpha} \quad (1.12)$$

より $\alpha \geq \|H\|$ である。

(\Leftarrow) $\alpha \geq \|H\|$ のとき、 $I - (H/\alpha)^2 \geq 0$ であるので H と可換な行列 $\sqrt{I - (H/\alpha)^2}$ が存在する。行列 O_H を

$$O_H = \begin{pmatrix} H/\alpha & \sqrt{I - (H/\alpha)^2} \\ \sqrt{I - (H/\alpha)^2} & -H/\alpha \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

と定めると、 $O_H^\dagger O_H = I$ を満たし H/α をブロック対角成分にもつブロック埋め込みである。□

なお、ブロック埋め込みが存在するための必要十分条件は $\alpha \geq \|H\|$ であるが、その構成法は unique ではない。実際、異なる α に対して $\alpha \geq \|H\|$ であれば様々な O_H を構成できるほか、同一の α でも

$$O_H = \begin{pmatrix} H/\alpha & -\sqrt{I - (H/\alpha)^2} \\ -\sqrt{I - (H/\alpha)^2} & -H/\alpha \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

のように (1.13) 式以外の構成も可能である。

さて、量子計算においてユニタリー行列であるブロック埋め込みは量子ゲートによって実装される。ブロック埋め込み O_H はブロック成分に H/α を持つため、その次元は元の Hilbert 空間よりも大きい。従って、 O_H の実装には補助量子ビットを用意する必要がある。このもつで、ブロック埋め込みを再定義すると以下ようになる。

Definition 2. (ブロック埋め込み, Block-encoding)

実の正定数 α として、補助量子ビット a 個と注目系 s に作用するユニタリー演算子 O_H が

$$\langle 0|^{\otimes a} \otimes I_s \rangle O_H \langle 0|^{\otimes a} \otimes I_s \rangle = \frac{H}{\alpha}, \quad \alpha \geq \|H\| \quad (1.15)$$

を満たす時、それをエルミート行列 H の (α, a) -encoding と呼ぶ。

上記の定義では、 H/α が埋め込まれる部分空間として補助系 a の基準状態 $|0\rangle_a^{\otimes a}$ (以降では $|0\rangle_a$ と略記する) による $|0\rangle_a \otimes \mathcal{H}$ としているが、それ以外の部分空間であったとしても適切なユニタリー変換を O_H に含めることで、部分空間を $|0\rangle_a \otimes \mathcal{H}$ とする上記の定義に帰着できる。さらに、エルミート行列 H を規格化 $H \rightarrow H/\alpha$ することによって常に $\alpha = 1$ とすることができるため、一般性を失わずに

$$\langle 0|O_H|0\rangle_a = H \quad (1.16)$$

を満たすブロック埋め込み O_H を考えれば十分である。また、上記の定義より一般的な状況としてブロック埋め込みを必ずしも正確に実装できない場合を考え、以下のように定義してある程度の誤差を許容することができる。

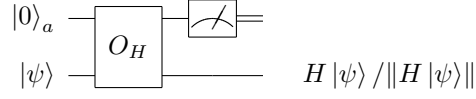


図 1.1: ブロック埋め込みの作用: ブロック埋め込み O_H を作用させた後、補助系を射影測定し $|0\rangle_a$ に見出した場合を事後選択すると $H|\psi\rangle$ を得る。

Definition 3. (誤差を許容するブロック埋め込み)

エルミート行列 H に対して

$$\left\| \langle 0|O_H|0\rangle_a - \frac{H}{\alpha} \right\| \leq \varepsilon, \quad \alpha \geq \|H\|, \quad \varepsilon > 0 \quad (1.17)$$

を満たすユニタリ行列 O_H を、 H の (α, a, ε) -encoding と呼ぶ。

量子固有値変換/量子特異値変換はブロック埋め込みの誤差を許容する場合でも問題なく定式化できるが、誤差がない場合とほぼ並列に議論が進行する。ここでは簡単のために Definition 2 による誤差なしのブロック埋め込みに基づいて定式化を行う。

ブロック埋め込みの意味

ブロック埋め込みは量子固有値変換/量子特異値変換の基本的な構成要素であると同時に、その最も単純な変換を与える。具体的にエルミート行列 H の $(1, a)$ -encoding O_H の作用を考えよう。任意の注目系の状態 $|\psi\rangle$ に対して、補助系の基準状態 $|0\rangle_a$ を用意した上でブロック埋め込みを作用させる。射影演算子

$$P_0 = |0\rangle\langle 0|_a \otimes I_s, \quad P_\perp = I - P_0 \quad (1.18)$$

を定めて、

$$\begin{aligned} O_H |0\rangle_a |\psi\rangle &= P_0 O_H |0\rangle_a |\psi\rangle + P_\perp O_H |0\rangle_a |\psi\rangle \\ &= |0\rangle_a \otimes (\langle 0|O_H|0\rangle_a |\psi\rangle) + P_\perp O_H |0\rangle_a |\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.19)$$

$$= |0\rangle_a H |\psi\rangle + P_\perp O_H |0\rangle_a |\psi\rangle \quad (1.20)$$

となる。この状態に対して補助系 a に関する $\{P_0, P_\perp\}$ の組で指定される射影測定を行う。補助系が基準状態 $|0\rangle_a$ に見出される確率 p_0 は

$$p_0 = \|P_0 O_H |0\rangle_a |\psi\rangle\|^2 = \|H |\psi\rangle\|^2 \quad (1.21)$$

で与えられる。また $|0\rangle_a$ に見出された後の系の状態は

$$\frac{1}{\sqrt{p_0}} P_0 O_H |0\rangle_a |\psi\rangle = |0\rangle_a \otimes \frac{H |\psi\rangle}{\|H |\psi\rangle\|} \quad (1.22)$$

となっており、注目系の状態は定数倍を除いて $H|\psi\rangle$ と等価である。従って、ブロック埋め込み O_H を作用させて補助系の測定を行い $|0\rangle_a$ に見出す状況を事後選択 (post selection) することで、 $|\psi\rangle \rightarrow H|\psi\rangle$ という最も単純な量子固有値変換

$$|\psi\rangle \rightarrow f(H)|\psi\rangle, \quad f(x) = x \quad (1.23)$$

を実行できる (図 1.1)。この操作が確率的であるのは H が非ユニタリーであることに由来する。

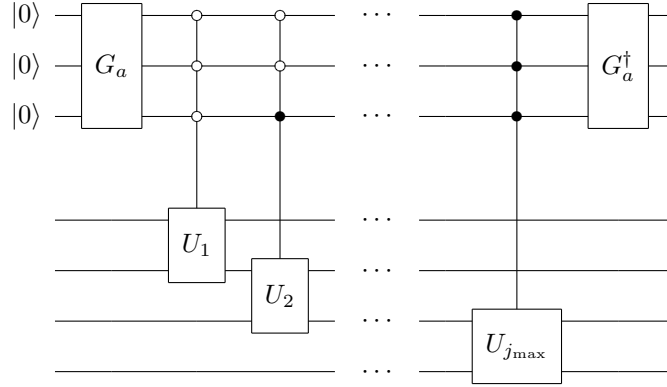


図 1.2: ユニタリ線型結合のブロック埋め込み

1.2.2 ブロック埋め込みの構成

量子計算においてはブロック埋め込み O_H を量子ゲートにより実装する。Proposition 1 により $\alpha \geq \|H\|$ であれば (α, a) -encoding は常に存在する一方で、それが必ずしも局所量子ゲートで容易に実装できるとは限らない。後述するように α が小さいほど量子固有値変換/量子特異値変換の実装の計算複雑性は小さくなるが、必ずしも最良の $\alpha = \|H\|$ となるようなブロック埋め込みが見つけれられるとも限らない。与えられたエルミート行列 H に対して可能な限り小さい α を持つようなブロック埋め込みを発見法的に見つけなければならない。幸いにも、ユニタリ線型結合や疎行列のような量子計算において重要なクラスのエルミート行列 H に対しては系統的なブロック埋め込みの構成法が知られており、ここではそれらを議論する。

ユニタリ線型結合 (Linear Combination of Unitaries, LCU)

ハミルトニアン H が次のような形で表されるとき、ユニタリ線型結合 (Linear Combination of Unitaries, LCU) という。

$$H = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \alpha_j U_j, \quad U_j; \text{ unitary.} \quad (1.24)$$

ここで、係数 α_j は正の実数であるとしても一般性を失わない。なぜならば、 α_j が複素数であるとき、対応する (α_j, U_j) の組を $(|\alpha_j|, e^{i \arg(\alpha_j)} U_j)$ と置き換えれば良いからである。

ユニタリ線型結合のハミルトニアンのブロック埋め込みは次のように構成される。まず補助系 a として j_{\max} の自由度をもつ $\{|j\rangle_a\}_{j=1}^{j_{\max}}$ を用意する。補助系に必要な量子ビット数は $a \in \mathcal{O}(\log_2 j_{\max})$ である。このとき、 O_H を次で与える。

$$O_H = (G_a \otimes I_s)^\dagger \left(\sum_{j=1}^{j_{\max}} |j\rangle \langle j|_a \otimes U_j \right) (G_a \otimes I_s). \quad (1.25)$$

ただし、補助系 a のみに作用するユニタリゲート G_a は補助系の基準状態 $|0\rangle_a$ に作用して

$$G_a |0\rangle_a = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \sqrt{\frac{\alpha_j}{\alpha}} |j\rangle_a, \quad \alpha = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \alpha_j \quad (1.26)$$

となるように構成する。このように構成された O_H が実際にハミルトニアン H のブロック埋め込みとなっていることは

$$\langle 0|O_H|0\rangle_a = \sum_{j,j',j''} \sqrt{\frac{\alpha_j}{\alpha}} \sqrt{\frac{\alpha_{j''}}{\alpha}} \langle j|j'\rangle_a \langle j'|j''\rangle_a \otimes U_j = \frac{\sum_j \alpha_j U_j}{\alpha}. \quad (1.27)$$

によって確かめられる。係数 $\alpha = \sum_j \alpha_j$ はベクトル $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_{j_{\max}})$ の L_1 ノルム $\|\vec{\alpha}\|_1$ であり、

$$\|H\| \leq \sum_j \alpha_j \|U_j\| \leq \|\vec{\alpha}\|_1 \quad (1.28)$$

より、Proposition 1 の $\alpha \geq \|H\|$ が満たされていることも確認できる。各ユニタリー U_j が局所的で $\mathcal{O}(1)$ 個の基本ゲートから構成できるとき、 j_{\max} 項からなる LCU のブロック埋め込みは (1.25) 式より $\mathcal{O}(1)$ 個の基本ゲートで実装できる control- U_j ゲートを繰り返し用いて

- 補助量子ビット: $\mathcal{O}(\log j_{\max})$
- 回路深さ: $\mathcal{O}(j_{\max})$

の量子回路で実装可能である (図 1.2)。このようなブロック埋め込みが効率よく実行できるためには、エルミート行列 H が比較的単純なユニタリー U_j の高々 $j_{\max} \in \text{poly}(N)$ 個の線型結合で書ける必要がある。このようなエルミート行列は、物性物理・量子化学で現れるハミルトニアンのモデルをほぼ網羅しており、特に量子多体系計算の文脈で多用される。以下に具体例を挙げる。

量子スピン系.— スピン $S = 1/2$ を持つ N サイトの量子スピン系を考える。典型的なハミルトニアンは、エルミート行列かつユニタリー行列である Pauli 積 P_j を用いて

$$H = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \alpha_j P_j \quad (1.29)$$

と書けるので LCU である。最も単純な例として、周期境界条件の下での 1 次元 Heisenberg 鎖は

$$H = J \sum_{j=1}^N (X_j X_{j+1} + Y_j Y_{j+1} + Z_j Z_{j+1}), \quad J > 0 \quad (1.30)$$

のハミルトニアンで記述される。ただし、 $A_{N+1} = A_1$ ($A = X, Y, Z$) である。このとき、

$$O_H = (G_a \otimes I_s)^\dagger \bar{O}_H (G_a \otimes I_s), \quad G_a |0\rangle_a = \sum_{j=1}^{3N} \sqrt{\frac{1}{3N}} |j\rangle_a, \quad (1.31)$$

$$\bar{O}_H = \sum_{j=1}^N |j\rangle \langle j|_a \otimes X_j X_{j+1} + |j+N\rangle \langle j+N|_a \otimes Y_j Y_{j+1} + |j+2N\rangle \langle j+2N|_a \otimes Z_j Z_{j+1}, \quad (1.32)$$

が、ハミルトニアン H の $(3NJ, \lceil \log_2(3N) \rceil)$ -encoding を与える。ブロック埋め込み O_H の回路深さは $\mathcal{O}(N)$ であり、必要な補助量子ビット数も $\lceil \log_2(3N) \rceil$ であり注目系サイズ N に比べると十分小さいため、効率よく量子回路上で実装できる。

一般的に、物性物理においては 2 体相互作用や 3 体相互作用など $\mathcal{O}(1)$ 体間の相互作用 (局所的な相互作用) しか働かないモデルを対象とする。各相互作用は Pauli 積として書くことができ、 k 体

までの相互作用しか含まないようなスピン模型の項数 j_{\max} は高々 $\mathcal{O}(NC_k) \sim N^k$ である。LCU のブロック埋め込みの構成法により、一般的な物性物理のスピン系においても $\mathcal{O}(j_{\max}) = \mathcal{O}(N^k)$ 深さの量子回路, $\mathcal{O}(\log j_{\max}) = \mathcal{O}(\log N)$ 個の補助量子ビットで O_H を効率よく実装できる。また、物性物理や量子化学ではスピン系の他に fermion の生成消滅演算子 $\hat{c}_j, \hat{c}_j^\dagger$ で記述される電子系のハミルトニアンが興味の対象となる。このような場合においても、Jordan-Wigner 変換などの生成消滅演算子をスピン演算子へ変換する手法を用いることで、ブロック埋め込み O_H を構成することが可能である [BGB⁺18]。

疎行列 (Sparse-access matrix)

疎行列は各行・各列に着目したときに高々 $d \in \mathcal{O}(1)$ 個しかノンゼロの成分を含まないような行列である。このような行列を d -sparse 行列と呼び、具体的には

$$H = \sum_{i=1}^{\dim(\mathcal{H})} \sum_{j \in F_i} h_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (1.33)$$

と書いたとき、

$$|F_i| \leq d, \quad \forall i = 1, 2, \dots, \dim(\mathcal{H}) \quad (1.34)$$

を満たすものとして定義される。 H のエルミート性により、各行で高々 d 個しかノンゼロ成分がないとすると各列についても同様のことが自動的に言える。疎行列は線形方程式問題 (連立方程式の求解) などの線形代数演算や量子ウォーク系などのシミュレーションにおいて重要なクラスである。

疎行列に対するブロック埋め込みを構成しよう。まず、行列係数 h_{ij} を呼び出すオラクル

$$O_h |i\rangle |j\rangle |z\rangle = |i\rangle |j\rangle |z \oplus h_{ij}\rangle \quad (1.35)$$

を用意する。ここで、 h_{ij} は全て b -bit で2進表示されているものとする。次に i 行目において $h_{ij} \neq 0$ となる l 番目の列のインデックス $j = f(i, l)$ (すなわち F_i の l 番目の要素) を呼び出すオラクル

$$O_f |i\rangle |l\rangle |j\rangle = |i\rangle |f(i, l)\rangle \quad (1.36)$$

を定める。このようなオラクルを $\mathcal{O}(1)$ 回ずつ使うと、次のようなユニタリー U_1, U_2 を構成できることが知られる:

$$U_1 = \sum_{i=1}^{\dim(\mathcal{H})} |\psi_i\rangle_{as} (\langle 0|_a \langle i|_s) + \dots, \quad (1.37)$$

$$|\psi_i\rangle_{as} = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{j \in F_i} \left(\sqrt{\frac{h_{ij}}{\|H\|_{\max}}} |0\rangle + \sqrt{1 - \frac{|h_{ij}|}{\|H\|_{\max}}} |0\rangle \right)_{a_1} |0\rangle_{a_2} |j\rangle_{a_3} |i\rangle_s, \quad (1.38)$$

$$U_2 = \sum_{j=1}^{\dim(\mathcal{H})} |\chi_j\rangle_{as} (\langle 0|_a \langle j|_s) + \dots, \quad (1.39)$$

$$|\chi_j\rangle_{as} = \frac{1}{\sqrt{d}} |0\rangle_{a_1} \sum_{i \in F_j} \left(\sqrt{\frac{h_{ij}^*}{\|H\|_{\max}}} |0\rangle + \sqrt{1 - \frac{|h_{ij}|}{\|H\|_{\max}}} |0\rangle \right)_{a_2} |j\rangle_{a_3} |i\rangle_s, \quad (1.40)$$

$$\|H\|_{\max} = \max_{i,j=1,2,\dots,\dim(\mathcal{H})} (|h_{ij}|). \quad (1.41)$$

ただし、補助系 $a = a_1 a_2 a_3$ は a_1 (2 次元), a_2 (2 次元), a_3 ($\dim(\mathcal{H})$ 次元) からなるとする。疎行列 H のブロック埋め込み O_H は as 上のユニタリー演算子

$$O_H = U_2^\dagger U_1 \quad (1.42)$$

によって構成される。実際、補助系の基準状態 $|0\rangle_a$ のブロック対角成分を計算すると、

$$\begin{aligned} \langle 0|O_H|0\rangle_a &= \langle 0|U_2^\dagger U_1|0\rangle_a \\ &= \sum_{i,j} |j\rangle_s \langle \chi_j | \psi_i \rangle_{as} \langle i|_s \\ &= \frac{1}{d\|H\|_{\max}} \sum_{i,j} h_{ji} |j\rangle \langle i| \\ &= \frac{H}{d\|H\|_{\max}} \end{aligned} \quad (1.43)$$

となって、 $(d\|H\|_{\max}, 2 + N)$ -encoding となっている。

ユニタリー U_1, U_2 のオラクルによる構成.— 具体的にオラクル O_h, O_f からユニタリー U_1, U_2 を構成する。補助系 $a_1 a_2 a_3$ の他に、 b 量子ビットの補助系を用意する。ユニタリー演算子 U_1 は $|0\rangle_a |i\rangle_s$ を $|\psi_i\rangle_{as}$ へ変換するものであれば良いので、次のように構成できる。

$$|0\rangle_a |0\rangle_b |i\rangle_s \rightarrow |0\rangle_{a_1} |0\rangle_{a_2} \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{l=1}^d |l\rangle_{a_3} |0\rangle_b |i\rangle_s \quad (1.44)$$

$$\rightarrow |0\rangle_{a_1} |0\rangle_{a_2} \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{l=1}^d |f(i, l)\rangle_{a_3} |0\rangle_b |i\rangle_s \quad (1.45)$$

$$\rightarrow |0\rangle_{a_1} |0\rangle_{a_2} \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{l=1}^d |f(i, l)\rangle_{a_3} |h_{if(i,l)}\rangle_b |i\rangle_s \quad (1.46)$$

$$= |0\rangle_{a_1} |0\rangle_{a_2} \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{j \in F_i} |j\rangle_{a_3} |h_{ij}\rangle_b |i\rangle_s \quad (1.47)$$

$$\rightarrow \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{j \in F_i} \left(\sqrt{\frac{h_{ij}}{\|H\|_{\max}}} |0\rangle + \sqrt{1 - \frac{|h_{ij}|}{\|H\|_{\max}}} |1\rangle \right)_{a_1} |0\rangle_{a_2} |j\rangle_{a_3} |h_{ij}\rangle_b |i\rangle_s \quad (1.48)$$

$$\rightarrow \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{i \in F_j} \left(\sqrt{\frac{h_{ij}}{\|H\|_{\max}}} |0\rangle + \sqrt{1 - \frac{|h_{ij}|}{\|H\|_{\max}}} |1\rangle \right)_{a_1} |0\rangle_{a_2} |j\rangle_{a_3} |0\rangle_b |i\rangle_s \quad (1.49)$$

$$= |\psi_i\rangle_{as} |0\rangle_b \quad (1.50)$$

各行の意味を説明する。第 1 行目は a_3 に作用し、 $l = 1, 2, \dots, d$ の一様重ね合わせ状態を生成する [$\mathcal{O}(\log d)$ ゲート]。第 2 行では s, a_3 にわたってオラクル O_f を作用、第 3・4 行では s, a_3, b にわたってオラクル O_h を作用させる。第 5 行では、補助系 b の値に応じた制御回転ゲートを a_1 に作用させる。具体的には、 b bit 表示された z から

$$\theta_z = \arccos \left(\sqrt{\frac{z}{\|H\|_{\max}}} \right) \quad (1.51)$$

を計算する回路を構成し、

$$|z\rangle_b |0\rangle_{a_3} \rightarrow |z\rangle_b e^{-i\theta_z Y} |0\rangle_{a_3} \quad (1.52)$$

となるように制御回転ゲートを構成すれば良い。 \arccos は古典計算でも効率よく計算できる関数であるので、そのような量子回路も $\text{poly}(b)$ 個の量子ゲートで実装できる。第 6・7 行では、オラクル O_h^\dagger を作用させることで補助量子系 b を基準状態に戻す (uncomputation)。

ユニタリー U_2 も同じようにしてオラクル O_h, O_h から構成できる。最終的にブロック埋め込み $O_H = U_2^\dagger U_1$ はオラクル O_h (またはその共役) を 4 回, O_f を 2 回利用して構成される。

純粋化密度行列 (Purified density matrix)

補助系 a_1 (a_1 量子ビット) と注目系 s (s 量子ビット) 上の純粋状態 $|\Psi\rangle_{a_1 s} = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \sqrt{s_j} |j\rangle_{a_1} |\psi_j\rangle_s$ を使って、

$$\rho = \text{Tr}_{a_1} [|\Psi\rangle\langle\Psi|_{a_1 s}] = \sum_{j=1}^{j_{\max}} s_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|_s, \quad s_j > 0, \quad \sum_{j=1}^{j_{\max}} s_j = 1. \quad (1.53)$$

と表現されるようなエルミート行列 ρ を純粋化密度行列と呼ぶ。言い換えると、純粋状態 $|\Psi\rangle$ は密度行列 ρ の純粋化となっている。

純粋化密度行列 ρ に対するブロック埋め込み O_ρ は、注目系 s と同じ次元を持つ補助系 a_2 を用意して次のように構成される:

$$O_\rho = (G_\rho^\dagger \otimes I_s) I_{a_1} \otimes \left(\sum_{j=1}^{\dim(\mathcal{H})} \sum_{k=1}^{\dim(\mathcal{H})} |\phi_j\rangle_{a_2} |\phi_k\rangle_s \langle\phi_k|_{a_2} \langle\phi_j|_s - I_{a_2+s} \right) (G_\rho \otimes I_s), \quad (1.54)$$

$$G_\rho |0\rangle_{a_1 a_2} = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \sqrt{s_j} |j\rangle_{a_1} |\psi_j\rangle_{a_2} = |\Psi\rangle_{a_1 a_2}, \quad (1.55)$$

ここで、 $\{|\phi_j\rangle\}_{j=1}^{\dim(\mathcal{H})}$ は、注目系 s (または補助系 a_2) の Hilbert 空間 \mathcal{H} の適当な正規直交基底であり、 O_ρ 中の $a_2 s$ に作用する部分は a_2 と s の状態の SWAP 操作である。ユニタリー演算子 O_ρ は $\langle 0|O_\rho|0\rangle_{a_1 a_2} = \rho$ を満たし、純粋化密度行列 ρ の $(1, a_1 + s)$ -encoding をなす。

Proof. — O_ρ の $a_2 s$ に作用する部分が

$$\left(\sum_{j=1}^{\dim(\mathcal{H})} \sum_{k=1}^{\dim(\mathcal{H})} |\phi_j\rangle_{a_2} |\phi_k\rangle_s \langle\phi_k|_{a_2} \langle\phi_j|_s - I_{a_2+s} \right) |\psi\rangle_{a_2} |\psi'\rangle_s = |\psi'\rangle_{a_2} |\psi\rangle_s. \quad (1.56)$$

のように SWAP 操作となっていることを利用する。このとき、

$$\begin{aligned} \langle 0|O_\rho|0\rangle_{a_1 a_2} &= \langle\Psi|_{a_1 a_2} \left(\sum_{j=1}^{\dim(\mathcal{H})} \sum_{k=1}^{\dim(\mathcal{H})} |\phi_j\rangle_{a_2} |\phi_k\rangle_s \langle\phi_k|_{a_2} \langle\phi_j|_s - I_{a_2+s} \right) |\Psi\rangle_{a_1 a_2} \otimes \sum_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k|_s \\ &= \sum_{j,k} (\langle\Psi|_{a_1 a_2} \otimes I_s) \sqrt{s_j} |j\rangle_{a_1} |\phi_k\rangle_{a_2} |\psi_j\rangle_s \langle\phi_k|_s \\ &= \sum_{j=1}^{j_{\max}} s_j |\psi_j\rangle_s \left(\sum_k (\langle\psi_j|\phi_k\rangle) \langle\phi_k|_s \right) \\ &= \sum_{j=1}^{j_{\max}} s_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|_s = H. \quad \square. \end{aligned} \quad (1.57)$$

純粋化密度行列 ρ に対する量子固有値変換/量子特異値変換は、密度状態 ρ で決まる何らかの状態量 (例えば、von Neumann エントロピー $S(\rho)$ など) の計算に利用される。その際に必要となる純粋化密度行列のブロック埋め込みは、対象の密度行列 ρ の純粋化 $|\Psi\rangle$ を用意するユニタリー G_ρ と SWAP ゲートさえ実現できれば良いということがわかる。

1.2.3 ブロック埋め込みの性質

前節では、いくつかハミルトニアン の例についてそのブロック埋め込みを構成したが、ここでは一般にその構成に便利な幾つかの性質を導出する。具体的には、あるハミルトニアン H_1, H_2, \dots についてそのブロック埋め込みが既知であるとき、その和や積に対するブロック埋め込みの構成法を与える。

Theorem 4. (線形和のブロック埋め込み)

ハミルトニアン H_i に対する (α_i, a) -encoding O_{H_i} が既知であるとして、その線形和で与えられるハミルトニアン

$$H = \sum_{i=1}^{i_{\max}} \beta_i H_i, \quad \beta_i > 0 \quad (1.58)$$

を考える。補助系 a に加えて $\{|i\rangle_b\}_{i=1}^{i_{\max}}$ の自由度をもつ補助系 b を用意して

$$O_H = (G_b \otimes I_{a+s})^\dagger \left(\sum_{i=1}^{i_{\max}} |i\rangle_b \langle i|_b \otimes O_{H_i} \right) (G_b \otimes I_{a+s}) \quad (1.59)$$

で O_H を定める。ただし、補助系 b に対するユニタリーゲート G_b は

$$G_b |0\rangle_b = \sum_{i=1}^{i_{\max}} \sqrt{\frac{\alpha_i \beta_i}{\alpha}} |i\rangle_b, \quad \alpha = \sum_{i=1}^{i_{\max}} \alpha_i \beta_i \quad (1.60)$$

となるよう与える。このとき、

$$\langle \langle 0|_b \langle 0|_a \otimes I_s \rangle O_H (|0\rangle_b |0\rangle_a \otimes I_s) \rangle = \frac{H}{\alpha} \quad (1.61)$$

を満たし、 O_H は線形和 H の $(\sum_i \alpha_i \beta_i, a + \lceil \log_2 i_{\max} \rceil)$ -encoding を与える。

Proof. — 具体的に、(1.61) 式の成立を証明する。

$$\begin{aligned} \langle \langle 0|_b \langle 0|_a \otimes I_s \rangle O_H (|0\rangle_b |0\rangle_a \otimes I_s) \rangle &= \sum_{i, i', i''} \sqrt{\frac{\alpha_i \beta_i}{\alpha}} \sqrt{\frac{\alpha_{i'} \beta_{i''}}{\alpha}} \langle i|i'\rangle_b \langle i'|i''\rangle_b \langle 0|O_{H_i}|0\rangle_a \\ &= \sum_i \frac{\alpha_i \beta_i}{\alpha} \cdot \frac{H_i}{\alpha_i} \\ &= \frac{H}{\alpha}. \quad \square \end{aligned} \quad (1.62)$$

この性質により、ブロック埋め込みが既知であるようなハミルトニアン の複合系に対して効率的にブロック埋め込み埋め込みを構成する事が可能である。また、ユニタリー線形結合に対するブロック埋め込みは本定理の特殊な場合と捉えることもできる。各ユニタリー演算子 U_j のブロック埋め込みは係数 $\alpha_j = 1$, 補助量子ビット数 $a = 0$ として U_j そのものである。本定理を適用することで、(1.25) 式のブロック埋め込みを得ることができる。

Theorem 5. (積のブロック埋め込み)

ハミルトニアン H_i に対する (α_i, a_i) -encoding O_{H_i} が与えられているとき、その積 $H_1 H_2$ のブロック埋め込みは

$$O_{H_1 H_2} = (O_{H_1} \otimes I_{a_2})(I_{a_1} \otimes O_{H_2}) \quad (1.63)$$

で与えられ、 $(\alpha_1 \alpha_2, a_1 + a_2)$ -encoding である。

Proof.— 補助量子ビット状態 $|0\rangle_{a_1} \otimes |0\rangle_{a_2}$ を用意すると、

$$\begin{aligned} (\langle 0|_{a_1} \otimes \langle 0|_{a_2}) O_{H_1 H_2} (|0\rangle_{a_1} \otimes |0\rangle_{a_2}) &= \langle 0|_{O_{H_1}} |0\rangle_{a_1} \langle 0|_{O_{H_2}} |0\rangle_{a_2} \\ &= \frac{H_1 H_2}{\alpha_1 \alpha_2}. \quad \square \end{aligned} \quad (1.64)$$

1.3 量子ビット化 (Qubitization)

エルミート行列 H の規格化を行って $\|H\| \leq 1$, $\alpha = 1$ としてその $(1, a)$ -encoding O_H が構成できているとする。前節までの議論で見たように、ブロック埋め込みは最も単純な量子固有値変換 $f(x) = x$ (すなわち、 $|\psi\rangle \rightarrow H|\psi\rangle$) を与える。では、より一般的な関数 $f(x)$ についてはどのように量子固有値変換を実装できるであろうか？ 結論としては、ブロック埋め込み O_H を複数回用いることによって、より複雑な多項式関数 $f(x)$ を実現できる。ここでは、まずそのために必要な“量子ビット化 (Qubitization)”を導入する。

1.3.1 ブロック埋め込みの量子ビット化

ブロック埋め込み O_H は a 量子ビットを持つ補助系と系サイズ N の注目系上で定義される 2^{a+N} 次元の巨大なユニタリー行列である。量子ビット化で試みることは、このブロック埋め込み O_H を有効的な 2×2 のユニタリー行列、すなわち 1 量子ビット系に対するユニタリーゲートとして表現することである。ブロック埋め込みをこのように極端に単純な形で表せば、従来の 1 量子ビット系の操作で知られる理論 (具体的には、量子信号処理) を適用することができ、それによって複雑な多項式関数 $f(H)$ が実現できることを後々見る。

まずエルミート行列 H のブロック埋め込み O_H の H の各固有状態 $|\lambda\rangle$ (固有値 $\lambda \in (-1, 1)$) に対する作用を考える。ブロック埋め込みの定義上 $\lambda = \pm 1$ も許されるが、その場合はのちに議論することにする。(1.18) 式での計算と同じように、射影演算子

$$P_0 = |0\rangle \langle 0|_a \otimes I_s, \quad P_\perp = I - P_0 \quad (1.65)$$

を用いるとブロック埋め込みの定義 (1.15) 式より

$$\begin{aligned} O_H |0\rangle_a |\lambda\rangle &= P_0 O_H |0\rangle_a |\lambda\rangle + P_\perp O_H |0\rangle_a |\lambda\rangle \\ &= |0\rangle_a H |\lambda\rangle + P_\perp |0\rangle_a |\lambda\rangle \\ &= \lambda |0\rangle_a |\lambda\rangle + P_\perp |0\rangle_a |\lambda\rangle \end{aligned} \quad (1.66)$$

のように計算される。右辺第1項と第2項の直交性より右辺第2項のノルムは

$$\begin{aligned} \|P_\perp O_H |0\rangle_a |\lambda\rangle\| &= \sqrt{\|O_H |0\rangle_a |\lambda\rangle\|^2 - \|\lambda |0\rangle_a |\lambda\rangle\|^2} \\ &= \sqrt{1 - \lambda^2} \end{aligned} \quad (1.67)$$

であるので、規格化を行って

$$|\Psi_\lambda^\perp\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - \lambda^2}} P_\perp O_H |0\rangle_a |\lambda\rangle, \quad (\langle 0|_a \langle \lambda| |\Psi_\lambda^\perp\rangle = 0) \quad (1.68)$$

という量子状態で表現しよう。このとき、ブロック埋め込み O_H の作用は

$$O_H |0\rangle_a |\lambda\rangle = \lambda |0\rangle_a |\lambda\rangle + \sqrt{1-\lambda^2} |\Psi_\lambda^\perp\rangle \quad (1.69)$$

というように書き表せる。

ブロック埋め込み O_H が $|0\rangle_a |\lambda\rangle$ に作用したとき、その出力となる量子状態は本来 2^{a+N} 次元の複雑なベクトルであるが、(1.69) 式はそれが $S_\lambda^B = \{|0\rangle_a |\lambda\rangle, |\Psi_\lambda^\perp\rangle\}$ の有効的な 2 次元の正規直交状態で表現でき、なおかつその重みが丁度固有値 λ であることを意味している。表現が単純化されたのは単に出力の複雑な部分を $|\Psi_\lambda^\perp\rangle$ と置いているからで、その中身については分からない。ただ、前者の状態 $|0\rangle_a |\lambda\rangle$ とは

$$P_0 |0\rangle_a |\lambda\rangle = |0\rangle_a |\lambda\rangle, \quad P_\perp |\Psi_\lambda^\perp\rangle = |\Psi_\lambda^\perp\rangle \quad (1.70)$$

と射影演算子によって区別されており、のちに議論するようにこの情報さえあれば十分である。

さて、量子ビット化 (qubitization) の目的はブロック埋め込み O_H を有効的な 2×2 のユニタリー行列として表現することである。ここで出力された 2 次元の正規直交状態 $S_\lambda^B = \{|0\rangle_a |\lambda\rangle, |\Psi_\lambda^\perp\rangle\}$ によって可能に見えるが、 O_H はこの部分空間で閉じている訳ではないことに注意しなければならない。すなわち、一般には

$$O_H |\Psi_\lambda^\perp\rangle \notin \text{span}(S_\lambda^B) \quad (1.71)$$

であるため、 O_H は S_λ^B を基底とする 2×2 行列で表現することができない。これを解決するには、 $O_H |\Phi_\lambda^\perp\rangle \in \text{span}(S_\lambda^B)$ となるような入力に対する新しい正規直交状態 $|\Phi_\lambda^\perp\rangle$ を定めれば良い。具体的には

$$|\Phi_\lambda^\perp\rangle \equiv O_H^\dagger \left(\sqrt{1-\lambda^2} |0\rangle_a |\lambda\rangle - \lambda |\Psi_\lambda^\perp\rangle \right) \quad (1.72)$$

で新しい as 上の量子状態 $|\Phi_\lambda^\perp\rangle$ を定める。これは、 $\langle \Phi_\lambda^\perp | \Phi_\lambda^\perp \rangle = 1$ と規格化され、なおかつ O_H を作用させた時の出力

$$O_H |\Phi_\lambda^\perp\rangle = \sqrt{1-\lambda^2} |0\rangle_a |\lambda\rangle - \lambda |\Psi_\lambda^\perp\rangle \in \text{span}(S_\lambda^B) \quad (1.73)$$

が (1.69) 式と直交するように逆算して定められている。実際、この直交性により

$$\begin{aligned} \langle \langle 0|_a \langle \lambda| | \Phi_\lambda^\perp \rangle &= \langle \langle 0|_a \langle \lambda| O_H^\dagger \left(\sqrt{1-\lambda^2} |0\rangle_a |\lambda\rangle - \lambda |\Psi_\lambda^\perp\rangle \right) \\ &= \left(\lambda \langle 0|_a \langle \lambda| + \sqrt{1-\lambda^2} \langle \Psi_\lambda^\perp| \right) \left(\sqrt{1-\lambda^2} |0\rangle_a |\lambda\rangle - \lambda |\Psi_\lambda^\perp\rangle \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (1.74)$$

であるから、 $S_\lambda^A = \{|0\rangle_a |\lambda\rangle, |\Psi_\lambda^\perp\rangle\}$ も正規直交系を成す。また (1.70) 式と同様に、この 2 状態についても射影演算子 P_0, P_\perp を用いて

$$P_0 |0\rangle_a |\lambda\rangle = |0\rangle_a |\lambda\rangle, \quad P_\perp |\Phi_\lambda^\perp\rangle = |\Phi_\lambda^\perp\rangle \quad (1.75)$$

で区別されることからこの直交性は確かめられる。後者は、 $\lambda \neq \pm 1$ において

$$\begin{aligned} P_0 |\Phi_\lambda^\perp\rangle &= P_0 O_H^\dagger \left(\sqrt{1-\lambda^2} |0\rangle_a |\lambda\rangle - \lambda |\Psi_\lambda^\perp\rangle \right) \\ &= P_0 O_H^\dagger \left(\sqrt{1-\lambda^2} |0\rangle_a |\lambda\rangle - \frac{\lambda}{\sqrt{1-\lambda^2}} (O_H - \lambda) |0\rangle_a |\lambda\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-\lambda^2}} P_0 O_H^\dagger (|0\rangle_a |\lambda\rangle - \lambda O_H |0\rangle_a |\lambda\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-\lambda^2}} |0\rangle_a (H - \lambda) |\lambda\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (1.76)$$

に由来する (ただし、 $\langle 0|O_H^\dagger|0\rangle_a = H^\dagger = H$ を用いた)。

(1.69) 式、(1.73) 式をまとめると、

$$O_H \begin{pmatrix} |0\rangle_a |\lambda\rangle \\ |\Phi_\lambda^\perp\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & \sqrt{1-\lambda^2} \\ \sqrt{1-\lambda^2} & -\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |0\rangle_a |\lambda\rangle \\ |\Psi_\lambda^\perp\rangle \end{pmatrix} \quad (1.77)$$

となることから、入力基底を S_λ^A 、出力基底を S_λ^B として

$$O_H \sim \begin{pmatrix} \lambda & \sqrt{1-\lambda^2} \\ \sqrt{1-\lambda^2} & -\lambda \end{pmatrix}_{A \rightarrow B} \quad (1.78)$$

というように、 2×2 の行列として有効的に表すことができる。添字 $A \rightarrow B$ は基底が S_λ^A から S_λ^B へと変更されていることを意味する。今、 $\lambda \in (-1, 1)$ より $\theta_\lambda = \arccos(\lambda)$ とおくと、Pauli 行列 X, Y, Z を用いて

$$O_H \sim (\cos \theta_\lambda Z + \sin \theta_\lambda X)_{A \rightarrow B} = (Z e^{i\theta_\lambda Y})_{A \rightarrow B} \quad (1.79)$$

とも表せ、これは 1 量子ビット上でのユニタリー演算子である。このように、元は指数的に大きなサイズのブロック埋め込み O_H を適切に入出力の 2 次元基底を定め 1 量子ビット上のユニタリーとして表現することを量子ビット化 (qubitization) と呼ぶ。

量子ビット化の注意点をいくつか述べておく。まず、上記までの定式化では固有値 $\lambda \in [-1, 1]$ に対して $\lambda = \pm 1$ を除いていたが、(1.78) 式の行列表示は $\lambda = \pm 1$ でも有効である。 $\lambda = \pm 1$ においては $|\Psi_\lambda^\perp\rangle, |\Phi_\lambda^\perp\rangle$ は未定義であるものの、(1.78) 式の非対角成分はゼロであるため $|0\rangle_a |\lambda\rangle$ を入力としたとき $|\Psi_\lambda^\perp\rangle$ は現れない。よって、 $|\Psi_\lambda^\perp\rangle$ は (1.70) 式のように $P_\perp |\Psi_\lambda^\perp\rangle = |\Psi_\lambda^\perp\rangle$ を満たし $|0\rangle_a |\lambda\rangle$ と直交するような状態を適当に選べば良い。もう一つの直交状態 $|\Phi_\lambda^\perp\rangle$ は、(1.78) 式の行列表示と辻褃が合うように $|\Phi_\lambda^\perp\rangle = -\lambda^{-1} |\Psi_\lambda^\perp\rangle$ と定めておけば良い。もう一つの注意点は、ブロック埋め込みの共役 O_H^\dagger の作用である。(1.69), (1.73) 式の両辺に O_H^\dagger を作用させることで、 O_H^\dagger は

$$O_H^\dagger \sim \begin{pmatrix} \lambda & \sqrt{1-\lambda^2} \\ \sqrt{1-\lambda^2} & -\lambda \end{pmatrix}_{B \rightarrow A} = (Z e^{i\theta_\lambda Y})_{B \rightarrow A} \quad (1.80)$$

と行列表示できることがわかる。すなわち、 O_H^\dagger もブロック埋め込みと同様に量子ビット化でき一方で、その基底変換が元々とは逆に $S_\lambda^B \rightarrow S_\lambda^A$ となっている。ブロック埋め込みのユニタリー性はこの行列表示からも確かめることができ、

$$\begin{aligned} O_H^\dagger O_H &\sim (Z e^{i\theta_\lambda Y})_{B \rightarrow A} (Z e^{i\theta_\lambda Y})_{A \rightarrow B} \\ &= (Z e^{i\theta_\lambda Y} Z e^{i\theta_\lambda Y})_{A \rightarrow A} \\ &= I_{A \rightarrow A} \end{aligned} \quad (1.81)$$

である。

量子ビット化の手続きによって、ブロック埋め込み O_H とその共役 O_H^\dagger は有効的に固有値 λ に応じた回転角 θ_λ の Y 回転と位相反転 Z の合成 $Z e^{i\theta_\lambda Y}$ というように解釈できる。量子固有値変換ではブロック埋め込みとその共役を繰り返し利用するが、それを 1 量子ビット上の回転の合成という解析可能な形を与えるものとなっている。

1.3.2 量子ビット空間の位相回転

ブロック埋め込み O_H は、 $f(x) = x$ という最も単純な量子固有値変換を与えるとともに、適切な 2 次元正規直交基底の元で 1 量子ビット系での “ y 軸回転と位相反転” を与えることを見た。ここでは、量子固有値変換で必要なもう一つの要素である有効 1 量子ビット上の “ z 軸回転” を与える。

まず、補助系 a のみに非自明に作用するユニタリーゲートとして、

$$U_\phi = e^{i\phi(2|0\rangle\langle 0|_a - I_a)} \otimes I_s = e^{i\phi} P_0 + e^{-i\phi} (I - P_0), \quad \phi \in \mathbb{R} \quad (1.82)$$

を考えよう。このようなゲートは、追加の補助量子ビットを一つ (a' でラベルする) だけ用意して、

$$C_{\Pi} \text{NOT} = (|0\rangle\langle 0|_a \otimes X_{a'} + (I_a - |0\rangle\langle 0|_a) \otimes I_{a'}) \quad (1.83)$$

という、 $\mathcal{O}(\log a)$ ゲートで実装できる制御ゲートを用いると実現できる。実際、補助系 a の任意状態 $|\varphi\rangle_a$ に対して

$$\begin{aligned} C_{\Pi} \text{NOT}(e^{-i\phi Z_{a'}} \otimes I_a) C_{\Pi} \text{NOT} |\varphi\rangle_a |0\rangle_{a'} &= \{e^{i\phi} |0\rangle_a \langle 0|\varphi\rangle_a + e^{-i\phi} (I - |0\rangle\langle 0|_a) |\varphi\rangle_a\} |0\rangle_{a'} \\ &= (U_\phi |\varphi\rangle_a) |0\rangle_{a'} \end{aligned} \quad (1.84)$$

となる。また、ここで現れる $\phi \in \mathbb{R}$ は新たに導入した補助 1 量子ビット上の Pauli Z 回転の回転角であるので制御可能なパラメータである。

このように構成したユニタリーゲート U_ϕ が入出力の 2 次元正規直交系 S_λ^A と S_λ^B で z 軸回転を与える。まず、 S_λ^A の直交基底に関して、射影 P_0, P_\perp に対する作用 (1.75) 式から

$$\begin{aligned} U_\phi |0\rangle_a |\lambda\rangle &= e^{i\phi} P_0 |0\rangle_a |\lambda\rangle \\ &= e^{i\phi} |0\rangle_a |\lambda\rangle \end{aligned} \quad (1.85)$$

$$\begin{aligned} U_\phi |\Phi_\lambda^\perp\rangle &= e^{-i\phi} (1 - P_0) |\Phi_\lambda^\perp\rangle \\ &= e^{-i\phi} |\Phi_\lambda^\perp\rangle \end{aligned} \quad (1.86)$$

と計算される。有効的な 2×2 行列で表示すると

$$U_\phi \sim \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix}_{A \rightarrow A} = (e^{i\phi Z})_{A \rightarrow A} \quad (1.87)$$

と表せる。ユニタリーゲート U_ϕ も有効 1 量子ビット系の操作として解釈できる一方で、ブロック埋め込み O_H の量子ビット化と異なり入出力の前後でも基底は S_λ^A で保たれていることに注意する。同じように、直交基底 S_λ^B に対しても全く同様の関係式 (1.70) から

$$U_\phi \sim \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix}_{B \rightarrow B} = (e^{i\phi Z})_{B \rightarrow B} \quad (1.88)$$

とも表せる。確かに、入出力時の基底の選択によらず、 U_ϕ によって有効 1 量子ビット系における z 軸周りの回転を生成できている。

1.4 量子固有値変換

量子固有値変換 $|\psi\rangle \rightarrow f(H) |\psi\rangle$ は、ブロック埋め込み O_H とその共役 O_H^\dagger 、および補助量子ビット上の回転 U_ϕ の合成によって実行される。先の量子ビット化の手続きから、それらのユニタリー

ゲートは1量子ビット上の回転として解釈できるため、量子固有値変換は1量子ビット上の回転の合成と捉えることもできる。ここでは、簡単な回転の合成の例を見てから、その一般論(量子信号処理, quantum signal processing)を議論する。

1.4.1 量子ビット空間での回転の合成

ブロック埋め込み O_H や補助量子ビット系の回転 U_ϕ は有効的に1量子ビット上の操作として捉えられることをみだが、その合成も考えることができる。例えば、積 $U_\phi O_H$ を $|0\rangle_a |\lambda\rangle$ に作用させると

$$\begin{aligned} U_\phi O_H |0\rangle_a |\lambda\rangle &= U_\phi \left(\lambda |0\rangle_a |\lambda\rangle + \sqrt{1-\lambda^2} |\Psi_\lambda^\perp\rangle \right) \\ &= e^{i\phi} \lambda |0\rangle_a |\lambda\rangle + e^{-i\phi} \sqrt{1-\lambda^2} |\Psi_\lambda^\perp\rangle \end{aligned} \quad (1.89)$$

となる。同様にして、

$$U_\phi O_H |\Phi_\lambda^\perp\rangle = e^{i\phi} \sqrt{1-\lambda^2} |0\rangle_a |\lambda\rangle - e^{-i\phi} \lambda |\Psi_\lambda^\perp\rangle \quad (1.90)$$

である。これは、 $U_\phi O_H$ が入力側の基底 $S_\lambda^A = \{|0\rangle_a |\Phi_\lambda^\perp\rangle\}$ 、出力側の基底 $S_\lambda^B = \{|0\rangle_a |\Psi_\lambda^\perp\rangle\}$ に対して、

$$U_\phi O_H \sim \begin{pmatrix} e^{i\phi} \lambda & e^{i\phi} \sqrt{1-\lambda^2} \\ e^{-i\phi} \sqrt{1-\lambda^2} & -e^{-i\phi} \lambda \end{pmatrix}_{A \rightarrow B} = (e^{i\phi Z} \cdot Z e^{i\theta \lambda Y})_{A \rightarrow B} \quad (1.91)$$

と書ける。 U_ϕ, O_H は有効的な1量子ビット空間で各 $(e^{i\phi Z})_{B \rightarrow B}, (Z e^{i\theta \lambda Y})_{A \rightarrow B}$ と行列表示できることから、これは積 $U_\phi O_H$ を表す行列は構成要素の行列表示を計算すればよいということを意味している。ただし、このように単純な行列計算に帰着する際には入出力の基底が一致しているかどうか注意到する。 $U_\phi O_H$ を通じて基底が $A \rightarrow B$ に変換されていることから、ここから更に回転を合成するには $B \rightarrow A$ に変換する O_H^\dagger を用いる。この時は、

$$\begin{aligned} O_H^\dagger U_\phi O_H &\sim (Z e^{i\theta \lambda Y})_{B \rightarrow A} (e^{i\phi Z})_{B \rightarrow B} (Z e^{i\theta \lambda Y})_{A \rightarrow B} \\ &= (Z e^{i\theta \lambda Y} e^{i\phi Z} Z e^{i\theta \lambda Y})_{A \rightarrow A} \\ &= \begin{pmatrix} 2i(\sin \phi) \lambda^2 + e^{-i\phi} & 2i(\sin \phi) \lambda \sqrt{1-\lambda^2} \\ 2i(\sin \phi) \lambda \sqrt{1-\lambda^2} & -2i(\sin \phi) \lambda^2 + e^{i\phi} \end{pmatrix}_{A \rightarrow A} \end{aligned} \quad (1.92)$$

と計算される。 O_H, O_H^\dagger, U_ϕ は補助系を合わせた巨大な Hilbert 空間上のユニタリー操作であるが、その積は有効1量子ビット空間上の回転(SU(2)回転)の合成とみなして簡単に計算ができる。それらの実際の作用は基底の変換が $A \rightarrow A$ となっていることから、

$$O_H^\dagger U_\phi O_H |0\rangle_a |\lambda\rangle = \{2i(\sin \phi) \lambda^2 + e^{-i\phi}\} |0\rangle_a |\lambda\rangle + \{2i(\sin \phi) \lambda \sqrt{1-\lambda^2}\} |\Phi_\lambda^\perp\rangle, \quad (1.93)$$

$$O_H^\dagger U_\phi O_H |\Phi_\lambda^\perp\rangle = \{2i(\sin \phi) \lambda \sqrt{1-\lambda^2}\} |0\rangle_a |\lambda\rangle + \{-2i(\sin \phi) \lambda^2 + e^{-i\phi}\} |\Phi_\lambda^\perp\rangle \quad (1.94)$$

である。

さて、上記のような有効1量子ビット上の回転の合成が非自明な量子固有値変換を与えていることを見る。注目系の任意の状態 $|\psi\rangle = \sum_\lambda c_\lambda |\lambda\rangle$ に対して、 $O_H^\dagger U_\phi O_H$ の作用は線形性から

$$\begin{aligned} O_H^\dagger U_\phi O_H |0\rangle_a |\psi\rangle &= |0\rangle_a \sum_\lambda \{2i(\sin \phi) \lambda^2 + e^{-i\phi}\} c_\lambda |\lambda\rangle + |\Phi^\perp(\psi)\rangle \\ &= |0\rangle_a \{2i(\sin \phi) H^2 + e^{-i\phi}\} |\psi\rangle + |\Phi^\perp(\psi)\rangle, \end{aligned} \quad (1.95)$$

$$|\Phi^\perp(\psi)\rangle = \sum_\lambda \{2i(\sin \phi) \lambda \sqrt{1-\lambda^2}\} c_\lambda |\Phi_\lambda^\perp\rangle \quad (1.96)$$

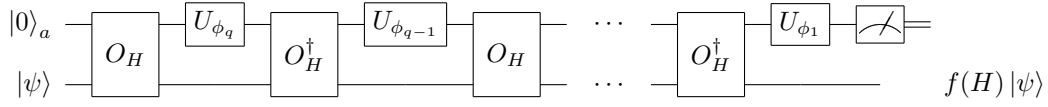


図 1.3: 量子固有値変換の量子回路

と書ける。ここで、新たに定義した状態 $|\Phi^\perp(\psi)\rangle$ は (1.75) 式により $(|0\rangle\langle 0|_a \otimes I)|\Phi^\perp(\psi)\rangle = 0$ を満たし、第 1 項とは直交している。そこで、得られた合成系に対して補助量子系のみを $\{P_0, P_\perp\}$ の組で射影測定し、 $|0\rangle_a$ が測定される事象を事後選択する。そのような事後選択が成功する確率は

$$\left\| P_0 O_H^\dagger U_\phi O_H |0\rangle_a |\psi\rangle \right\|^2 = \left\| \{2i(\sin \phi)H^2 + e^{-i\phi}\} |\psi\rangle \right\|^2 \quad (1.97)$$

であり、事後選択後の状態は

$$\frac{P_0 O_H^\dagger U_\phi O_H |0\rangle_a |\psi\rangle}{\left\| P_0 O_H^\dagger U_\phi O_H |0\rangle_a |\psi\rangle \right\|} = |0\rangle_a \otimes \frac{\{2i(\sin \phi)H^2 + e^{-i\phi}\} |\psi\rangle}{\left\| \{2i(\sin \phi)H^2 + e^{-i\phi}\} |\psi\rangle \right\|} \quad (1.98)$$

である。したがって、回転の合成 $O_H^\dagger U_\phi O_H$ によって $|\psi\rangle \rightarrow \{2i(\sin \phi)H^2 + e^{-i\phi}\} |\psi\rangle$ とする量子固有値変換が行えるということが結論づけられる。ここで現れた 2 次多項式 $f(x) = 2i(\sin \phi)x^2 + e^{-i\phi}$ は (1.92) 式に現れる行列成分に由来しており、また制御可能なパラメータ ϕ によってある程度様々な形を取ることができる。

上記の例から、より一般の関数 $f(x)$ に対する量子固有値変換の構成は、ブロック埋め込み O_H , O_H^\dagger と制御可能パラメータを持つ補助系の回転 U_ϕ の積を用いることのできる。そして、その問題は有効 1 量子ビット上の 2×2 行列で表される回転の合成がその行列要素に目的の関数 $f(x)$ をと持つかどうかという極めて単純な問題に帰着される (元々の Hilbert 空間が系サイズについて指数的に大きいにもかかわらず!)。

1.4.2 量子固有値変換と量子信号処理

前節で見たように、ブロック埋め込み O_H , O_H^\dagger と補助系のユニタリゲート U_ϕ による有効 1 量子ビット上の回転の合成によって H の 2 次式の量子固有値変換を実行できる。一般の量子固有値変換 $|\psi\rangle \rightarrow f(H)|\psi\rangle$ は、これらの回転の合成の一般化によって行われる。量子固有値変換を行う演算子を次のように定義する。

Definition 6. (量子固有値変換における量子信号処理演算子)

制御可能パラメータ $\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}^q$ に対して、 q 次の量子固有値変換演算子を、

$$\text{QET}[\vec{\phi}_q] = \begin{cases} U_{\phi_1} O_H \prod_{i=1}^{(q-1)/2} [U_{\phi_{2i}} O_H^\dagger U_{\phi_{2i}} O_H] & \text{if } q; \text{ 奇数,} \\ \prod_{i=1}^{q/2} [U_{\phi_{2i+1}} O_H^\dagger U_{\phi_{2i}} O_H] & \text{if } q; \text{ 偶数} \end{cases} \quad (1.99)$$

で定義する。

上記の定義を量子回路で図示すると図 1.3 のようになる。量子固有値変換 $\text{QET}[\vec{\phi}_q]$ がどのような作用を持つか考えよう。まず次数 q が奇数の時に着目する。2 次元基底 $S_\lambda^A = \{|0\rangle_a, |\Phi_\lambda^\perp\rangle\}$, $S_\lambda^B =$

$\{|0\rangle_a |\Psi_\lambda^\perp\rangle\}$ を用いた行列表示を用いると、

$$\begin{aligned} \text{QET}[\vec{\phi}_q] &\sim (e^{i\phi_1 Z})_{B \rightarrow B} (Ze^{i\theta_\lambda Y})_{A \rightarrow B} \prod_{i=1}^{(q-1)/2} \{e^{i\phi_{2i} Z} Ze^{i\theta_\lambda Y} e^{i\phi_{2i+1} Z} Ze^{i\theta_\lambda Y}\}_{A \rightarrow A} \\ &= \left\{ \prod_{i=1}^q (e^{i\phi_i Z} Ze^{i\theta_\lambda Y}) \right\}_{A \rightarrow B} \end{aligned} \quad (1.100)$$

となる。ここで、変数 $x = \cos \theta_x$ に対して 2×2 行列

$$S[\vec{\phi}_q](x) \equiv \prod_{i=1}^q (e^{i\phi_i Z} Ze^{i\theta_x Y}) = \begin{pmatrix} S_{11}[\vec{\phi}_q](x) & S_{12}[\vec{\phi}_q](x) \\ S_{21}[\vec{\phi}_q](x) & S_{22}[\vec{\phi}_q](x) \end{pmatrix} \quad (1.101)$$

を定めると、

$$\text{QET}[\vec{\phi}_q] |0\rangle_a |\lambda\rangle = S_{11}[\vec{\phi}_q](\lambda) |0\rangle_a |\lambda\rangle + S_{21}[\vec{\phi}_q](\lambda) |\Psi_\lambda^\perp\rangle \quad (1.102)$$

である。一般の状態 $|\psi\rangle = \sum_\lambda c_\lambda |\psi\rangle$ に対しては

$$\text{QET}[\vec{\phi}_q] |0\rangle_a |\psi\rangle = |0\rangle_a S_{11}[\vec{\phi}_q](H) |\psi\rangle + \sum_\lambda c_\lambda S_{21}[\vec{\phi}_q](\lambda) |\Psi_\lambda^\perp\rangle \quad (1.103)$$

となる。従って、射影測定の組 $\{P_0, P_\perp\}$ で補助系を測定して $|0\rangle_a$ に見出した場合を事後選択すれば、

$$|0\rangle_a \otimes \frac{S_{11}[\vec{\phi}_q](H) |\psi\rangle}{\|S_{11}[\vec{\phi}_q](H) |\psi\rangle\|} \quad (1.104)$$

という状態を用意できる。これは、関数 $S_{11}[\vec{\phi}_q](x)$ による量子固有値変換 $|\psi\rangle \rightarrow S_{11}[\vec{\phi}_q](H) |\psi\rangle$ に他ならない。この操作の成功確率は $p_0 = \|S_{11}[\vec{\phi}_q](H) |\psi\rangle\|^2$ である。次数 q が偶数の場合は、出力される基底が異なり (1.103) 式中の $|\Psi_\lambda^\perp\rangle$ が $|\Phi_\lambda^\perp\rangle$ へと置換されるのみで同様の手順で量子固有値変換 $|\psi\rangle \rightarrow S_{11}[\vec{\phi}_q](H) |\psi\rangle$ が実行される。

以上から、一連のブロック埋め込み O_H, O_H^\dagger と補助系のユニタリゲート U_ϕ によって、関数 $S_{11}[\vec{\phi}_q](x)$ の量子固有値変換を与えることができる。ここで、ブロック埋め込みの利用回数である次数 $q \in \mathbb{N}$ と補助系上の 1 量子ビットゲートの回転角からなるパラメータセット $\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}^q$ は制御可能であり、それに応じて様々な関数 $S_{11}[\vec{\phi}_q](x)$ を実現できる。

例: Chebyshev 多項式

Definition 6 で定義される量子固有値変換により実現できる関数 $S_{11}[\vec{\phi}_q](x)$ について、簡単な例から考える。パラメータセット $\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}$ として、

$$\phi_i = \begin{cases} (q-1)\frac{\pi}{2} & (i=1) \\ -\frac{\pi}{2} & (i=2, 3, \dots, q) \end{cases} \quad (1.105)$$

を選ぶ。このとき (1.99) 式の行列成分は

$$\begin{aligned} S[\vec{\phi}_q](x) &= e^{i(q-1)(\pi/2)Z} Ze^{i\theta_x Y} \left(e^{-i(\pi/2)Z} Ze^{i\theta_x Y} \right)^{q-1} \\ &= e^{i(q-1)(\pi/2)(Z-I)} Ze^{iq\theta_x Y} \\ &= \begin{pmatrix} T_q(x) & U_{q-1}(x)\sqrt{1-x^2} \\ (-1)^{q-1}U_{q-1}(x)\sqrt{1-x^2} & (-1)^q T_q(x) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.106)$$

となる。ここで、次のように第 1 種, 第 2 種 Chebyshev 多項式と呼ばれる q 次多項式 $T_q(x)$, $U_q(x)$ を利用した:

$$T_q(x) = \cos q\theta_x = \cos(q \arccos(x)), \quad (1.107)$$

$$U_q(x) = \frac{\sin(q+1)\theta_x}{\sin \theta_x} = \frac{\sin((q+1) \arccos x)}{\sin(\arccos x)}. \quad (1.108)$$

故に、 $S_{11}[\vec{\phi}_q](x) = T_q(x)$ であり、このようなパラメータセットで一連の Chebyshev 多項式による量子固有値変換

$$|\psi\rangle \rightarrow T_q(H) |\psi\rangle \quad (1.109)$$

が実装できる。Chebyshev 多項式は低次から

$$T_1(x) = x, \quad T_2(x) = 2x^2 - 1, \quad T_3(x) = 4x^3 - 3x, \dots \quad (1.110)$$

で与えられ、このような量子固有値変換は Grover 探索アルゴリズム, 量子振幅増幅アルゴリズムで利用される [Gro97]。

量子信号処理

量子固有値変換 QET $[\vec{\phi}_q]$ で実行可能な関数の具体例として Chebyshev 多項式を与えたが、パラメータセット $\vec{\phi}_q$ と次数 q を制御することで他にも様々な関数を実現できる。どのような関数が可能かは、(1.101) 式で与えられる 2×2 行列の積

$$S[\vec{\phi}_q](x) \equiv \prod_{i=1}^q (e^{i\phi_i Z} Z e^{i\theta_x Y}) = \begin{pmatrix} S_{11}[\vec{\phi}_q](x) & S_{12}[\vec{\phi}_q](x) \\ S_{21}[\vec{\phi}_q](x) & S_{22}[\vec{\phi}_q](x) \end{pmatrix} \quad (1.111)$$

の成分 $S_{11}[\vec{\phi}_q](x)$ で完全に特徴づけられる。このような問題は量子信号処理 (Quantum Signal Processing, QSP) と呼ばれ、元々は核磁気共鳴 (Nuclear Magnetic Resonance, NMR) において、未知の信号 x に対して制御可能な $\vec{\phi}_q$ の大きさをもつパルス列を印加することで信号の形状を望ましい関数 $S_{11}[\vec{\phi}_q](x)$ へ変換するために用いられていた [Wim94, VC05]。量子信号処理で実現可能な関数に関しては以下の事実が知られる。

Theorem 7. (量子信号処理で実現可能な関数)

(1.101) 式で定められる量子信号処理の演算子 $S[\vec{\phi}_q](x)$ について、関数 $S_{11}[\vec{\phi}_q](x) = f(x)$ となるパラメータセット $\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}^q$ が存在するための必要十分条件は

<7-a> $f(x)$ は次数 q 以下の x の複素多項式関数で $f(x) = \sum_{k=0}^q c_k x^k$ ($c_k \in \mathbb{C}$) と書ける

<7-b> $f(-x) = (-1)^q f(x)$, $\forall x$

<7-c> $|f(x)| \leq 1$ ($\forall x \in [-1, 1]$) かつ $|f(x)| \geq 1$ ($\forall x \in \mathbb{R} \setminus [-1, 1]$)

<7-d> [q が偶数の時のみ] $f^*(x) = \sum_{k=1}^q c_k^* x^k$ と定めるとき、 $f(ix)f^*(ix) \geq 1$ ($\forall x \in \mathbb{R}$)

の全てを満たすことである。

証明は 1.6 節で行う (Theorem 21 を参照)。また、<7-a>-<7-d> を全て満たす $f(x)$ に対してそれが 11 成分となるようなパラメータセット $\vec{\phi}_q$ を決定することも実際にアルゴリズムを実行する上で重要な問題である。このパラメータ決定は q 次方程式の求解に帰着され poly(q) 時間の古典計算で実行

できることが知られる。詳細は 1.6 節に譲って、ここではその帰結を用いて量子固有値変換を議論しよう。前節までの議論から、量子固有値変換で実現可能な多項式について直ちに次のことが言える。

Proposition 8. (量子固有値変換で可能な関数)

Definition 6 で定まる $\text{QET}[\vec{\phi}_q]$ による量子固有値変換 $|\psi\rangle \rightarrow f(H)|\psi\rangle$ において、実現可能な関数 $f(x)$ の必要十分条件は Theorem 7 中の条件 (7-a)-(7-d) を満たすことである。

同時に、関数 $f(x)$ の量子固有値変換が実装できるとき、その計算コストは以下ようになる。

- クエリ複雑性 (query complexity)
ハミルトニアン H を呼び出すブロック埋め込み O_H またはその共役 O_H^\dagger を何回利用するか、という量である。全体の回路深さに比例しており計算時間の指標を与える。多項式関数 $f(x)$ の次数が q のとき、条件 (7-a) から量子固有値変換の次数も q である。すなわち、 O_H または O_H^\dagger を合計 q 回利用するのでクエリ複雑性は多項式の次数 q に一致する。
- 補助量子ビット数
ブロック埋め込み O_H に必要な a である。
- 成功確率
補助系を射影測定して $|0\rangle_a$ に見出した場合を事後選択する。その成功確率は

$$p_0 = \left\| P_0 \text{QET}[\vec{\phi}_q] |0\rangle_a |\psi\rangle \right\|^2 = \|f(H)|\psi\rangle\|^2 \quad (1.112)$$

である。なお、振幅増幅アルゴリズム (amplitude amplification) を用いることで回路深さを $\mathcal{O}(1/\sqrt{p_0})$ 倍にする代わりに成功確率を限りなく 1 に近づけることもできる。

ここでクエリ複雑性は、行列 H の内部構造を考えずそれを呼び出すブロック埋め込み O_H, O_H^\dagger のみを与えられた時にその計算を行う (black-box simulation という) ための計算量を測る尺度であり、実際の量子ゲートの複雑性とは異なることに注意する。確率 p_0 で操作が成功することを考えると、実際の量子固有値変換に必要な量子ゲート数の期待値は

$$\frac{1}{p_0} \times q(n_{O_H} + \mathcal{O}(a)) \quad (1.113)$$

である。 n_{O_H} はブロック埋め込み O_H の構成に必要なゲート数 (1.2.2 節参照) であり、括弧内の第 2 項 $\mathcal{O}(a)$ は (1.82) 式中の補助系上のユニタリゲート U_ϕ に必要なゲート数を意味する。

1.4.3 一般の多項式関数の量子固有値変換

Definition 6 による量子固有値変換によって実装可能な関数を量子信号処理から特徴付けたが、Theorem 7 の条件 (7-a)-(7-d) を満たす多項式関数 $f(x)$ は限られている。例えば、条件 (7-c) より $f(\pm 1) = \pm 1$ が言えるため、そうでない関数は直ちに実装できない。ここでは、より広いクラスの関数を実装するための量子固有値変換を議論する。

パリティを持つ実多項式関数

Theorem 7 の条件 (7-a)-(7-d) を満たす複素多項式関数 $f(x)$ の量子固有値変換が $\text{QET}[\vec{\phi}_q]$ によって実現されるとする。このとき、その共役 $f^*(x)$ もまた条件 (7-a)-(7-d) を満たすため、別の $\text{QET}[\vec{\phi}'_q]$ によって実現が可能である。具体的には、量子信号処理の演算子 $S[\vec{\phi}_q]^\dagger$ が 11 成分に $S_{11}[\vec{\phi}_q]^*(x)$ を持つため、

$$\vec{\phi}'_q = (-\phi_q, -\phi_{q-1}, \dots, -\phi_1) \quad (1.114)$$

と選ばば良い。このとき、ユニタリ線型結合法と同様の方法で実多項式関数 $\text{Re}[f](x) = (f(x) + f^*(x))/2$ を実装できる。補助量子ビットを新たに一つ導入して、ユニタリーゲート

$$O_{\text{Re}[f](H)} = (\text{Had} \otimes I) \left(|0\rangle\langle 0| \otimes \text{QET}[\vec{\phi}_q] + |1\rangle\langle 1| \otimes \text{QET}[\vec{\phi}'_q] \right) (\text{Had} \otimes I) \quad (1.115)$$

を定める。Had は Hadamard ゲートである。これを $|0\rangle|0\rangle_a |\psi\rangle$ に作用させたのち、追加の 1 量子ビットも含めて補助系を射影測定し $|0\rangle|0\rangle_a$ の状態を事後選択すると、

$$\begin{aligned} \langle 0| \langle 0|_a O_{\text{Re}[f](H)} |0\rangle|0\rangle_a |\psi\rangle &= \frac{1}{2} (\langle 0| + \langle 1|) \langle 0|_a O_{\text{Re}[f](H)} (|0\rangle + |1\rangle) |0\rangle_a |\psi\rangle \\ &= \frac{\langle 0| \text{QET}[\vec{\phi}_q] |0\rangle_a + \langle 0| \text{QET}[\vec{\phi}'_q] |0\rangle_a}{2} |\psi\rangle \\ &= \text{Re}[f](H) |\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.116)$$

に比例する状態が得られる。よって、ユニタリーゲート $O_{\text{Re}[f](H)}$ は $|\psi\rangle \rightarrow \text{Re}[f](H) |\psi\rangle$ という新たな量子固有値変換を与える。ここで、 $O_{\text{Re}[f](H)}$ という記法を用いたのは、 $\langle 0| \langle 0|_a O_{\text{Re}[f](H)} |0\rangle|0\rangle_a = \text{Re}[f](H)$ を満たすブロック埋め込みを与えているためである。

さて、以上から実多項式関数 $f_{\text{R}}(x)$ の量子固有値変換が (1.115) 式によって実現可能かどうかは、 $\text{Re}[f](x) = f_{\text{R}}(x)$ となり量子固有値変換を実装できる複素多項式関数 $f(x)$ が存在するかどうかで決まる。そのための必要十分条件も量子信号処理から以下の事実が知られる (導出は 1.6 節を参照)。

Theorem 9. (実多項式関数の量子信号処理)

実多項式関数 $f_{\text{R}}(x)$ に対して、 $\text{Re}[f](x) = f_{\text{R}}(x)$ となる Theorem 7 の条件 (7-a)-(7-d) を全て満たす複素多項式関数 $f(x)$ が存在するための必要十分条件は、

(9-a) $f_{\text{R}}(x)$ の次数が q 以下

(9-b) $f_{\text{R}}(-x) = (-1)^q f_{\text{R}}(x)$ ($\forall x \in \mathbb{C}$)

(9-c) $|f_{\text{R}}(x)| \leq 1$ ($\forall x \in [-1, 1]$)

である。

上記の条件は元の (7-a)-(7-d) に比べると極めて緩い。具体的に見ると $|f_{\text{R}}(x)| \leq 1$ ($\forall x \in [-1, 1]$) は、一般的な関数形に対して $f_{\text{R}}(x) \rightarrow f_{\text{R}}(x) / \max_{x \in [-1, 1]} |f_{\text{R}}(x)|$ という規格化によって常に満たすことができる。故に実質的な制約は (9-b) による多項式関数 $f_{\text{R}}(x)$ が奇関数または偶関数でパリティを持たなければならないということのみである。この事実から直ちに (1.115) 式で実装可能な量子固有値変換について次のことが言える。

Theorem 10. (パリティを持つ実多項式関数の量子固有値変換)

次数 q の実多項式関数 $f_{\mathbb{R}}(x)$ がパリティ条件 $f_{\mathbb{R}}(-x) = (-1)^q f_{\mathbb{R}}(x)$ ($\forall x \in \mathbb{C}$) および規格化条件 $|f_{\mathbb{R}}(x)| \leq 1$ ($\forall x \in [-1, 1]$) を満たすとき、

- 補助量子ビット数: $a + 1$
- $C[O_H]$ または $C[O_H]^\dagger$ へのクエリ複雑性: $2q$

で量子固有値変換 $|\psi\rangle \rightarrow f_{\mathbb{R}}(H)|\psi\rangle$ を行うユニタリー $O_{f_{\mathbb{R}}(H)}$ を構成できる。

ここで、補助量子ビット数 $a + 1$ はブロック埋め込み O_H に必要な a と (1.115) 式に必要な追加の 1 量子ビットである。クエリ複雑性は (1.115) 式で QET の制御演算子を利用していることに伴い、ブロック埋め込みの制御演算子である $C[O_H], C[O_H]^\dagger$ でカウントされていることに注意する。

一般の多項式関数

Theorem 10 によってパリティを持つ一般的な実多項式関数の量子固有値変換が実装できるようになったが、同様の手法を使うことでより広いクラスの関数を与えることもできる。例えば、パリティを持つとは限らない一般の実多項式関数の量子固有値変換については以下のことが成立する。

Theorem 11. (実多項式関数の量子固有値変換)

次数 q の実多項式関数 $f_{\mathbb{R}}(x)$ が規格化条件 $|f_{\mathbb{R}}(x)| \leq 1/2$ ($\forall x \in [-1, 1]$) を満たすとき、

- 補助量子ビット数: $a + 2$
- $C[O_H]$ または $C[O_H]^\dagger$ へのクエリ複雑性: $4q - 2$

で量子固有値変換 $|\psi\rangle \rightarrow f_{\mathbb{R}}(H)|\psi\rangle$ を行うユニタリー $O_{f_{\mathbb{R}}(H)}$ を構成できる。

Proof. — 次数 q の実多項式関数 $f_{\mathbb{R}}(x)$ は、

$$f_{\mathbb{R}}(x) = f_{\mathbb{R}}^{\text{odd}}(x) + f_{\mathbb{R}}^{\text{even}}(x), \quad f_{\mathbb{R}}^{\text{odd}}(x) = \frac{f_{\mathbb{R}}(x) - f_{\mathbb{R}}(-x)}{2}, \quad f_{\mathbb{R}}^{\text{even}}(x) = \frac{f_{\mathbb{R}}(x) + f_{\mathbb{R}}(-x)}{2} \quad (1.117)$$

によってパリティを持つ実多項式関数 $f_{\mathbb{R}}^{\text{odd}}(x), f_{\mathbb{R}}^{\text{even}}(x)$ に分解される。 $f_{\mathbb{R}}(x)$ の次数が q であるとき、 $f_{\mathbb{R}}^{\text{odd}}(x), f_{\mathbb{R}}^{\text{even}}(x)$ のうち一方が次数 q 以下、もう一方が $q - 1$ 以下である。また、 $f_{\mathbb{R}}(x)$ の規格化条件から

$$|f_{\mathbb{R}}^{\text{odd}}(x)| \leq \frac{1}{2}, \quad |f_{\mathbb{R}}^{\text{even}}(x)| \leq \frac{1}{2}, \quad \forall x \in [-1, 1] \quad (1.118)$$

である。よって、実多項式関数 $2f_{\mathbb{R}}^{\text{odd}}(x), 2f_{\mathbb{R}}^{\text{even}}(x)$ は Theorem 9 の条件 (9-a)-(9-c) を満たし、その量子固有値変換を行うユニタリー $O_{2f_{\mathbb{R}}^{\text{odd}}(H)}, O_{2f_{\mathbb{R}}^{\text{even}}(H)}$ を実装可能である。追加の補助量子ビットを 1 つ用意して、

$$O_{f_{\mathbb{R}}(H)} = (\text{Had} \otimes I) \left(|0\rangle\langle 0| \otimes O_{2f_{\mathbb{R}}^{\text{odd}}(H)} + |1\rangle\langle 1| \otimes O_{2f_{\mathbb{R}}^{\text{even}}(H)} \right) (\text{Had} \otimes I) \quad (1.119)$$

というユニタリーを定めると、

$$\begin{aligned} \langle 00| \langle 0|_a O_{f_{\mathbb{R}}(H)} |00\rangle |0\rangle_a |\psi\rangle &= \frac{\langle 0| \langle 0|_a O_{2f_{\mathbb{R}}^{\text{odd}}(H)} |0\rangle |0\rangle_a + \langle 0| \langle 0|_a O_{2f_{\mathbb{R}}^{\text{even}}(H)} |0\rangle |0\rangle_a}{2} |\psi\rangle \\ &= (f_{\mathbb{R}}^{\text{odd}}(H) + f_{\mathbb{R}}^{\text{even}}(H)) |\psi\rangle \\ &= f_{\mathbb{R}}(H) |\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.120)$$

である。補助量子ビット数は追加の 1 量子ビットを含めた $a+2$ となり、クエリ複雑性は $O_{2f_{\text{R}}^{\text{odd}}(H)}$, $O_{2f_{\text{R}}^{\text{even}}(H)}$ のうち一方が高々 $2q$, もう一方が高々 $2(q-1)$ となるので合計して $4q-2$ である。□

以上で一般の実多項式関数の量子固有値変換が実装できるようになったが、一般の複素多項式関数も実部と虚部に分解することで同様に可能である。

Theorem 12. (複素多項式関数の量子固有値変換)

次数 q の複素多項式関数 $f(x)$ が パリティ条件 ($\text{Re}[f](x) = (f(x) + f^*(x))/2$, 虚部関数 $\text{Im}[f](x) = (f(x) - f^*(x))/2i$ が共に奇関数または偶関数) および 規格化条件 $|f(x)| \leq 1/2$ ($\forall x \in [-1, 1]$) を満たすとき、

- 補助量子ビット数: $a+2$
- $C[O_H]$ または $C[O_H]^\dagger$ へのクエリ複雑性: 高々 $4q$

で量子固有値変換 $|\psi\rangle \rightarrow f(H)|\psi\rangle$ を行うユニタリー $O_{f(H)}$ を構成できる。

次数 q の複素多項式関数 $f(x)$ が 規格化条件 $|f(x)| \leq 1/4$ ($\forall x \in [-1, 1]$) を満たすとき、

- 補助量子ビット数: $a+3$
- $C[O_H]$ または $C[O_H]^\dagger$ へのクエリ複雑性: 高々 $8q$

で量子固有値変換 $|\psi\rangle \rightarrow f(H)|\psi\rangle$ を行うユニタリー $O_{f_{\text{R}}(H)}$ を構成できる。

1.5 量子特異値変換

量子固有値変換を一般の行列へ拡張した量子特異値変換の定式化を行う。1.1 節で議論したように一般の $d_2 \times d_1$ 行列 A は特異値分解

$$A = \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} \sigma_n |v_n\rangle \langle u_n|, \quad \sigma_n \geq 0, \quad |u_n\rangle \in \mathcal{H}_1 \simeq \mathbb{C}^{d_1}, \quad |v_n\rangle \in \mathcal{H}_2 \simeq \mathbb{C}^{d_2}. \quad (1.121)$$

ができる。各特異値を $x \rightarrow f(x)$ と変換する操作と左右の特異ベクトルの基底変換を組み合わせて、

$$f^{(\text{SV})}(A) = \begin{cases} \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} f(\sigma_n) |v_n\rangle \langle u_n|, & : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2, \\ \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} f(\sigma_n) |u_n\rangle \langle v_n|, & : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1, \\ \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} f(\sigma_n) |u_n\rangle \langle u_n|, & : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1, \\ \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} f(\sigma_n) |v_n\rangle \langle v_n|, & : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_2. \end{cases} \quad (1.122)$$

のいずれかによって

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \text{ or } \mathcal{H}_2 \rightarrow (\text{量子ゲート, 量子測定}) \rightarrow f^{(\text{SV})}(A)|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \text{ or } \mathcal{H}_2 \quad (1.123)$$

とするような変換が量子特異値変換である。量子特異値変換は、単に量子固有値変換を一般化であることに加えて Grover 探索, 線形方程式問題, 量子位相推定など単純にエルミート行列では記述されない量子アルゴリズムに対しても簡潔かつ統一的な記述を与えるという役割を持つ (量子アルゴリズムの大統一 [MRTC21])。一方で、量子固有値変換も量子特異値変換も実装可能な多項式関数やその実装コストの観点からは等価であるため (1.5.4 節)、量子特異値変換でしかできない量子アルゴリズムがあるわけではないという点には注意する。

量子特異値変換の定式化も基本的にはこれまでの量子固有値変換と同様のステップで行われる。異なる点は、ブロック埋め込みや量子ビット化の手続きが一般の行列に拡張される点である。以降では、それらについて議論したのちに量子特異値変換の演算子を定め、実装可能な多項式関数を導く。

1.5.1 一般の行列のブロック埋め込み

エルミート行列 H のブロック埋め込みは、補助量子ビットを用意してその $|0\rangle_a$ のブロック対角な部分空間における作用が H に一致するようなユニタリーとして定義された。一般の行列への一般化は、補助量子ビットの追加とブロック対角成分を与える部分空間を一般化することによって行われる。具体的には拡張されたブロック埋め込みを以下で定義する。

Definition 13. (一般化されたブロック埋め込み)

一般の行列 $A \in \mathbb{C}^{d_2 \times d_1} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ に対するブロック埋め込み O_A を次を満たす行列として定める:

(13-a) 部分空間に $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ を持つ Hilbert 空間 $\overline{\mathcal{H}}$ として、 O_A は $\overline{\mathcal{H}} \rightarrow \overline{\mathcal{H}}$ のユニタリーな正方行列である。

(13-b) Hilbert 空間 $\overline{\mathcal{H}}$ から $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ への射影演算子をそれぞれ Π_1, Π_2 として、

$$\Pi_2 O_A \Pi_1 = A = \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} \sigma_n |v_n\rangle \langle u_n| \quad (1.124)$$

が成り立つ。

条件 (13-a) は、補助量子ビットの導入による次元の追加を一般化したものである。条件 (13-b) がユニタリー行列 O_A のブロック対角成分に行列 A が埋め込まれていることを意味する。実際、Hilbert 空間 $\overline{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_1^\perp = \mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_2^\perp$ に対して、 $\{\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_1^\perp\}, \{\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_2^\perp\}$ の部分空間ごとにブロック表示をすると、

$$O_A = \begin{pmatrix} A & * \\ * & * \end{pmatrix} \quad (1.125)$$

と書ける。このようなブロック埋め込みが存在するための必要十分条件はエルミート行列の場合と同じく $\|A\| \leq 1$ である。この拡張されたブロック埋め込みの定義の具体例を見てみる。

例 1. エルミート行列.— エルミート行列 H のブロック埋め込み O_H は、上記の定義で

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}, \quad \Pi_1 = \Pi_2 = |0\rangle \langle 0|_a \otimes I_s \quad (1.126)$$

とした場合である。補助量子ビット数が a であるときブロック埋め込み O_H が定義される空間は $\overline{\mathcal{H}} = \mathbb{C}^{2^a} \otimes \mathcal{H}$ である。

例 2. Grover 探索.— Grover の探索アルゴリズムは一様重ね合わせ状態

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x \in \{0,1\}^n} |x\rangle^n \quad (1.127)$$

から、特定の条件を満たす探索問題の解 $|x_0\rangle$ ($x_0 \in \{0,1\}^n$) を計算する量子アルゴリズムである。Grover 探索では、 $|\psi_0\rangle \rightarrow |x_0\rangle$ へ非ゼロの遷移振幅を持つユニタリーゲートを用いる。その代表例

が Hadamard ゲートで

$$\langle x_0 | \text{Had}^{\otimes n} | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \neq 0 \quad (1.128)$$

となっている。これは行列 $A = (1/\sqrt{2^n}) |x_0\rangle \langle \psi_0|$ のブロック埋め込みとなっている。実際、

$$\mathcal{H}_1 = \{|\psi_0\rangle\}, \quad \mathcal{H}_2 = \{|x_0\rangle\}, \quad \Pi_1 = |\psi_0\rangle \langle \psi_0|, \quad \Pi_2 = |x_0\rangle \langle x_0| \quad (1.129)$$

と定めると、(1.128) 式は $\Pi_2(\text{Had}^{\otimes n})\Pi_1 = A$ に他ならない。Grover 探索はこのブロック埋め込みを用いた量子特異値変換と等価である [MRTC21]。

射影演算子 Π_1, Π_2

行列 A の特異ベクトル $\{|u_n\rangle\}_n, \{|v_n\rangle\}_n$ はそれぞれ Hilbert 空間 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ の正規直交系となっている。演算子 Π_1, Π_2 はこれらの次元 d_1, d_2 の空間への射影であるから、特異ベクトルを使って次のように表現することができる。

$$\Pi_1 = \sum_{n=1}^{d_1} |u_n\rangle \langle u_n|, \quad (1.130)$$

$$\Pi_2 = \sum_{n=1}^{d_2} |v_n\rangle \langle v_n|. \quad (1.131)$$

ただし上記の表式で、 $n = 1, 2, \dots, \text{rank}(A)$ の場合は $|u_n\rangle, |v_n\rangle$ を A の特異ベクトルに選ぶ。 $\text{rank}(A) < n \leq \max(d_1, d_2)$ の場合の $\{|u_n\rangle\}_n, \{|v_n\rangle\}_n$ は Gram-Schmidt 直交化などによって $\{|u_n\rangle\}_{n=1}^{d_1}, \{|v_n\rangle\}_{n=1}^{d_2}$ が $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ の正規直交基底となるように選ぶ。このような射影演算子の表示は後々の計算で有用となる。

1.5.2 量子ビット化

量子特異値変換の場合も量子固有値変換の場合と同様に、有効的な 1 量子ビット上での回転としてのブロック埋め込み O_A の表示が可能である (量子ビット化)。加えて、量子固有値変換で導入した補助系上のユニタリー回転による有効 1 量子ビット上での回転は射影演算子 Π_1, Π_2 によって特徴付けられる制御ユニタリーゲートによって実現できる。

ブロック埋め込み O_A の量子ビット化

ブロック埋め込み O_A が A の特異ベクトル $|u_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots, \text{rank}(A)$) にどのように作用するかを考える。ブロック埋め込みの定義より

$$\begin{aligned} O_A |u_n\rangle &= \Pi_2 O_A \Pi_1 |u_n\rangle + (I - \Pi_2) O_A \Pi_1 |u_n\rangle \\ &= A |u_n\rangle + (I - \Pi_2) O_A \Pi_1 |u_n\rangle \\ &= \sigma_n |v_n\rangle + \sqrt{1 - \sigma_n^2} |\Psi_n^\perp\rangle, \end{aligned} \quad (1.132)$$

$$|\Psi_n^\perp\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 - \sigma_n^2}} (O_A |u_n\rangle - \sigma_n |v_n\rangle) \quad (1.133)$$

と表現できる。ここで、 $n = 1, 2, \dots, \text{rank}(A)$ で $A|u_n\rangle = \sigma_n|v_n\rangle$ であるという特異ベクトルの性質 [(1.121) 式] を用いた。また、 $\sigma_n = 1$ の場合に (1.133) 式による $|\Psi_n^\perp\rangle$ が ill-defined となるがこれも量子固有値変換の場合と同様に問題とならないようにできる。このように定義された状態は

$$\Pi_2|v_n\rangle = |v_n\rangle, \quad \Pi_2|\Psi_n^\perp\rangle = 0 \quad (1.134)$$

を満たし、また規格化 $\langle\Psi_n^\perp|\Psi_n^\perp\rangle = 1$ も満たす。従って、射影演算子 Π_2 を用いて識別される正規直交系 $\{|u_n\rangle, |\Psi_n^\perp\rangle\}$ によって 2 次元正規直交系をなすことが出来る。これは $O_A|u_n\rangle$ の出力に対して有効な 2 次元基底であるが、入力に対して有効な 2 次元基底も定めることができる。

$$|\Phi_n^\perp\rangle = O_A^\dagger \left(\sqrt{1-\sigma_n^2}|v_n\rangle - \sigma_n|\Psi_n^\perp\rangle \right), \quad n = 1, 2, \dots, \text{rank}(A) \quad (1.135)$$

を定める。状態 $|u_n\rangle$ との直交性に関しては

$$\begin{aligned} \Pi_1|\Phi_n^\perp\rangle &= \Pi_1 O_A^\dagger \left(\sqrt{1-\sigma_n^2}|v_n\rangle - \frac{\sigma_n}{\sqrt{1-\sigma_n^2}}(O_A|u_n\rangle - \sigma_n|v_n\rangle) \right) \\ &= \Pi_1 O_A^\dagger \left(\frac{1}{\sqrt{1-\sigma_n^2}}\Pi_1|v_n\rangle - \frac{\sigma_n}{\sqrt{1-\sigma_n^2}}O_A|u_n\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-\sigma_n^2}}(A^\dagger - \sigma_n)|v_n\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (1.136)$$

となることから、

$$\Pi_1|u_n\rangle = |u_n\rangle, \quad \Pi_1|\Phi_n^\perp\rangle = 0 \quad (1.137)$$

が言えることにより確かめられる。また、 $\langle\Phi_n^\perp|\Phi_n^\perp\rangle = 1$ であることも確かめられる。以上から、量子固有値変換の場合と同様に、ブロック埋め込み O_A の入出力に関する 2 次元正規直交系を

$$\mathcal{S}_n^A = \{|u_n\rangle, |\Phi_n^\perp\rangle\}, \quad \mathcal{S}_n^B = \{|v_n\rangle, |\Psi_n^\perp\rangle\} \quad (1.138)$$

によって導入しよう。この基底で (1.132), (1.135) 式を行列表示することで

$$O_A \sim \begin{pmatrix} \sigma_n & \sqrt{1-\sigma_n^2} \\ \sqrt{1-\sigma_n^2} & -\sigma_n \end{pmatrix}_{A \rightarrow B} = (Ze^{i\theta\sigma_n Y})_{A \rightarrow B}, \quad \theta_\sigma = \arccos(\sigma) \quad (1.139)$$

という有効 1 量子ビット上のユニタリー回転を得る。また、その共役を取ることにより O_A^\dagger は

$$O_A^\dagger \sim \begin{pmatrix} \sigma_n & \sqrt{1-\sigma_n^2} \\ \sqrt{1-\sigma_n^2} & -\sigma_n \end{pmatrix}_{A \rightarrow B} = (Ze^{i\theta\sigma_n Y})_{B \rightarrow A} \quad (1.140)$$

という行列表示を与える。

最後に、ここまでは $n = 1, 2, \dots, \text{rank}(A)$ で A の特異ベクトル $|u_n\rangle, |v_n\rangle$ に対するブロック埋め込みの行列表示を調べたが、 $n > \text{rank}(A)$ についても正しいことを確かめよう。 $n > \text{rank}(A)$ では、 $A|u_n\rangle = 0$ より $\sigma_n = 0$ とみなすことが出来る。特異ベクトルの場合と異なる点として注意しなければならないのが、 $|u_n\rangle, |v_n\rangle$ の対応が必ずしも存在するわけでないことである。具体的には一般性を失わずに $d_1 > d_2$ とすると、 $n = d_2 + 1, \dots, d_1$ における $|v_n\rangle$ が存在しないことが問題となる。すなわち、入力 $\mathcal{S}_n^A = \{|u_n\rangle, |\Phi_n^\perp\rangle\}$ における $|\Phi_n^\perp\rangle$ で張られる部分空間、出力 $\mathcal{S}_n^B = \{|v_n\rangle, |\Psi_n^\perp\rangle\}$ における $|v_n\rangle$ で張られる部分空間が ill-defined となる。しかし、 $\sigma_n = 0$ における (1.139) 式の行列表示は $O_A \sim (X)_{A \rightarrow B}$ であり、量子特異値変換で実際に入力する状態 $|u_n\rangle$ に作用させても ill-defined な部分空間 $\text{span}(|v_n\rangle)$ に成分を持つことがない。量子特異値変換の過程で続く O_A^\dagger の入力には $\text{span}(|v_n\rangle)$ の成分がないため、その出力に $|\Phi_n^\perp\rangle$ が現れることもない。以上から、特異ベクトル $|u_n\rangle, |v_n\rangle$ に限らず $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ の正規直交系をなすように構成した $\{|u_n\rangle\}_{n=1}^{d_1}, \{|v_n\rangle\}_{n=1}^{d_2}$ の各ベクトルについて (1.139), (1.140) 式による量子ビット化は有効である。

有効 1 量子ビット上の Z 回転

量子固有値変換では補助量子ビット上での回転演算子を用いて、有効 1 量子ビット上の Z 回転 $U_\phi \sim (e^{i\phi Z})_{A \rightarrow A}$ および $(e^{i\phi Z})_{B \rightarrow B}$ を構成した。量子特異値変換でも量子信号処理の構築のために同様の操作が必要となるが、射影演算子 Π_1, Π_2 に基づいて定義できる。射影演算子 Π に対してユニタリー演算子 U_ϕ^Π を

$$U_\phi^\Pi = e^{i\phi\Pi} + e^{-i\phi}(I - \Pi) \quad (1.141)$$

によって定めよう。このようなユニタリー演算子は補助量子ビットを 1 つ追加して

$$C_\Pi \text{NOT} = \Pi \otimes X + (I - \Pi) \otimes I \quad (1.142)$$

という制御演算子を導入すると

$$U_\phi^\Pi \otimes I = C_\Pi \text{NOT} (I \otimes e^{i\phi Z}) C_\Pi \text{NOT} \quad (1.143)$$

によって実現できる。これは、1.3.2 節で議論した量子固有値変換における補助系の回転を一般化したものとなっている。ここでも回転角 $\phi \in \mathbb{R}$ は 1 量子ビット上の Z 回転の回転角であり制御可能である。

ユニタリー演算子 U_ϕ^Π ($\Pi = \Pi_1, \Pi_2$) が有効的な 2 次元空間で Z 回転を与えることを確かめる。議論の簡単さのため、 $|u_n\rangle \in \mathcal{H}_1, |v_n\rangle \in \mathcal{H}_2$ が行列 A の特異ベクトルである場合を考えるが、そうでない $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ の基底である場合も同様である。まず、入力 \mathcal{S}_n^A に関して (1.137) 式より直ちに

$$U_\phi^{\Pi_1} |u_n\rangle = e^{i\phi\Pi_1} |u_n\rangle = e^{i\phi} |u_n\rangle, \quad (1.144)$$

$$U_\phi^{\Pi_1} |\Phi_n^\perp\rangle = e^{-i\phi}(I - \Pi_1) |\Phi_n^\perp\rangle = e^{-i\phi} |\Phi_n^\perp\rangle \quad (1.145)$$

である。故に、 $U_\phi^{\Pi_1}$ は部分空間 \mathcal{S}_n^A 内で閉じていて

$$U_\phi^{\Phi_1} \sim \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix}_{A \rightarrow A} = (e^{i\phi Z})_{A \rightarrow A} \quad (1.146)$$

である。一方で、 $U_\phi^{\Pi_2}$ に対しても \mathcal{S}_n^B への作用を考えることで同様のことが言える。(1.134) 式の性質から

$$U_\phi^{\Phi_2} \sim \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix}_{B \rightarrow B} = (e^{i\phi Z})_{B \rightarrow B} \quad (1.147)$$

である。従って、量子特異値変換に対しても有効 1 量子ビット上の Z 回転を構成することができる。量子固有値変換と異なる点は、入力と出力の部分空間が $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ と一致しないためにそのために必要な操作も異なることである。

1.5.3 量子特異値変換の演算子

量子ビット化を通じて $Z e^{i\theta_\sigma Y}$ の回転を与えるブロック埋め込み O_A, O_A^\dagger と $e^{i\phi Z}$ の回転を与えるユニタリー U_ϕ^Π を得ることができたので、それを元に量子特異値変換の演算子を次のように定める。

Definition 14. (量子特異値変換における量子信号処理演算子)

制御可能パラメータ $\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}^q$ に対して、 q 次元量子信号処理演算子を、

$$\text{QSVT}[\vec{\phi}_q] = \begin{cases} U_{\phi_1}^{\Pi_1} O_A \prod_{i=1}^{(q-1)/2} [U_{\phi_{2i-2}}^{\Pi_2} O_A^\dagger U_{\phi_{2i-1}}^{\Pi_1} O_A] & \text{if } q; \text{ 奇数,} \\ \prod_{i=1}^{q/2} [U_{\phi_{2i-1}}^{\Pi_2} O_A^\dagger U_{\phi_{2i}}^{\Pi_1} O_A] & \text{if } q; \text{ 偶数} \end{cases} \quad (1.148)$$

で定義する。

行列表示と基底の変換規則を考えると、

$$\text{QSVT}[\vec{\phi}_q] \sim \begin{cases} \left(\prod_{i=1}^q \{e^{i\phi_i Z} Z e^{i\theta_{\sigma_n} Y}\} \right)_{A \rightarrow B} & \text{if } q; \text{ 奇数,} \\ \left(\prod_{i=1}^q \{e^{i\phi_i Z} Z e^{i\theta_{\sigma_n} Y}\} \right)_{A \rightarrow A} & \text{if } q; \text{ 偶数} \end{cases} \quad (1.149)$$

である。括弧中の演算子は 2×2 のパウリ回転の積であり量子信号処理の (1.101) 式に他ならない。その行列成分を

$$S[\vec{\phi}_q](x) \equiv \prod_{i=1}^q (e^{i\phi_i Z} Z e^{i\theta_x Y}) = \begin{pmatrix} S_{11}[\vec{\phi}_q](x) & S_{12}[\vec{\phi}_q](x) \\ S_{21}[\vec{\phi}_q](x) & S_{22}[\vec{\phi}_q](x) \end{pmatrix} \quad (1.150)$$

で表示するならば、量子固有値変換の場合と同様に $|u_n\rangle$ を入力とした際の作用は

$$\text{QSVT}[\vec{\phi}_q] |u_n\rangle = \begin{cases} S_{11}[\vec{\phi}_q](\sigma_n) |v_n\rangle + S_{21}[\vec{\phi}_q](\sigma_n) |\Psi_n^\perp\rangle, & \text{if } q; \text{ 奇数,} \\ S_{21}[\vec{\phi}_q](\sigma_n) |u_n\rangle + S_{22}[\vec{\phi}_q](\sigma_n) |\Phi_n^\perp\rangle, & \text{if } q; \text{ 偶数} \end{cases} \quad (1.151)$$

である。まず次数 q ; 奇数の場合に着目する。 \mathcal{H}_1 上の任意の初期状態 $|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle$ に対して、ユニタリー演算子 $\text{QSVT}[\vec{\phi}_q]$ をかけたのち系を $\{\Pi_2, I - \Pi_2\}$ の組で射影測定する操作を考えよう。 Π_2 に相当する測定結果を得た際の状態の変化は

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\rightarrow \Pi_2 \text{QSVT}[\vec{\phi}_q] \sum_n c_n |u_n\rangle \\ &= \sum_n c_n S_{11}[\vec{\phi}_q](\sigma_n) |v_n\rangle \\ &\equiv S_{11}[\vec{\phi}_q]^{(\text{SV})}(A) |\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.152)$$

である。ただし演算子 $S_{11}[\vec{\phi}_q]^{(\text{SV})}(A)$ は

$$S_{11}[\vec{\phi}_q]^{(\text{SV})}(A) = \sum_n S_{11}[\vec{\phi}_q]^{(\text{SV})}(\sigma_n) |v_n\rangle \langle u_n| \quad (1.153)$$

で定義され、(1.122) 式で導入した関数 $S_{11}[\vec{\phi}_q]^{(\text{SV})}(x)$ に対する A の量子特異値となっていることがわかる。次数 q ; 偶数の場合は出力の基底が $|u_n\rangle$ であることに対応して射影測定の組を $\{\Pi_1, I - \Pi_1\}$ に変更して事後選択を行う。操作後の状態は

$$S_{11}[\vec{\phi}_q]^{(\text{SV})}(A) = \sum_n S_{11}[\vec{\phi}_q]^{(\text{SV})}(\sigma_n) |u_n\rangle \langle u_n| \quad (1.154)$$

として、 $|\psi\rangle \rightarrow S_{11}[\vec{\phi}_q]^{(\text{SV})}(A) |\psi\rangle$ である。これは、(1.122) 式における出力を変えた別の量子特異値変換となっている。いずれの量子特異値変換の成功確率も

$$p = \left\| S_{11}[\vec{\phi}_q]^{(\text{SV})}(A) |\psi\rangle \right\|^2 \quad (1.155)$$

で与えられる。

さて、量子特異値変換でどのような関数 $f(x)$ が実現できるかを考えよう。これは結局、量子信号処理でどのような関数 $S_{11}[\vec{\phi}_q](x)$ が実現できるかという問題に帰着されるので、量子固有値変換と同様の結果が得られる:

Theorem 15. (量子特異値変換の実現可能な関数)

Definition 14 における次数 q の演算子 $\text{QSVT}[\vec{\phi}_q]$ によって可能な量子特異値変換

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \rightarrow f^{(\text{SV})}(A) |\psi\rangle = \begin{cases} (\sum_n f(\sigma_n) |v_n\rangle \langle u_n|) |\psi\rangle \in \mathcal{H}_2 & \text{if } q; \text{ 奇数,} \\ (\sum_n f(\sigma_n) |u_n\rangle \langle u_n|) |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 & \text{if } q; \text{ 偶数} \end{cases} \quad (1.156)$$

で関数 $f(x)$ が実現可能であるための必要十分条件は、 $f(x)$ が Theorem 7 の条件 (7-a)-(7-d) を全て満たすことである。また、その際のブロック埋め込み O_A, O_A^\dagger に対するクエリ複雑性は q である。

関数 $f(x)$ の制約を Theorem 7 の (7-a)-(7-d) より緩和するためには、補助量子ビットを追加して $\text{QSVT}[\vec{\phi}_q]$ の制御演算子を用いることで可能である。例えば、関数 $f(x)$ の量子特異値変換が実装可能であるとき、 $f^*(x)$ も同じ条件を満たすことから同じ次数 q のある演算子 $\text{QSVT}[\vec{\phi}'_q]$ によって実装可能である。Theorem 10 に倣って補助量子ビットを 1 つ導入し、制御演算子

$$O_{f_R^{(\text{SV})}(A)} = (\text{Had} \otimes I) \left(|0\rangle \langle 0| \otimes \text{QSVT}[\vec{\phi}_q] + |1\rangle \langle 1| \otimes \text{QSVT}[\vec{\phi}'_q] \right) (\text{Had} \otimes I) \quad (1.157)$$

によって実多項式関数 $\text{Re}[f](x)$ の量子特異値変換が可能である。逆に言えば、目的の実多項式関数 $f_R(x)$ に対して $\text{Re}[f](x) = f_R(x)$ となり Theorem 7 で実現可能な $f(x)$ が存在すると、 $f_R(x)$ の量子特異値変換も実装可能である。Theorem 10 と全く同様の議論から実現可能な実多項式関数は以下の通りである。

Theorem 16. (パリティを持つ実多項式関数の量子特異値変換)

次数 q の実多項式関数 $f_R(x)$ がパリティ条件 $f_R(-x) = (-1)^q f_R(x)$ ($\forall x \in \mathbb{C}$) および規格化条件 $|f_R(x)| \leq 1$ ($\forall x \in [-1, 1]$) を満たすとする。このとき、

- 追加の補助量子ビット数; 1
- $C[O_A], C[O_A]^\dagger$ へのクエリ複雑性; $2q$

によって、量子特異値変換 $|\psi\rangle \rightarrow f_R(A) |\psi\rangle$ を行うユニタリー $O_{f_R^{(\text{SV})}(A)}$ を構成できる。

最後に量子特異値変換に関する注意点をいくつか述べておこう。Theorem 14 による演算子は、基底を $\{|u_n\rangle\} \rightarrow \{|u_n\rangle\}$ または $\{|u_n\rangle\} \rightarrow \{|v_n\rangle\}$ と変換するような量子特異値変換を与えたが、基底変換の方法は (1.122) 式で示される 4 通りがある。残り 2 種類の

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_2 \rightarrow f^{(\text{SV})}(A) |\psi\rangle = \begin{cases} (\sum_n f(\sigma_n) |u_n\rangle \langle v_n|) |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1, \\ (\sum_n f(\sigma_n) |v_n\rangle \langle v_n|) |\psi\rangle \in \mathcal{H}_2, \end{cases} \quad (1.158)$$

の実装方法についても触れておこう。これは単純で、行列 A の特異値分解が (1.121) 式であるときそのエルミート共役が

$$A^\dagger = \sum_n \sigma_n |u_n\rangle \langle v_n| \quad (1.159)$$

と特異値分解されることを利用する。特異値は同じで左右の特異ベクトル $|u_n\rangle, |v_n\rangle$ の役割が入れ替わっていることから、 A^\dagger のブロック埋め込み O_{A^\dagger} を用いて Definition 14 に従った量子特異値変換を行えばこれらを実装可能である。なお、ブロック埋め込み O_{A^\dagger} は

$$\Pi_1 O_{A^\dagger} \Pi_2 = (\Pi_2 O_A \Pi_1)^\dagger = A^\dagger \quad (1.160)$$

より、 $O_{A^\dagger} = O_A^\dagger$ である。Theorem ?? の帰結に基づくと、次数 q が奇数の場合に (1.122) 式の第2段目、次数 q が偶数の場合に第4段目の量子特異値変換が実装可能である。

次に注意すべき点が、パリティのない関数 $f(x)$ の実装である。量子固有値変換の場合と同様に、関数 $f(x) = f_{\text{odd}}(x) + f_{\text{even}}(x)$ と分解しそれぞれの量子特異値変換の制御演算子を用いることで一般の $f(x)$ が実装可能であるように見える。しかし、量子特異値変換では次数 q の偶奇によってその出力が変化する。具体的には

$$\sum_n f_{\text{odd}}(\sigma_n) |v_n\rangle \langle u_n| + \sum_n f_{\text{even}}(\sigma_n) |u_n\rangle \langle u_n| \quad (1.161)$$

は、 $\mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ の写像と $\mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$ の写像の和であるため $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2$ を除いて ill-defined である。特にこれが各特異値 σ_n で閉じた多項式変換を与えるためには $|v_n\rangle = e^{i\varphi_n} |u_n\rangle$ ($\forall n, \varphi_n \in \mathbb{R}$) でなければならない。このような条件を満たす A は

$$A = \sum_n \sigma_n e^{i\varphi_n} |u_n\rangle \langle u_n| \quad (1.162)$$

であり、対角化可能な一般の正方行列 (正規行列, normal matrix) である。このとき (1.161) 式で実現されるのは

$$\sum_n \{f_{\text{odd}}(\sigma_n) e^{i\varphi_n} + f_{\text{even}}(\sigma_n)\} |u_n\rangle \langle u_n| \quad (1.163)$$

という形の変換であることがわかる。位相 φ_n が未知であるときはこの多項式も未知であることに留意する。

1.5.4 量子固有値/特異値変換の等価性

ここまで量子固有値変換の一般化として量子特異値変換を議論してきたが、実はその両者は等価であることを示そう。ここでいう等価とは、一方の変換が可能なときその変換 $\mathcal{O}(1)$ 回と追加の $\mathcal{O}(1)$ 量子ビットの補助系の利用によってもう一方の変換も実現できるということを意味する。すなわち、ある特定の量子アルゴリズムが量子固有値変換または量子特異値変換のいずれかで実行できるとき、もう一方の変換でも同じことは本質的に同じ計算コストで実行できるということである。

量子特異値変換→量子固有値変換。— まず、量子特異値変換によって量子固有値変換を実行できることを示そう。 A がエルミート行列で固有値 $\lambda_n \in [-1, 1]$ のとき、スペクトル分解が

$$A = \sum_n \lambda_n \lambda_n |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n| = \sum_n |\lambda_n| (\text{sign}(\lambda_n) |\lambda_n\rangle) \langle \lambda_n| \quad (1.164)$$

により、 $\sigma_n = |\lambda_n|$, $|u_n\rangle = |\lambda_n\rangle$, $|v_n\rangle = \text{sign}(\lambda_n) |\lambda_n\rangle$ とする特異値分解を与えていることがわかる。次数 q ; 奇数における量子特異値変換は

$$\begin{aligned} f^{(\text{SV})}(A) &= \sum_n f(|\lambda_n|) \text{sign}(\lambda_n) |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n| \\ &= \sum_n f(\lambda_n) |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n| = f(A) \end{aligned} \quad (1.165)$$

であり量子固有値変換に一致する。次数 q ; 偶数においても同様である。また量子固有値変換では、多項式関数 $f(x)$ がパリティを持たなくても Theorem 11 によって実装することができた。一方で、量子特異値変換では一般にはできないものの正規行列であれば (1.163) 式のように実装可能であった。

今の場合、エルミート行列は $e^{i\varphi_n} = \text{sign}(\lambda_n)$ とした正規行列であるので、パリティのない関数も実現可能である。以上から、量子固有値変換で実装可能な操作は全て量子特異値変換に含まれる。

量子固有値変換→量子特異値変換.— 逆に、量子固有値変換が実行可能であれば量子特異値変換も実行可能であることを示そう。量子特異値変換で用いる行列 A は $d_2 \times d_1$ 次元の正方行列とは限らない行列であるが、ここでは一般性を失わずに $d_1 = d_2 = d$ とする。これは、行列のサイズを $\max(d_1, d_2) \times \max(d_1, d_2)$ に拡張して、空いた行列成分にゼロを入れることでいつでも可能である。射影演算子 Π_1, Π_2 も一致し、 $\Pi_1 = \Pi_2 = \Pi$ とする。このとき、一般のエルミートとは限らない正方行列 A からエルミート行列 H を

$$H = \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (1.166)$$

によって定める。これは次元が2倍に増えているので補助量子ビットを1つ追加することで実現する。行列 H の固有多項式は

$$\det(\lambda - H) = \det(\lambda^2 - A^\dagger A) \quad (1.167)$$

であるので、 A の特異値 σ_n , 特異ベクトル $|u_n\rangle, |v_n\rangle$ を使って H の固有値・固有ベクトルの組は次のように与えられる;

$$\text{固有値; } \lambda_{n,\pm} = \pm\sigma_n, \quad \text{固有ベクトル; } |\lambda_{n,\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |u_n\rangle \\ \pm|v_n\rangle \end{pmatrix}, \quad n = 1, \dots, \text{rank}(A), \quad (1.168)$$

$$\text{固有値; } \lambda_n^u = 0, \quad \text{固有ベクトル; } |\lambda_n^u\rangle = \begin{pmatrix} |u_n\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad n = \text{rank}(A) + 1, \dots, d, \quad (1.169)$$

$$\text{固有値; } \lambda_n^v = 0, \quad \text{固有ベクトル; } |\lambda_n^v\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ |v_n\rangle \end{pmatrix}, \quad n = \text{rank}(A) + 1, \dots, d. \quad (1.170)$$

エルミート行列 H に対してその量子固有値変換を行えば

$$\begin{aligned} f(H) &= \sum_{n=1}^{\text{rank}(A)} \sum_{s=\pm} f(s\sigma_n) |\lambda_{n,s}\rangle \langle \lambda_{n,s}| + \sum_{n=\text{rank}(A)+1}^d f(0) (|\lambda_n^u\rangle \langle \lambda_n^u| + |\lambda_n^v\rangle \langle \lambda_n^v|) \\ &= \sum_{n=1}^d \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (f(\sigma_n) + f(-\sigma_n)) |u_n\rangle \langle u_n| & (f(\sigma_n) - f(-\sigma_n)) |u_n\rangle \langle v_n| \\ (f(\sigma_n) - f(-\sigma_n)) |v_n\rangle \langle u_n| & (f(\sigma_n) + f(-\sigma_n)) |v_n\rangle \langle v_n| \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.171)$$

を実装することができる。 $f(H)$ の次数 q は奇数または偶数であり、それぞれの場合においてこの量子固有値変換は

$$f(H) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 0 & \sum_n f(\sigma_n) |u_n\rangle \langle v_n| \\ \sum_\sigma f(\sigma_n) |v_n\rangle \langle u_n| & 0 \end{pmatrix} & \text{if } q; \text{ 奇数,} \\ \begin{pmatrix} \sum_\sigma f(\sigma_n) |u_n\rangle \langle u_n| & 0 \\ 0 & \sum_n f(\sigma_n) |v_n\rangle \langle v_n| \end{pmatrix} & \text{if } q; \text{ 偶数} \end{cases} \quad (1.172)$$

となる。量子特異値変換の入力 $|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle \in \mathcal{H}_1$ に対して補助系を $|0\rangle$ として

$$|0\rangle |\psi\rangle = \sum_n c_n \begin{pmatrix} |u_n\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.173)$$

に量子固有値変換 $f(H)$ を作用させる。次数 q ; 奇数の場合であれば

$$\begin{aligned} |0\rangle|\psi\rangle &\rightarrow f(H)|0\rangle|\psi\rangle \\ &= \sum_n c_n \begin{pmatrix} 0 \\ f(\sigma_n)|v_n\rangle \end{pmatrix} \\ &= |1\rangle f^{(\text{SV})}(A)|\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.174)$$

により量子特異値変換 $|\psi\rangle \rightarrow f^{(\text{SV})}(A)|\psi\rangle$ を得る。次数 q が偶数の場合でも同様に $|0\rangle|\psi\rangle \rightarrow |0\rangle f^{(\text{SV})}(A)|\psi\rangle$ という操作を通じて量子特異値変換を得ることができる。次数 q の量子特異値変換 $f^{(\text{SV})}(A)$ を行うにはブロック埋め込み O_H を q 回呼び出す必要がある。

最後に、 $f(H)$ の量子固有値変換を行うためのブロック埋め込み O_H が、行列 A のブロック埋め込み O_A で構成できることを確かめよう。

$$H = |0\rangle\langle 1| \otimes A + |1\rangle\langle 0| \otimes A^\dagger \quad (1.175)$$

であるので、ユニタリー O_H を

$$O_H = |0\rangle\langle 1| \otimes O_A + |1\rangle\langle 0| \otimes O_A^\dagger = (|0\rangle\langle 0| \otimes O_A + |1\rangle\langle 1| \otimes O_A^\dagger)(X \otimes I) \quad (1.176)$$

で定める。これは、射影演算子 $I \otimes \Pi$ として

$$(I \otimes \Pi)O_H(I \otimes \Pi) = H \quad (1.177)$$

を与えるブロック埋め込みであり、 $C[O_A], C[O_A]^\dagger$ を1回ずつ使うことで実現できる。故に、量子特異値変換 $f^{(\text{SV})}(A)$ を量子固有値変換 $f(H)$ によって実行した際の $C[O_A], C[O_A]^\dagger$ のクエリ複雑性も $2q$ であり、計算量のスケールは定数倍を除いて同じである。

以上の議論から、量子固有値変換も量子特異値変換も実のところ本質的に等価であることが結論づけられる。量子固有値変換/量子特異値変換によって量子アルゴリズムを構成する際にはどちらか一方さえあれば本来は十分である。ただ、実際には問題に応じてその表式の見やすさなどに違いがあり適切に使い分けることが多い。

1.6 量子信号処理 (Quantum Signal Processing, QSP)

本節では、量子固有値変換/量子特異値変換で実装可能な多項式関数を特徴づける量子信号処理の定式化を行う。具体的には、(1.101) 式による

$$S[\vec{\phi}_q](x) \equiv \prod_{i=1}^q (e^{i\phi_i Z} Z e^{i\theta_i Y}) = \begin{pmatrix} S_{11}[\vec{\phi}_q](x) & S_{12}[\vec{\phi}_q](x) \\ S_{21}[\vec{\phi}_q](x) & S_{22}[\vec{\phi}_q](x) \end{pmatrix} \quad (1.178)$$

の1量子ビット上のユニタリー回転の合成で実現される関数 $S_{11}[\vec{\phi}_q](x)$ を与える。

1.6.1 量子信号処理演算子

まず初めに、量子信号処理演算子の定義を行う。1量子ビット系を考え、次のように定義を行う。

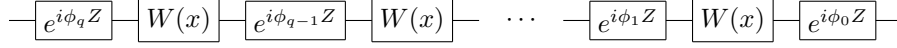


図 1.4: 回転による量子信号処理

Definition 17. (回転による量子信号処理)

1 量子ビットの回転演算子

$$W(x) = \begin{pmatrix} x & i\sqrt{1-x^2} \\ i\sqrt{1-x^2} & x \end{pmatrix} = e^{i\arccos(x)X} \quad (1.179)$$

に対して、 q 次の量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x) \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ を次で定める。

$$R[\vec{\phi}_q](x) = e^{i\phi_0 Z} \prod_{i=1}^q [W(x)e^{i\phi_i Z}]. \quad (1.180)$$

ただし、 $x \in [-1, 1]$ は変数、 $\vec{\phi}_q = (\phi_0, \dots, \phi_q) \in \mathbb{R}^{q+1}$ は制御可能なパラメータである。

ユニタリー演算子 $W(x)$ は変数 x に応じて異なる回転角 $\theta_x = \arccos(x)$ を持つ x 軸周りの回転であり、量子信号処理演算子は x 軸周りの回転 $W(x)$ と制御可能な z 軸周りの回転 $e^{i\phi_i Z}$ を q 回交互に繰り返して合成したものである (図 1.4)。このような量子信号処理は核磁気共鳴 (NMR) において従来的に考えられてきたもので、未知の強度 θ_x を持つ X 方向のシグナルパルスに対して Z 方向の制御可能なパルスを印加することで信号パルスの形状を制御したいということが動機にある [Wim94, VC05]。実際、量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ を

$$R[\vec{\phi}_q](x) = \begin{pmatrix} R_{11}[\vec{\phi}_q](x) & R_{12}[\vec{\phi}_q](x) \\ R_{21}[\vec{\phi}_q](x) & R_{22}[\vec{\phi}_q](x) \end{pmatrix} \quad (1.181)$$

と行列表示すると、

$$R[\vec{\phi}_q](x) |0\rangle = R_{11}[\vec{\phi}_q](x) |0\rangle + R_{21}[\vec{\phi}_q](x) |1\rangle \quad (1.182)$$

であることから、 $|0\rangle$ の重み $R_{11}[\vec{\phi}_q](x)$ をパラメータセット $\vec{\phi}_q$ の選択によって様々な関数形にすることができる。

さて、上記の量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ の定義は x, z 軸周りの合成であり、NMR 系などの物理に動機付けされた定義である。ここでは、量子固有値変換/量子特異値変換の文脈における定義として (1.101) 式を与えるように以下の定義を行う。

Definition 18. (反射による量子信号処理)

1 量子ビットの反射演算子

$$V(x) = \begin{pmatrix} x & \sqrt{1-x^2} \\ \sqrt{1-x^2} & -x \end{pmatrix} = Ze^{i\arccos(x)Y} \quad (1.183)$$

に対して、変数 $x \in [-1, 1]$ 、制御可能なパラメータ $\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}^q$ を持つ q 次の量子信号処理演算子 $S[\vec{\phi}_q](x) \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$ を

$$S[\vec{\phi}_q](x) = \prod_{i=1}^q [e^{i\phi_i Z} V(x)] \quad (1.184)$$

で定める。

ここで定める量子信号処理演算子 $S[\vec{\phi}_q](x)$ は、位相反転 Z を含む y 軸周りの回転 $V(x)$ と z 軸周りの回転 $e^{i\phi_1 Z}$ の合成となっている。しかしながら以下の定理で見ると、回転による量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ と反射による量子信号処理演算子 $S[\vec{\phi}'_q](x)$ はその表現力は等価である。

Theorem 19. (回転と反射による量子信号処理の等価性)

任意の反転による量子信号処理演算子 $S[\vec{\phi}'_q](x)$ ($\vec{\phi}'_q \in \mathbb{R}^q$) に対して、その対角成分の重みが

$$R_{11}[\vec{\phi}_q](x) = S_{11}[\vec{\phi}'_q](x) \quad (1.185)$$

となるような、回転による量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ ($\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}^{q+1}$) が存在する。逆に、任意の $R[\vec{\phi}_q](x)$ に対しても上式を満たす $S[\vec{\phi}'_q](x)$ が常に存在する。

Proof. — Pauli 演算子の基本的な関係式を用いると反射演算子は

$$V(x) = Z e^{i \arccos(x) Y} = -i e^{i(\pi/4) Z} e^{i \arccos(x) X} e^{i(\pi/4) Z} \quad (1.186)$$

と表せるので、

$$W(x) = i e^{-i(\pi/4) Z} V(x) e^{-i(\pi/4) Z} \quad (1.187)$$

である。よって、回転演算子 $W(x)$ を用いる量子信号処理 $R[\vec{\phi}_q](x)$ を書き直すと、

$$\begin{aligned} R[\vec{\phi}_q](x) &= i^q e^{i\phi_0 Z} \prod_{i=1}^q \left[\left(e^{-i(\pi/4) Z} V(x) e^{-i(\pi/4) Z} \right) e^{i\phi_i Z} \right] \\ &= e^{i(\pi/2)q} e^{i(\phi_0 - \pi/4) Z} V(x) \prod_{i=1}^{q-1} \left[e^{i(\phi_i - \pi/2) Z} V(x) \right] e^{i(\phi_q - \pi/4) Z} \end{aligned} \quad (1.188)$$

と表せる。ここで、 $\vec{\phi}'_q \in \mathbb{R}^q$ を

$$\phi'_1 = \phi_0 + \phi_q + \left(q - \frac{1}{2} \right) \pi, \quad \phi'_i = \phi_{i-1} - \frac{\pi}{2} \quad (i = 2, 3, \dots, q) \quad (1.189)$$

によって定めると、上式は

$$R[\vec{\phi}_q](x) = e^{i(\pi/2)q(I-Z)} e^{-i(\phi_q - \pi/4) Z} S[\vec{\phi}'_q](x) e^{i(\phi_q - \pi/4) Z} \quad (1.190)$$

となり、11 成分を見ると $R_{11}[\vec{\phi}_q](x) = S_{11}[\vec{\phi}'_q](x)$ を満たす。故に、任意の回転による量子信号処理 $R[\vec{\phi}_q](x)$ に対して、同じ 11 成分を持つ $S[\vec{\phi}'_q](x)$ が存在する。逆の証明も同様に可能である。□

以上の帰結から、量子信号処理は回転による $R[\vec{\phi}_q](x)$ と反転による $S[\vec{\phi}'_q](x)$ とで、その対角成分の表現できる関数は変わらない。量子固有値変換/量子特異値変換では反転による対角成分 $S_{11}[\vec{\phi}'_q](x)$ に興味があるが、以降では慣例的に回転による $R[\vec{\phi}_q](x)$ に基づく定式化を行う。以降の定理は $S[\vec{\phi}'_q](x)$ でも全く同様のことが成立すると同時に、パラメータセットは $R[\vec{\phi}_q](x)$ を与える $\vec{\phi}_q$ を決定してから (1.189) 式に基づいて $S[\vec{\phi}'_q](x)$ を与える $\vec{\phi}'_q$ を決定すれば良い。

1.6.2 達成可能な複素多項式関数

回転による量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ に着目して、その行列成分の表現力を議論する。まず、低次の q に絞って単純な具体例から調べよう。愚直に 2×2 行列の積を定義から計算することで次のようになる。

- $q = 0$

$$R(x, \vec{\phi}_0) = e^{i\phi_0 Z} = \begin{pmatrix} e^{i\phi_0} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_0} \end{pmatrix} \quad (1.191)$$

- $q = 1$

$$\begin{aligned} R(x, \vec{\phi}_1) &= e^{i\phi_0 Z} W(x) e^{i\phi_1 Z} \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\phi_0} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x & i\sqrt{1-x^2} \\ i\sqrt{1-x^2} & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\phi_1} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{i(\phi_0+\phi_1)}x & ie^{i(\phi_0-\phi_1)}\sqrt{1-x^2} \\ ie^{-i(\phi_0-\phi_1)}\sqrt{1-x^2} & e^{-i(\phi_0+\phi_1)}x \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.192)$$

- $q = 2$

$$\begin{aligned} R(x, \vec{\phi}_2) &= R(x, \vec{\phi}_1) W(x) e^{i\phi_2 Z} \\ &= \begin{pmatrix} e^{i(\phi_0+\phi_2)}(2\cos\phi_1x^2 - e^{-i\phi_1}) & ie^{i(\phi_0-\phi_2)}2\cos\phi_1x\sqrt{1-x^2} \\ ie^{-i(\phi_0-\phi_2)}2\cos\phi_1x\sqrt{1-x^2} & e^{-i(\phi_0+\phi_2)}(2\cos\phi_1x^2 - e^{i\phi_1}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.193)$$

これらに共通して言えることは、いずれも複素多項式 $P(x), Q(x)$ を用いて

$$R[\vec{\phi}_q](x) = \begin{pmatrix} P(x) & iQ(x)\sqrt{1-x^2} \\ iQ^*(x)\sqrt{1-x^2} & P^*(x) \end{pmatrix} \quad (1.194)$$

の形で書ける。ただし、複素多項式関数 $A(x) = \sum_n a_n x^n$ ($a_n \in \mathbb{C}$) に対して複素共役な多項式関数 $A^*(x)$ を $A^*(x) = \sum_n a_n^* x^n$ で定めている。加えて、量子信号処理の次数 q に対応して多項式の次数も同じく変化している。上記の例では、多項式 $P(x)$ の次数は q と一致しており、多項式 $Q(x)$ は $q-1$ 次となっていることが分かる。パラメータ $\vec{\phi}_q$ を調整することで様々な多項式関数 $P(x), Q(x)$ を成分にもつ行列を生成できる一方で、任意の多項式関数が現れるわけではないこともわかる。例えば、 $q=2$ の対角成分 $P(x) = e^{i(\phi_0+\phi_2)}(2\cos\phi_1x^2 - e^{-i\phi_1})$ において、定数項は消せないのどのようパラメータを選んでも $P(x) = x^2$ とすることはできない。

さて、いくつかの例を通じて量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ が取り得る形の規則性がある程度分かった。一般の場合に関しては、次の定理によって特徴づけられる。

Theorem 20. (達成可能な複素多項式関数)

任意のパラメータ $\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}^{q+1}$ について、 q 次の量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ は

$$R[\vec{\phi}_q](x) = \begin{pmatrix} P(x) & iQ(x)\sqrt{1-x^2} \\ iQ^*(x)\sqrt{1-x^2} & P^*(x) \end{pmatrix} \quad (1.195)$$

の形で書けて、多項式関数 $P(x), Q(x)$ は次の性質を満たす。

〈20-a〉 $P(x)$ の次数は q 以下で、 $Q(x)$ の次数は $q-1$ 以下である。

〈20-b〉 $P(x), Q(x)$ の次数の偶奇は、 $q, q-1$ の偶奇をそれぞれ一致する。すなわち、

$$P(-x) = (-1)^q P(x), \quad Q(-x) = (-1)^{q-1} Q(x) \quad (1.196)$$

〈20-c〉 複素変数 $x \in \mathbb{C}$ に解析接続された多項式関数 $P(x), Q(x)$ が次の恒等式を満たす。

$$P(x)P^*(x) + (1-x^2)Q(x)Q^*(x) = 1, \quad \forall x \in \mathbb{C}. \quad (1.197)$$

逆に、〈20-a〉-〈20-c〉を満たす任意の多項式関数 $P(x), Q(x)$ に対して、あるパラメータ $\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}^{q+1}$ が存在して (1.195) 式を満たす量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ を構成できる。

Proof. — (\Rightarrow) 量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ が 〈20-a〉-〈20-c〉を満たす多項式関数 $P(x), Q(x)$ で (1.195) 式のように表現できることを、帰納法で示す。まず、 $q=0$ の時は定義より $P(x) = e^{i\phi_0}$, $Q(x) = 0$ であるので自明に 〈20-a〉-〈20-c〉を満たす。次に、ある $q \geq 0$ で $R[\vec{\phi}_q](x)$ に対して常に 〈20-a〉-〈20-c〉を満たす多項式関数 $P(x), Q(x)$ で (1.195) 式のように表現できると仮定しよう。このとき、 $q+1$ 次の量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_{q+1}](x)$ は

$$\begin{aligned} R[\vec{\phi}_{q+1}](x) &= R[\vec{\phi}_q](x)W(x)e^{i\phi_{q+1}Z} \\ &= \begin{pmatrix} P(x) & iQ(x)\sqrt{1-x^2} \\ iQ^*(x)\sqrt{1-x^2} & P^*(x) \end{pmatrix} W(x)e^{i\phi_{q+1}Z} \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\phi_{q+1}}\{xP(x) - (1-x^2)Q(x)\} & ie^{-i\phi_{q+1}}\{P(x) + xQ(x)\}\sqrt{1-x^2} \\ ie^{i\phi_{q+1}}\{P^*(x) + xQ^*(x)\}\sqrt{1-x^2} & e^{-i\phi_{q+1}}\{xP^*(x) - (1-x^2)Q^*(x)\} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.198)$$

と表現できる。新しい多項式 $\bar{P}(x), \bar{Q}(x)$ を

$$\bar{P}(x) = e^{i\phi_{q+1}}\{xP(x) - (1-x^2)Q(x)\}, \quad (1.199)$$

$$\bar{Q}(x) = e^{-i\phi_{q+1}}\{P(x) + xQ(x)\} \quad (1.200)$$

で定めると、これらは 〈20-a〉-〈20-c〉の全てを満たすことが確かめられる。実際、仮定より $P(x), Q(x)$ はそれぞれ $q, q-1$ 次以下なので、 $\bar{P}(x), \bar{Q}(x)$ は $q+1, q$ 次以下で 〈20-a〉を満たす。次数の偶奇性 〈20-b〉についても $P(x), Q(x)$ についての仮定より

$$\bar{P}(-x) = (-1)^{q+1}\bar{P}(x), \quad \bar{Q}(-x) = (-1)^q\bar{Q}(x) \quad (1.201)$$

である。〈20-c〉については、 $R(x, \vec{\phi}_{q+1})$ がユニタリーであることから $R[\vec{\phi}_q](x)^\dagger R[\vec{\phi}_q](x) = I$ の対角成分を比較することで、

$$\bar{P}(x)\bar{P}^*(x) + (1-x^2)\bar{Q}(x)\bar{Q}^*(x) = 1, \quad \forall x \in [-1, 1] \quad (1.202)$$

を得る。複素数 $x \in \mathbb{C}$ に解析接続することで恒等式として (20-c) を満たす。以上から、 $q+1$ 次の量子信号処理演算子は (20-a)-(20-c) を満たす多項式関数 $\bar{P}(x), \bar{Q}(x)$ を用いて

$$R[\vec{\phi}_{q+1}](x) = \begin{pmatrix} \bar{P}(x) & i\bar{Q}(x)\sqrt{1-x^2} \\ i\bar{Q}^*(x)\sqrt{1-x^2} & \bar{P}^*(x) \end{pmatrix} \quad (1.203)$$

となり、帰納的に “ \Rightarrow ” の命題の成立が示された。 \square

(\Leftarrow) 次数 q に対して (20-a)-(20-c) を満たす多項式関数 $P(x), Q(x)$ に対して、(1.195) 式を満たすようなパラメータ $\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}^{q+1}$ が存在することを帰納的に示す。まず、 $q=0$ の時、(20-a)-(20-c) を満たす多項式関数 $P(x), Q(x)$ は、

$$P(x) = e^{i\varphi}, \quad Q(x) = 0, \quad \varphi \in \mathbb{R} \quad (1.204)$$

のみである。このとき、 $\vec{\phi}_0 = (\varphi) \in \mathbb{R}$ とする量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_0](x)$ が上記の多項式関数を実現する。

次にある $q \geq 0$ で目的の命題が成立していると仮定して、次数 $q+1$ での成立を示す。次数 $q+1$ で (20-a)-(20-c) を満たす多項式関数の組 $\bar{P}(x), \bar{Q}(x)$ を考えよう。 $\bar{Q}(x)$ が恒等的にゼロの時、条件 (iii) より許される多項式関数 $\bar{P}(x)$ は $\bar{P}(x) = e^{i\varphi}$ ($\varphi \in \mathbb{R}$) である。このような状況は $\bar{P}(x)$ が偶関数より $q+1$ が偶数の時のみ許されており、多項式関数の組 $\bar{P}(x), \bar{Q}(x)$ を与えるパラメータ $\vec{\phi}_{q+1} \in \mathbb{R}^{q+2}$ は

$$\phi_0 = \varphi, \quad \phi_1 = -\phi_2 = \phi_3 = -\phi_4 = \dots = \phi_q = -\phi_{q+1} = \frac{\pi}{2}. \quad (1.205)$$

で構成できる。実際、この時の量子信号処理演算子は

$$\begin{aligned} R[\vec{\phi}_{q+1}](x) &= e^{i\varphi Z} \prod_{i=1}^{(q+1)/2} \left[e^{i \arccos(x) X} (iZ) e^{i \arccos(x) X} (-iZ) \right] \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.206)$$

となっている。一方で、 $\bar{Q}(x)$ が恒等的にゼロではないとき、 $\bar{Q}(x), \bar{Q}(x)$ の最高次数をそれぞれ $k' (\leq q+1), k (\leq q)$ として

$$\bar{P}(x) = \sum_{j=0}^{k'} a_j x^j, \quad \bar{Q}(x) = \sum_{j=0}^k b_j x^j, \quad b_k \neq 0 \quad (1.207)$$

と表せる。(iii) の成立より

$$\begin{aligned} 0 &= \bar{P}(x)\bar{P}^*(x) + (1-x^2)\bar{Q}(x)\bar{Q}^*(x) - 1 \\ &= \sum_{j,j'=0}^{k'} a_j a_j^* x^{j+j'} + (1-x^2) \sum_{j,j'=0}^k b_j b_j^* x^{j+j'} - 1 \end{aligned} \quad (1.208)$$

が恒等的に成立しなければならず、 $2k$ 次以上の係数を比較すると $k' = k+1, |p_{k+1}| = |q_k|$ が成立していることが言える。このとき、

$$e^{2i\varphi'} = \frac{p_{k+1}}{q_k} \in \text{U}(1) \quad (1.209)$$

によって実数 $\varphi' \in \mathbb{R}$ を定めることができる。新しい多項式の組 $\tilde{P}(x), \tilde{Q}(x)$ を次の関係式を満たすように定めよう。

$$\begin{pmatrix} \tilde{P}(x) & i\tilde{Q}(x)\sqrt{1-x^2} \\ i\tilde{Q}^*(x)\sqrt{1-x^2} & \tilde{P}^*(x) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \bar{P}(x) & i\bar{Q}(x)\sqrt{1-x^2} \\ i\bar{Q}^*(x)\sqrt{1-x^2} & \bar{P}^*(x) \end{pmatrix} e^{-i\varphi' Z} [W(x)]^\dagger. \quad (1.210)$$

右辺の行列成分を具体的に計算すると、

$$\tilde{P}(x) = e^{-i\varphi'} \{x\bar{P}(x) + e^{2i\varphi'}(1-x^2)\bar{Q}(x)\}, \quad (1.211)$$

$$\tilde{Q}(x) = e^{-i\varphi'} \{e^{2i\varphi'}x\bar{Q}(x) - \bar{P}(x)\} \quad (1.212)$$

のように表される。このように定義された多項式 $\tilde{P}(x), \tilde{Q}(x)$ は次数 q に対する条件 (20-a)-(20-c) を満たしていることが確かめられる。

(20-a) $\tilde{P}(x)$ の x^{k+2} の係数は $e^{2i\varphi'} = p_{k+1}/q_k$ の定義から

$$e^{-i\varphi'}(p_{k+1} - e^{2i\varphi'}q_k) = 0 \quad (1.213)$$

となって消える。 $\bar{P}(x), \bar{Q}(x)$ の偶奇性より $\tilde{P}(x)$ は x^{k+1} の項を持たず k 次以下である。 $k \leq q$ より $\tilde{P}(x)$ は q 次以下である。同様に $\tilde{Q}(x)$ は $q-1$ 次以下である。

(20-b) $\bar{P}(x), \bar{Q}(x)$ の偶奇性 $\bar{P}(-x) = (-1)^{q+1}\bar{P}(x)$, $\bar{Q}(-x) = (-1)^q\bar{Q}(x)$ より直ちに、

$$\tilde{P}(-x) = (-1)^q\tilde{P}(x), \quad \tilde{Q}(-x) = (-1)^{q-1}\tilde{Q}(x) \quad (1.214)$$

が成立する。

(20-c) (1.210) 式の定義で、右辺の各構成要素はユニタリー行列であるのでその積である左辺の行列もユニタリーである。したがって、

$$\tilde{P}(x)\tilde{P}^*(x) + (1-x^2)\tilde{Q}(x)\tilde{Q}^*(x) = 1 \quad (1.215)$$

が恒等的に成立する。

帰納法の仮定より、次数 q に対して (20-a)-(20-c) を満たす多項式関数 $\tilde{P}(x), \tilde{Q}(x)$ には、あるパラメータ $\vec{\phi}'_q \in \mathbb{R}^{q+1}$ があって

$$R[\vec{\phi}'_q](x) = \begin{pmatrix} \tilde{P}(x) & i\tilde{Q}(x)\sqrt{1-x^2} \\ i\tilde{Q}^*(x)\sqrt{1-x^2} & \tilde{P}^*(x) \end{pmatrix} \quad (1.216)$$

となるように q 次の量子信号処理演算子を構成できる。今、パラメータ $\vec{\phi}_{q+1} \in \mathbb{R}^{q+2}$ を $\vec{\phi}_{q+1} = (\vec{\phi}'_q, \varphi')$ に取ると、(1.210) 式より 次数 $q+1$ で (20-a)-(20-c) を満たす多項式関数 $\bar{P}(x), \bar{Q}(x)$ に対して

$$R[\vec{\phi}_{q+1}](x) = \begin{pmatrix} \bar{P}(x) & i\bar{Q}(x)\sqrt{1-x^2} \\ i\bar{Q}^*(x)\sqrt{1-x^2} & \bar{P}^*(x) \end{pmatrix} \quad (1.217)$$

となる次数 $q+1$ の量子信号処理演算子が与えられる。帰納法から、“ \Rightarrow ” の命題が真であることが示せた。□

この定理の証明は、条件 (20-a)-(20-c) を満たす多項式関数 $P(x), Q(x)$ に対して、それを実現する量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ のパラメータ $\vec{\Phi}_q$ の構成方法も与えている。具体的には、 $P(x), Q(x)$ が

$$P(x) = \sum_{j=0}^q a_j x^j, \quad Q(x) = \sum_{j=0}^{q-1} b_j x^j \quad (1.218)$$

のように多項式で展開されているとしよう。この時のパラメータ $\vec{\Phi}_q$ の構成方法は次のとおりである。

1. 条件 (20-a)-(20-c) を満たす時、 $|a_q| = |b_{q-1}|$ が成立しており、 $e^{2i\phi_q} = a_q/b_{q-1}$ によって実数 ϕ_q を定める。

2. (1.210) 式に従い

$$\tilde{P}(x) = e^{-i\phi_p} \{xP(x) + e^{2i\phi_p}(1-x^2)Q(x)\}, \quad (1.219)$$

$$\tilde{Q}(x) = e^{-i\phi_p} \{e^{2i\phi_p}xQ(x) - P(x)\} \quad (1.220)$$

で与えられる多項式関数 $\tilde{P}(x), \tilde{Q}(x)$ を計算する。これらを多項式展開すると、

$$P(x) = \sum_{j=0}^{q-1} \tilde{a}_j x^j, \quad Q(x) = \sum_{j=0}^{q-2} \tilde{b}_j x^j, \quad |\tilde{a}_{q-1}| = |\tilde{b}_{q-2}| \quad (1.221)$$

と書ける。パラメータ ϕ_{q-1} を $e^{2i\phi_{q-1}} = \tilde{a}_{q-1}/\tilde{b}_{q-2}$ で定める。

3. ステップ 2 を $\tilde{Q}(x) \equiv 0$ となるまで繰り返す。残りのパラメータは (1.205) 式に基づいて決定する。

パラメータ $\vec{\phi}_q$ の決定は完全に古典計算で行われる。多項式 $P(x)$ の次数が k の時、ステップ 2 における計算時間は多項式 $\tilde{P}(x), \tilde{Q}(x)$ を計算するために必要な $\mathcal{O}(k)$ である。その計算を最大で k が q から 0 となるまで繰り返すので、合計で必要な計算時間は $\mathcal{O}(q^2)$ となる。

Theorem 20 は、その条件 (20-a)-(20-c) を全て満たす複素多項式関数の組 $P(x), Q(x)$ が与えられたときにその量子信号処理演算子の存在性とパラメータ決定法を保証するものとなっている。しかし、量子信号処理においては量子固有値変換/量子特異値変換では対角成分の $P(x)$ にのみ興味があり、 $P(x)$ のみが与えられときにそれが量子信号処理で実現できるかが重要な問題である。これは、以下の定理で特徴付けられる。

Theorem 21. (達成可能な対角成分の複素多項式関数)

q 次の量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$, 多項式関数 $P(x)$ に対して、

$$R_{11}[\vec{\phi}_q](x) = P(x) \quad (1.222)$$

となるパラメータセット $\vec{\phi}_q \in \mathbb{R}^{q+1}$ が存在するための必要十分条件は $P(x)$ が以下の全てを満たすことである。

(21-a) $P(x)$ は次数 q 以下の x の複素多項式関数である。

(21-b) $P(-x) = (-1)^q P(x), \forall x$

(21-c) $|P(x)| \leq 1 (\forall x \in [-1, 1])$ かつ $|P(x)| \geq 1 (\forall x \in \mathbb{R} \setminus [-1, 1])$

(21-d) [q が偶数の時のみ] $P(ix)P^*(ix) \geq 1 (\forall x \in \mathbb{R})$

Proof. — (\Rightarrow) $R_{11}[\vec{\phi}_q](x) = P(x)$ となるパラメータセット $\vec{\phi}_q$ が存在するとき、 $R[\vec{\phi}_q](x)$ の行列成分は (1.195) 式のように書いて $P(x), Q(x)$ は Theorem 20 の条件 (20-a)-(20-c) を満たす。条件 (20-a), (20-b) から $P(x)$ が条件 (21-a), (21-b) を満たすことは明らかである。条件 (21-c) に関しては $x \in \mathbb{R}$ のとき $P^*(x) = (P(x))^*, Q^*(x) = (Q(x))^*$ であるので、条件 (20-c) を用いると

$$|P(x)| = \sqrt{1 - (1 - x^2)|Q(x)|^2} \begin{cases} \leq 1 & (|x| \leq 1) \\ \geq 1 & (|x| \geq 1) \end{cases} \quad (1.223)$$

であることから導かれる。条件 (21-d) に関して、同じく条件 (20-c) より

$$P(ix)P^*(ix) = 1 - (1 + x^2)Q(ix)Q^*(ix) \quad (1.224)$$

が成立する。次数 q が偶数であるとき条件 (20-b) より奇関数である $Q(x)$ は $Q^*(ix) = -(Q(ix))^*$ を満たす。故に、 $\forall x \in \mathbb{R}$ で

$$P(ix)P^*(ix) = 1 + (1 + x^2)|Q(ix)|^2 \geq 1 \quad (1.225)$$

が成立する。□

(\Leftarrow) 多項式関数 $P(x)$ が条件 (21-a)-(21-d) を満たすとき、多項式 $P(x), Q(x)$ が条件 (20-a)-(20-c) を満たすように $Q(x)$ を構成できることを示せば良い。次数 $q = 0$ の場合において条件 (21-a)-(21-d) を満たす関数は $P(x) = e^{i\phi}$ (ϕ は定数) のみであるが、 $Q(x) = 0$ を取れば条件 (20-a)-(20-c) を満たす。よって以降では $q \geq 1$ を考える。条件 (21-a) では $P(x)$ の次数は q 以下であるが、まず初めに次数がちょうど q の場合を考える。

条件 (21-c) より $|P(\pm 1)| = 1$ である。多項式関数 $1 - P(x)P^*(x)$ は x^2 についての q 次の実多項式関数であり $x^2 = 1$ を根を持つことから

$$1 - P(x)P^*(x) = \alpha(1 - x^2) \prod_{i=1}^{q-1} (x^2 - s_i), \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad s_i \in \mathbb{C} \quad (1.226)$$

と因数分解される。実多項式関数であることから、残りの (重複も許した) $q - 1$ 個の根 $\{s_i\}$ には複素共役のペアが現れる。上式で最高次の x^{2q} の係数は負であるので、 $\alpha > 0$ である。まず、次数 q が奇数である場合を考えよう。 $q - 1$ 次の多項式関数 $Q(x)$ を

$$Q(x) = \sqrt{\alpha} \prod_{i: \text{Im}(s_i) \geq 0} (x^2 - s_i) \quad (1.227)$$

で定めると、定義から $P(x), Q(x)$ が条件 (20-a)-(20-c) を満たすことは明らかである。

次に q が偶数の場合を考える。このとき、(1.226) 式による $1 - P(x)P^*(x)$ の $x^2 = 1$ 以外の根は奇数である $q - 1$ 個存在するが、複素共役のペアで現れるため実数の根については次のことが言える。

$$\begin{cases} \text{偶数次の重解である} & (s_i \in (1, \infty)) \\ \text{存在しない} & (s_i \in (0, 1]) \\ \text{合計で奇数個存在する} & (s_i \in (-\infty, 0]) \end{cases} \quad (1.228)$$

上段の $s_i \in (1, \infty)$, $(s_i \in (0, 1])$ に関しては条件 (21-b) により関数 $1 - P(x)P^*(x)$ が半直線 $[0, \infty)$ において $x^2 = 1$ でしか符号反転しないことに由来する。下段の $s_i \in (-\infty, 0]$ は、残りの実数の根が奇数個であることに由来する。また、 q が偶数であるときに条件 (21-d) から

$$\begin{aligned} 0 &\geq 1 - P(ix)P^*(ix) \\ &= (1 - (ix)^2)Q(ix)Q^*(ix) \\ &= \alpha(1 - (ix)^2) \prod_{j=1}^{q-1} ((ix)^2 - s_j) \\ &= -\alpha(1 + x^2) \prod_{j=1}^{q-1} (x^2 + s_j) \end{aligned} \quad (1.229)$$

が $\forall x \in \mathbb{R}$ で成立する。故に、

$$\prod_{i; s_i \in (-\infty, 0]} (x^2 + s_i) \prod_{i; s_i \in (1, \infty)) (x^2 + s_i) \prod_{i; \text{Im}(s_i) > 0} (x^2 + s_i)(x^2 + s_i^*) \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (1.230)$$

である。 $(x^2 + s_i)(x^2 + s_i^*) = x^4 + 2x^2 \text{Re}(s_i) + |s_i|^2 \geq (x^2 - |s_i|)^2 \geq 0$ であるから、上式が恒等的に成立するとき $s_i \in (-\infty, 0]$ の根は $s = 0$ のみである。以上から、多項式関数 $1 - P(x)P^*(x)$ は

$$1 - P(x)P^*(x) = \alpha(1 - x^2)(x^2)^{2q'+1} \prod_{i; s_i \in (-\infty, 0)} (x^2 - s_i)^{2q_i} \prod_{i; \text{Im}(s_i) > 0} (x^2 - s_i)(x^2 - s_i^*) \quad (1.231)$$

(ただし、 $q', q_i \in \mathbb{Z}_+$) のように因数分解され、これから多項式関数 $Q(x)$ を

$$Q(x) = \sqrt{\alpha} x^{2q'+1} \prod_{i; s_i \in (1, \infty)) (x^2 - s_i) \prod_{i; \text{Im}(s_i) > 0} (x^2 - s_i) \quad (1.232)$$

によって定める。このとき、多項式関数の組 $P(x), Q(x)$ の組が条件 (20-a)-(20-c) を満たすことは明らかである。

最後に、今まで $P(x)$ の次数が量子信号処理の次数 q よりも小さい場合を考える。このとき、 $P(x)$ の次数 q_p は q よりも小さく偶奇は q と同じである。上記までで示した事実により、 $P(x)$ を実現する q_p 次の量子信号処理の演算子 $R[\vec{\phi}_{q_p}](x)$ は存在する。また、 $q - q_p > 0$ は偶数なので (1.205) 式で $\varphi = 0$ とするパラメータの選択によって $R[\vec{\phi}_{q-q_p}](x) = I$ となる量子信号処理演算子も存在する。 $R[\vec{\phi}_{q_p}](x)R[\vec{\phi}_{q-q_p}](x) = I$ が、 $P(x)$ を実現する q 次の量子信号処理演算子を与える。以上から、 $P(x)$ の次数が量子信号処理の次数 q よりも小さい場合も同様のことが言える。 \square

1.6.3 達成可能な実多項式関数

次に、補助量子ビットを追加で導入することで実現可能な実多項式関数のクラスを議論する。具体的には (1.115) 式のように、多項式関数 $f(x), f^*(x)$ を実現するパラメータセット $\vec{\phi}_q, \vec{\phi}'_q$ に対して、

$$O_{\text{Re}[f](H)} = (\text{Had} \otimes I) \left(|0\rangle\langle 0| \otimes \text{QET}[\vec{\phi}'_q] + |1\rangle\langle 1| \otimes \text{QET}[\vec{\phi}_q] \right) (\text{Had} \otimes I) \quad (1.233)$$

によって実多項式関数 $\text{Re}[f](x)$ の量子固有値変換を実装できる。逆に目的の実多項式関数 $f_R(x)$ が上記の方法で実現できるかどうかは、 $\text{Re}[f](x) = f_R(x)$ となるような量子信号処理で実現可能な多項式関数 $f(x)$ が存在するかどうかで決まる。このような関数 $f_R(x)$ の特徴づけは以下の定理によって与えられる。

Theorem 22. (実現可能な実多項式関数)

実多項式関数 $P_R(x)$ に対して、

$$R_{11}[\vec{\phi}_q](x) = P(x), \quad \text{Re}[P](x) = P_R(x) \quad (1.234)$$

を満たす q 次の量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ が存在するための必要十分条件は、

(22-a) $P_R(x)$ の次数は q 次以下

(22-b) $P_R(-x) = (-1)^q P_R(x)$ ($\forall x \in \mathbb{C}$)

(22-c) $|P_R(x)| \leq 1$ ($\forall x \in [-1, 1]$)

の全てを満たすことである。

Proof. — (\Rightarrow) 条件 (22-a), (22-b) の成立は、多項式関数 $P(x)$ が定理 20 の条件 (20-a), (20-b) を満たすことと $\operatorname{Re}[P](x) = P_{\mathbb{R}}(x)$ の関係から直ちに導かれる。条件 (20-c) より、 $x \in [-1, 1]$ の時

$$|P_{\mathbb{R}}(x)|^2 \leq |P(x)|^2 = 1 - (1 - x^2)|Q(x)|^2 \leq 1 \quad (1.235)$$

であるので、条件 (22-c) も成立する。

(\Leftarrow) 条件 (22-a)-(22-c) を満たす実多項式関数 $P_{\mathbb{R}}(x)$ に対して

$$A(x) = 1 - \{P_{\mathbb{R}}(x)\}^2 \quad (1.236)$$

を定め、 $A(x)$ の根の集合を $S(A) = \{s \in \mathbb{C}; A(s) = 0\}$ と表す。この時 $A(x)$ は x^2 について q 次以下の実多項式関数となるので、 $s \in S(A)$ ならば $-s, s^*, -s^* \in S(A)$ である。多項式 $A(x)$ を因数分解したいが、根の対称性により複素平面の四半面さえ考えれば十分なので、集合 $S(A)$ を次のように分割する。

$$S_0 = \{s \in S(A); s = 0\}, \quad (1.237)$$

$$S_{01} = \{s \in S(A); 0 < s < 1\}, \quad (1.238)$$

$$S_{1\infty} = \{s \in S(A); 1 \leq s < \infty\}, \quad (1.239)$$

$$S_I = \{s \in S(A); \operatorname{Re}(s) = 0, \operatorname{Im}(s) > 0\}, \quad (1.240)$$

$$S_C = \{s \in S(A); \operatorname{Re}(s) > 0, \operatorname{Im}(s) > 0\}. \quad (1.241)$$

ただし、 $S(A) = S_0 \cup S_{01} \cup S_{1\infty} \cup S_I \cup S_C$ であり、重解であるときは要素を重複して含むものとする。

多項式 $A(x)$ を因数分解すると、各領域で根 s に対応する $-s, s^*, -s^*$ の根の存在を考えて

$$A(x) = \alpha x^{|S_0|} \prod_{s \in S_{01}} (x^2 - s^2) \prod_{s \in S_{1\infty}} (s^2 - x^2) \prod_{s \in S_I} (x^2 + |s|^2) \prod_{s \in S_C} |x^2 - s^2|^2, \quad \alpha \in \mathbb{R} \quad (1.242)$$

という形にかける。条件 (22-c) と $A(x)$ の定義式 (1.236) より $x \in [-1, 1]$ では $A(x) \geq 0$ なので、 $|S_0|, |S_{01}|$ は共に偶数でなかつ、 S_{01} の各解 s は偶数次の重解でなければならない。また実数 $\alpha \geq 0$ である。次に、 $A(x)$ 中で $S_{1\infty}, S_I, S_C$ からくる因子を考えると、次のように式変形できる。

$$\begin{aligned} S_{1\infty}; \quad s^2 - x^2 &= (s^2 - 1)x + s^2(1 - x^2) \\ &= A_s^{1\infty}(x)A_s^{1\infty*}(x), \end{aligned} \quad (1.243)$$

$$A_s^{1\infty}(x) = \sqrt{s^2 - 1}x + is\sqrt{1 - x^2}, \quad (1.244)$$

$$\begin{aligned} S_I; \quad x^2 + |s|^2 &= (|s|^2 + 1)x^2 + |s|^2(1 - x^2) \\ &= A_s^I(x)A_s^{I*}(x), \end{aligned} \quad (1.245)$$

$$A_s^I = \sqrt{|s|^2 + 1}x + i|s|\sqrt{1 - x^2}. \quad (1.246)$$

解 $s \in S_C$ に対しては、

$$c_s = |s|^2 + \sqrt{2(\{\operatorname{Re}(s)\}^2 + 1)\{\operatorname{Im}(s)\}^2 + (\{\operatorname{Re}(s)\}^2 - 1)^2 + \{\operatorname{Im}(s)\}^4} \geq 1 \quad (1.247)$$

として、

$$S_C; \quad |x^2 - s^2|^2 = A_s^C(x)A_s^{C*}(x), \quad (1.248)$$

$$A_s^C(x) = (c_s x^2 - |s|^2) + i(\sqrt{c_s^2 - 1}x)\sqrt{1 - x^2} \quad (1.249)$$

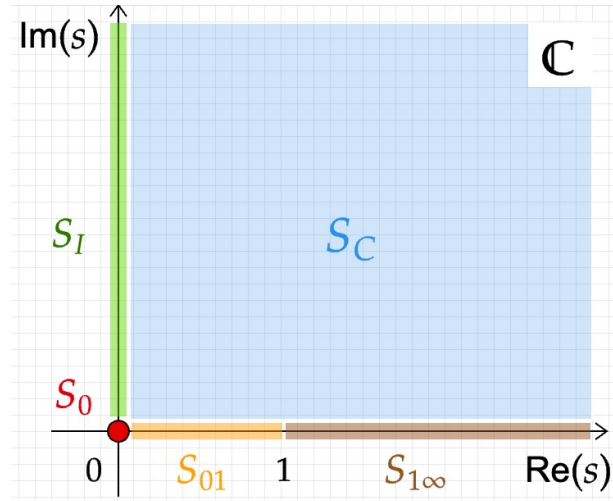


図 1.5: Caption

と分解できる。これらの分解を用いると、多項式 $A(x)$ を次のように書き直すことが可能である。

$$A(x) = W(x)W^*(x), \quad W(x) = \sqrt{\alpha}x^{|S_0|/2} \prod_{s \in S_{01}} \sqrt{x^2 - s^2} \prod_{s \in S_{1\infty}} A_s^{1\infty}(x) \prod_{s \in S_I} A_s^I(x) \prod_{s \in S_C} A_s^C(x). \quad (1.250)$$

多項式関数 $W(x)$ の積を構成する各要素は全て

- $B(x) + iC(x)\sqrt{1-x^2}$ [$B(x), C(x)$ は実多項式関数] という形をしている
- $B(x), C(x)$ は、偶奇が相異なり、 $B(x)$ の次数は $C(x)$ の次数より大きい

となっていることが分かる。ゆえにその積である $W(x)$ も $W(x) = B(x) + iC(x)\sqrt{1-x^2}$ [$B(x), C(x)$ は偶奇が相異なる多項式関数] という形で表せる。 $A(x) = 1 - \{P_R(x)\}^2$ の定義を用いると、

$$1 = \{P_R(x)\}^2 + W(x)W^*(x) = (\{P_R(x)\}^2 + \{B(x)\}^2) + (1-x^2)\{C(x)\}^2 \quad (1.251)$$

である。複素多項式関数 $P(x), Q(x)$ の組を $P(x) = P_R(x) + iB(x)$, $Q(x) = C(x)$ によって定めると、 $\text{Re}[P](x) = P_R(x)$ を満たし、なおかつ上式より条件 (20-c) を満たす。

さて、最後に $P(x) = P_R(x) + iB(x)$, $Q(x) = C(x)$ で構成された多項式関数の組が条件 (20-a), (20-b) を満たすことを示せば良い。条件 (7-a) に関しては、(1.250) 式の $W(x)$ の展開から $B(x)$ が q 次以下、 $C(x)$ が $q-1$ 次以下であることから導かれる。条件 (7-b) に関して、 $B(x)$ の偶奇が q の偶奇と異なると仮定すると、その時 $B(x), C(x)$ はそれぞれ $q-1, q-2$ 次以下である。このような場合、

$$\tilde{W}(x) = W(x)\{x + i\sqrt{1-x^2}\} = \tilde{B}(x) + i\tilde{C}(x)\sqrt{1-x^2} \quad (1.252)$$

と置き直すと、 $W(x)W^*(x) = \tilde{W}(x)\tilde{W}^*(x)$ である。また、 $\tilde{B}(x), \tilde{C}(x)$ はそれぞれ $q, q-1$ 次以下で、その偶奇は $q, q-1$ と一致する。以上から、 $B(x), C(x)$ が条件 (7-b) を満たさないような $P(x), Q(x)$ の組を与えるような場合でも、 $P(x) = P_R(x) + i\tilde{B}(x)$, $Q(x) = \tilde{C}(x)$ と再定義すれば条件 (7-b) を満たすようにできる。以上から命題は示された。□

以上の定理から、望みの実多項式関数 $P_R(x)$ が奇関数または偶関数で、 $x \in [-1, 1]$ で $|P(x)| \leq 1$ を満たしてさえいれば、常に量子信号処理で実現することができる。特に後者の条件に関しては、

$P_R(x) \rightarrow P_R(x) / \sup_{x \in [-1,1]} (|P_R(x)|)$ という規格化を施せば同じ関数形をいつでも達成できるため、非常に広いクラスの関数形を量子信号処理で実現できることになる。また、上記の証明法は実現したい実多項式関数 $P_R(x)$ に対して、それを実際に量子信号処理で実現するユニタリーゲートの構成方法も与えている。以下にその手順をまとめる。

1. 実現したい q 次実多項式関数 $P_R(x)$ に対して、 $2q$ 次方程式 $A(x) = 1 - \{P_R(x)\}^2 = 0$ を解く。
2. 方程式の解に基づいて $A(x)$ を因数分解し、(1.250) 式から $A(x) = W(x)W^*(x)$ なる $W(x)$ を決定する。この時、 $P_R(x) = \text{Re}[P](x)$ なる量子信号処理で実現可能な多項式関数の組 $P(x), Q(x)$ を構成できる。
3. Theorem 20 の手順に従って、 $P(x), Q(x)$ を実現する量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x)$ のパラメータセット $\vec{\phi}_q$ を決定する。
4. 量子信号処理演算子 $R[\vec{\phi}_q](x), R[\vec{\phi}_q](x)^\dagger$ を1回ずつと補助量子ビットを利用することで、実多項式関数 $P_R(x)$ を実現する $\bar{R}[\vec{\phi}_q](x)$ [(1.233) 式参照] を用意できる。

実多項式関数 $P_R(x)$ を実現するための $\bar{R}[\vec{\phi}_q](x)$ の構成は完全に古典計算によって行うことができる。具体的には、1ステップ目においては数値的に $\mathcal{O}(q^3)$ の計算時間で達成できる。2ステップ目は、高々式の展開しか行わないので、 $\mathcal{O}(q)$ の計算時間で可能である。3ステップ目は、Theorem 20 で議論したようにその計算時間は $\mathcal{O}(q^2)$ である。故に、 $\bar{R}[\vec{\phi}_q](x)$ を決定するまでのプロセスに必要な古典計算の計算時間は高々 $\mathcal{O}(q^3)$ である。なお、原理的にはこのように古典計算で効率よくパラメータ決定ができるが、現実問題としてステップ1で $\mathcal{O}(q)$ 次多項式の根を全て計算することは数値的に不安定であることが知られる。それ故に、数値最適化などを利用した高速かつ正確なパラメータ計算手法の改良も重要な課題となっている [Haa19, CDG⁺20, DMWL21, WDL22]。

References

- [BGB⁺18] Ryan Babbush, Craig Gidney, Dominic W. Berry, Nathan Wiebe, Jarrod McClean, Alexandru Paler, Austin Fowler, and Hartmut Neven. Encoding electronic spectra in quantum circuits with linear t complexity. *Phys. Rev. X*, 8:041015, Oct 2018.
- [CDG⁺20] Rui Chao, Dawei Ding, Andras Gilyen, Cupjin Huang, and Mario Szegedy. Finding Angles for Quantum Signal Processing with Machine Precision. March 2020.
- [DMWL21] Yulong Dong, Xiang Meng, K Birgitta Whaley, and Lin Lin. Efficient phase-factor evaluation in quantum signal processing. *Phys. Rev. A*, 103(4):042419, April 2021.
- [Gro97] Lov K. Grover. Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack. *Phys. Rev. Lett.*, 79:325–328, Jul 1997.
- [GSLW19] András Gilyén, Yuan Su, Guang Hao Low, and Nathan Wiebe. Quantum singular value transformation and beyond: exponential improvements for quantum matrix arithmetics. In *Proceedings of the 51st Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*, STOC 2019, pages 193–204, New York, NY, USA, June 2019. Association for Computing Machinery.
- [Haa19] Jeongwan Haah. Product decomposition of periodic functions in quantum signal processing. *Quantum*, 3(190):190, October 2019.
- [LC17] Guang Hao Low and Isaac L Chuang. Optimal Hamiltonian Simulation by Quantum Signal Processing. *Phys. Rev. Lett.*, 118(1):010501, January 2017.
- [LC19] Guang Hao Low and Isaac L Chuang. Hamiltonian simulation by qubitization. *Quantum*, 3(163):163, July 2019.
- [MRTC21] John M Martyn, Zane M Rossi, Andrew K Tan, and Isaac L Chuang. Grand Unification of Quantum Algorithms. *PRX Quantum*, 2(4):040203, December 2021.
- [VC05] L. M. K. Vandersypen and I. L. Chuang. Nmr techniques for quantum control and computation. *Rev. Mod. Phys.*, 76:1037–1069, Jan 2005.
- [WDL22] Jiasu Wang, Yulong Dong, and Lin Lin. On the energy landscape of symmetric quantum signal processing. *Quantum*, 6:850, 2022.
- [Wim94] S Wimperis. Broadband, narrowband, and passband composite pulses for use in advanced NMR experiments. *J. Magn. Reson. A*, 109(2):221–231, August 1994.