

大規模量子計算機の実用化における統計的課題

大阪大学大学院 基礎工学研究科 杉山 太香典

Takanori Sugiyama

Graduate School of Engineering Science, Osaka University

概要

量子計算機とは量子系の性質を積極的に利用して計算を行う装置の1種である。量子計算機を用いることにより、様々な問題の解を既存の計算機よりも高速に求められることが理論的に示されている。量子計算機の実用化のためには、量子誤り訂正符号とよばれるエラー対策方法を導入し、その上でシステムの大規模化と演算のさらなる高精度化が必要となる。実装デバイスの演算精度を評価する手法として、量子トモグラフィやRandomized Benchmarkingなど様々な統計的手法が提案され実験でも利用されている。しかしながら、現在提案されているどの手法にも長所と短所があり、量子誤り訂正に利用される演算の精度評価手法としてはどれも不十分である。本稿では、精度評価に利用される統計的手法の一つである量子トモグラフィの基本事項と課題、そして課題解決に向けた近年の試みについて解説する。

キーワード：量子計算機、量子トモグラフィ

1 序

量子計算機とは、量子系の性質を積極的に利用して計算を行う装置の1種であり、素因数分解 [1] や量子多体系のシミュレーション [2, 3, 4] を含む様々な問題を既存の計算機よりも高速に解けることが理論的に示されている [5]。そのような高速な計算を実現するために、世界各国の大学・研究所や Google・IBM・Microsoft などの企業で量子計算機の実用化に向けた研究が進められている。量子系はそのままでは環境系の影響（エラー）を受けやすく、計算のリソースとなるコヒーレンスを容易に失ってしまう。この問題を解決するために、量子計算機では量子誤り訂正 [6, 7, 8] とよばれるエラー対策方法を導入する。量子誤り訂正の導入により、量子計算機の計算システムは、物理層と論理層、それらをつなぐ誤り訂正層、そして量子アルゴリズム層という4つの階層からなる。物理層はさらに物理量子ビット層と物理演算層からなる。物理量子ビット層では、超伝導量子ビット・半

導体量子ドット・トラップされたイオン等の量子系を利用し、物理量子ビットと呼ばれる擬似的な2準位系を構成する。物理演算層では、マイクロ波パルスや磁場・電場と物理量子ビットとの相互作用を制御することにより、状態準備・ゲート演算・測定などの物理演算を行う。誤り訂正層では、量子誤り訂正と呼ばれる高度な制御手法を導入することにより、物理エラーの論理層への悪影響を大幅に削減することができる。論理層は論理量子ビット層と論理演算層から構成される。論理量子ビットでは、量子誤り訂正符号の手法に従い、多数の物理量子ビットから論理量子ビットとよばれる擬似的な2準位系を構成する。論理演算層では量子誤り訂正によって高精度化された論理演算が実行される。量子アルゴリズム層では論理量子ビットに適切な順番で論理演算を実行していくことにより量子アルゴリズムが実行される。

現在、量子計算機の開発は誤り訂正層を通して多数の物理量子ビットから1つの論理量子ビットを実装する段階に入りつつある。これまで様々な量子誤り訂正符号 [6, 7, 8] が提案されており、Google、IBM、デルフト工科大などの主要な実験グループは現在、2次元表面符号 [9, 10] と呼ばれる量子誤り訂正符号の実装に取り組んでいる。実装が最も進んでいる超伝導量子ビット系で2015年までに報告されている物理量子ビット数は4 (IBM [11])、5 (デルフト工科大 [12], Google [13])、9 (Google [14]) と少数であり、実用に耐えうる量子ビット数には程遠い。また、これらの実験では2次元表面符号の部分的な実装に留まっているため、現在は2次元表面符号の完全な実装を目標に開発が進められている [15]。実用に耐えうる量子計算機の実装には量子誤り訂正符号の実装に加えて大規模化 (=量子ビット数を大幅に増加する) と物理演算のさらなる高精度化が必要不可欠であることから、アメリカ [16]・ヨーロッパ [17]・オーストラリア [18] などで大規模化可能なアーキテクチャに基づいて量子誤り訂正を実行するデバイスの開発を目標とした巨額のプロジェクトが始動している。

量子計算機開発においては、物理演算・論理演算の精度を評価する手法や、試作機が既存の計算機を超える計算能力を持つかどうかを検証する手法が必要となる。量子系への測定の結果は確率的に得られるため、このような精度評価や検証には統計的な手法が利用される。本稿では、物理演算の精度を評価する手法の一つである量子トモグラフィ [19] について、基本事項と現在抱える課題、そしてその解決の試みについて説明する。

2 量子ビットと量子演算

量子計算機での計算は、複数の量子ビットに量子演算を適切な順番で実行することによって達成される。本節では量子ビットと量子演算の数学的記述 [20] について説明する。

2.1 量子力学

量子系はヒルベルト空間で記述される。本稿では有限次元のヒルベルト空間で記述される量子系のみ考える。複数の量子系から成る系は構成する量子系を記述するヒルベルト空間のテンソル積で記述される。例えば、量子計算機の最小構成要素である量子ビット (quantum bit, qubit) は $\mathbb{C}^2$ によって記述され、量子ビットが N 個ある系は $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ によって記述される。固有値が非負で総和が1となるエルミート行列を密度行列 (density matrix) とよぶ。ある量子系がヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ で記述されると、その量子系の状態は $\mathcal{H}$ 上の密度行列によって記述される。特に、ランク1の密度行列によって記述される量子状態を純粋状態と呼ぶ。ヒルベルト空間の次元を d としたとき、一般に密度行列は $d^2 - 1$ 、純粋状態は $2d - 1$ 個の自由度を持つ。量子ビットが N 個ある系では $d = 2^N$ であるから、密度行列を記述するパラメータ数は $4^N - 1$ と N に関して指数関数的に増加する。密度行列のパラメータ付けには様々な方法が知られている。量子ビットが1個の場合は、ブロッホベクトル表示と呼ばれる以下のパラメータ付けがよく利用される。

$$\rho(s) = \frac{1}{2} \left(I + \sum_{\alpha=1}^3 s_{\alpha} \sigma_{\alpha} \right). \quad (1)$$

パラメタ $\mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3)^T \in \mathbb{R}^3$ はブロッホベクトルとよばれ、 ρ とは以下の関係がある。

$$s_{\alpha} = \text{Tr}[\rho \sigma_{\alpha}], \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (2)$$

ここで $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ はパウリ行列とよばれる 2×2 の複素行列で、以下で定義される。

$$\sigma_1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

行列 $\rho(s)$ が半正定値となるパラメタの範囲はブロッホベクトルの長さが1以下 ($\|\mathbf{s}\|_2 \leq 1$) の領域となる。この領域はブロッホ球とよばれる。ブロッホベクトルの長さが1の場合が純粋状態に対応する。ヒルベルト空間の次元が3以上でもブロッホベクトル表示のような線形のパラメタ付けが可能であるが、その場合半正定値行列に対応するパラメタ空間上の制約条件は $d = 2$ の場合のようには単純ではなく、一般に $d - 1$ 個の不等式で表される [21, 22]。

量子系に測定を行うと測定値は確率的に得られ、量子状態は測定の前後で変化する。測定の作用のうち、確率分布への作用は正作用素値測定 (positive operator valued measure, POVM) によって記述される。POVM $\Pi = \{\Pi_x\}_{x \in \mathcal{X}}$ は行列の集合で、要素 Π_x は固有値が非負 ($\Pi_x \geq 0$) で総和が単位行列になる ($\sum_{x \in \mathcal{X}} \Pi_x = I$)。 $\mathcal{X}$ はその測定で取りうる測定値の集合である。状態 ρ にある量子系に POVM Π で記述される測定を行ったとき、測定値 x を得る確率は

$$p(x|\rho, \Pi) = \text{Tr}[\Pi_x \rho] \quad (4)$$

で与えられる。式 (4) は一般化されたボルン則とよばれる。量子系の次元が d で取りうる測定値の個数が M のとき、一般に POVM は $(M-1)d^2$ の自由度をもつ。

量子系の状態は時々刻々と変化する。状態変化のうち量子状態の過去の履歴に依らず、かつ測定を伴わないものの作用は線形・トレース保存・完全正写像 (linear, trace-preserving, and completely positive map, LTPCP map) によって記述される。写像 $\mathcal{K}$ がトレース保存であるとは、 $\mathcal{H}$ 上の任意の正方行列 A に対して

$$\mathrm{Tr}[\mathcal{K}(A)] = \mathrm{Tr}[A] \quad (5)$$

が成立することである。 $\mathcal{K}$ が完全正であるとは、任意のヒルベルト空間 $\mathcal{H}'$ と $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ 上の任意の半正定値行列 A に対して

$$\mathcal{K} \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{H}'}(A) \geq 0 \quad (6)$$

が成立することである。LTPCP 写像の表現にはさまざまなものが知られている。量子計算の分野で最もよく利用されるのは、クラウド表現 [23] とよばれるものである。 $\mathbf{K} = \{K_i\}_i$ を $\mathcal{H}$ 上の正方行列で、

$$\sum_i K_i^\dagger K_i = I. \quad (7)$$

を満たすとする、

$$\mathcal{K}(\rho) := \sum_i K_i \rho K_i^\dagger \quad (8)$$

で定義される線形写像 $\mathcal{K}$ は TPCP である。逆に、任意の LTPCP 写像は式 (8) の形に表せる。式 (8) の右辺を $\mathcal{K}$ の作用のクラウド表現とよぶ。クラウド表現は一意ではなく、一つの LTPCP 写像に対して複数のクラウド表現が存在する。LTPCP 写像は一般に $d^4 - d^2$ の自由度を持つ。

写像 $\mathcal{K}$ の共役写像 $\mathcal{K}^\dagger$ を、 $\mathcal{H}$ 上の任意の正方行列 A, B に対して

$$\mathrm{Tr}[\mathcal{K}^\dagger(B)A] = \mathrm{Tr}[BK(A)] \quad (9)$$

を満たす写像と定義する。 $\mathcal{K}$ が LTPCP 写像でクラウド表現が与えられている場合は、その共役写像の作用は以下のように表される。

$$\mathcal{K}^\dagger(\Pi_x) = \sum_i K_i^\dagger \Pi_x K_i. \quad (10)$$

量子状態 ρ にある量子系が LTPCP 写像 $\mathcal{K}$ で記述される状態変化を経た後、POVM Π で記述される測定を実行して測定値 x が得られる確率は

$$p(x|\rho, \mathcal{K}, \Pi) = \mathrm{Tr}[\Pi_x \mathcal{K}(\rho)] \quad (11)$$

$$= \mathrm{Tr}[\mathcal{K}^\dagger(\Pi_x)(\rho)] \quad (12)$$

で与えられる。式 (11) と式 (12) は、「初期状態 ρ にあった系の状態が $\mathcal{K}$ で変化したあと POVM Π で記述される測定を行った」と考えるのと「状態 ρ にある系に、POVM $\mathcal{K}^\dagger(\Pi) := \{\mathcal{K}^\dagger(\Pi_x)\}_{x \in \mathcal{X}}$ で記述される測定を行った」と考えるのは等価であることを示している。

測定による状態変化は、写像の集合 $\mathcal{M} = \{\mathcal{M}_x\}_{x \in \mathcal{X}}$ によって記述される。ここで $\mathcal{M}_x$ は線形・トレース減少 ($\text{Tr}[\mathcal{M}_x(A)] \leq \text{Tr}[A]$) かつ総和はトレース保存 ($\text{Tr}[\sum_x \mathcal{M}_x(A)] = \text{Tr}[A]$)・完全正写像である。測定値 x が得られた時、測定による状態変化は $\mathcal{M}$ を用いて以下のように表される。

$$\rho \mapsto \frac{\mathcal{M}_x(\rho)}{\text{Tr}[\mathcal{M}_x(\rho)]}. \quad (13)$$

取りうる測定値の数を M とすると $\mathcal{M}$ は一般に $Md^d - d^2$ の自由度を持つ。

2.2 量子誤り訂正と閾値定理

量子計算機では多数の量子ビットを適切な初期状態に準備し、そのあと量子ゲートや測定を適切な順序で作用させることによって計算が実行される。量子状態の準備・量子ゲート・測定などの量子演算を実行する際、装置の持つ不完全性から実際に実行される量子演算は所望の量子演算とはわずかに異なる。このずれを物理エラーとよぶ。長時間の計算を行う場合、各量子演算に含まれる物理エラーが大きいと、計算を進めるに従って物理エラーが蓄積され、最終的に得られる計算結果が正しくないものになってしまう。このような物理エラーの蓄積を抑える手法の中で最も重要とされているのが量子誤り訂正 [6, 7, 8] である。量子誤り訂正は、複数の量子ビットを利用して論理量子ビットとよばれる擬似的な 2 準位系を構成することで量子演算の精度を飛躍的に向上させる手法である。論理量子ビットを構成する量子ビットを物理量子ビットとよび、物理量子ビットから論理量子ビットを構成する手法を量子誤り訂正符号とよぶ。また、論理量子ビット上で実行する量子演算を論理量子演算とよび、論理量子演算を実行するために物理量子ビットに行う量子演算を物理量子演算とよぶ。物理量子演算に含まれる物理エラーの大きさ（閾値）がある値よりも低ければ、論理量子ビットを構成する物理量子ビットの数を増やすことで、論理量子演算に含まれるエラー（論理エラー）の大きさを指数関数的に小さくできることが知られている。これが量子誤り訂正における閾値定理である。閾値の具体的な値は量子誤り訂正符号の種類とその実装方法、そして発生する物理エラーのモデルに依存する。閾値を求められているモデルは現在のところ depolarizing model と呼ばれる特定のモデルに限られている。実際に発生している物理エラーはこのモデルでは記述できないと考えられていることから、より現実的なエラーモデルに対する量子誤り訂正符号の性能評価手法の開発や閾値の見積もりが必要とされている。

2.3 量子演算の精度評価手法

量子計算機の開発の実験では、実装した物理演算にどのような物理エラーがどの程度の大きさに発生しているのかを調べる必要がある。物理演算に含まれる物理エラーを推定するための統計的手法には様々なものが提案されている。現在の実験で主に利用されるのは Randomized Benchmarking (RB) [24, 25, 26, 27] と量子トモグラフィ[19]の2つである。物理量子エラーは状態変化の一種であり、量子状態の過去の履歴によらないモデルに限定すると、 $d^4 - d^2$ の自由度がある。これらの自由度を全て推定する手法が量子トモグラフィであり、これらの自由度のうち特定のパラメタの値を推定するのに特化した手法がRBである。

量子トモグラフィでは量子状態準備・量子ゲート・測定 of 全てに含まれる物理エラーの持つ全ての自由度を推定することができる。そのような利点がある一方で、推定に必要となるコストが量子ビット数に対して指数関数的に増加する、未知の系統誤差の影響を受けやすい、などの欠点がある。一方、RB は量子ゲートに含まれる物理エラーの推定に特化した手法であり、状態準備や測定に含まれる物理エラーを推定することはできない。また、量子ゲートに限定しても、含まれる物理エラーの自由度のうち一部（基本的な手法は1つの自由度）しか推定できない。このような欠点がある一方で、RB は推定に必要となるコストが量子ビット数に関して多項式的な増加で済む、未知の系統誤差の影響を比較的受けにくい、などの利点がある。このように、現在実験で利用されている代表的な2つの手法はそれぞれ利点と欠点を持ち、量子誤り訂正を実行するために利用される物理演算に含まれる物理エラーの推定手法としてはどちらも不十分である。特に量子計算機開発で先行しているアメリカでは量子トモグラフィやRBの改良に向けた研究が盛んであり、そのような研究に特化したプロジェクト [28] も進んでいるが、全ての課題を克服した最終解答は未だ得られていない。

3 量子トモグラフィ

本節では量子トモグラフィの基本事項と、量子誤り訂正で利用される物理演算の実行精度を評価する上での問題点について説明する。量子トモグラフィは推定対象に応じて量子状態トモグラフィ、プロセストモグラフィ、POVM トモグラフィ、測定プロセストモグラフィの4つに分類される。以下それぞれについて説明する。

3.1 量子状態トモグラフィ

3.1.1 設定

量子状態トモグラフィ (Quantum State Tomography) は、未知の量子状態を推定する手法であり、量子計算機の開発実験では状態準備の精度評価に用いられる。

実験は以下の3つのステップから成る：

(ステップ1) 未知の状態 ρ を準備する。

(ステップ2) 未知の量子状態に対して既知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(i)}$ を作用させる。

(ステップ3) 既知の測定 Π を実行する。

このステップ1～3を各 $i \in \{1, \dots, n_G\}$ 毎に何度も繰り返す¹ ことによって集まった実験データから未知の量子状態を推定する。この実験に対応する確率分布は以下で与えられる。

$$p(x|\rho, \mathcal{G}^{(i)}, \Pi) = \text{Tr}[\Pi_x \mathcal{G}^{(i)}(\rho)], \quad i = 1, \dots, n_G. \quad (14)$$

$$= \text{Tr}[\mathcal{G}^{(i)\dagger}(\Pi_x)\rho]. \quad (15)$$

ゲートは、密度行列 ρ を完全に推定するのに十分な種類を用意する。そのような種類のゲートを用いて構成される POVM の集合 $\{\mathcal{G}^{(i)\dagger}(\Pi)\}_i$ を情報完全 (informationally complete) と呼ぶ。例えば 1-qubit の場合、以下の組み合わせが情報完全である：

例 1 (情報完全な 1-qubit の POVM)

$$\Pi^{(i)} = \{\mathcal{G}^{(i)\dagger}(|0\rangle\langle 0|), \mathcal{G}^{(i)\dagger}(|1\rangle\langle 1|)\}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (16)$$

$$\mathcal{G}^{(1)}(\rho) = e^{i\frac{\pi}{4}\sigma_2} \rho e^{-i\frac{\pi}{4}\sigma_2}, \quad (17)$$

$$\mathcal{G}^{(2)}(\rho) = e^{i\frac{\pi}{4}\sigma_1} \rho e^{-i\frac{\pi}{4}\sigma_1}, \quad (18)$$

$$\mathcal{G}^{(3)}(\rho) = I\rho I. \quad (19)$$

情報完全な測定の組みには様々なものがあり、実験では実装しやすい組み合わせが選ばれる。

3.1.2 推定量

各 i 毎にステップ1～3を $N^{(i)}$ 回繰り返し、測定値 x が $N_x^{(i)}$ 回得られたとする。 $\sum_{x \in \mathcal{X}} N_x^{(i)} = N^{(i)}$ が成り立つ。 $\{N_x^{(i)}\}_{x,i}$ が推定に用いる実験データである。実験データから推定対象を計算する手法を推定量 (estimator)² という。量子状態トモグラフィの推定量には線形推定量、最尤推定量、制約付き最小二乗推定量とその亜種、ベイズ推定量などこれまで様々な提案がある。以下では例1の場合を例に、線形推定量・最尤推定量・制約付き最小二乗推定量について説明する。

測定回数と測定値 x が得られた回数の比 $f_x^{(i)} := N_x^{(i)}/N^{(i)}$ を相対頻度、 $\mathbf{f}^{(i)} := \{f_x^{(i)}\}_x$ を頻度分布、 $\mathbf{f} := \{\mathbf{f}^{(1)}, \dots, \mathbf{f}^{(n_G)}\}$ を頻度分布の集合とする。密度行列を

¹推定対象の量子状態は未知だが独立同一に何度も準備できると仮定している。

²量子トモグラフィのコミュニティでは再構成法 (reconstruction method) とよばれる。

真の確率分布によって表現し、真の確率分布を頻度分布で置き換える推定量は、頻度分布の線形（正確には affine）変換になっているため線形推定量とよばれる。ブロッホベクトルは

$$s_\alpha = \text{Tr}[\rho\sigma_\alpha] \quad (20)$$

$$= p(0|\rho, \mathcal{G}^{(\alpha)}, \Pi) - p(0|\rho, \mathcal{G}^{(\alpha)}, \bar{\Pi}) \quad (21)$$

と表せる。このとき線形推定量の推定値は以下で与えられる：

$$s_\alpha^L(f) = f_0^{(\alpha)} - f_1^{(\alpha)}, \quad (22)$$

$$\rho^L(f) = \frac{1}{2} \left(I + \sum_{\alpha=1}^3 s_\alpha^L(f) \sigma_\alpha \right). \quad (23)$$

式 (20) と式 (22) の関係は、期待値 (expectation) をサンプル平均 (sample mean) で置き換えたとみなすこともできる。大数の法則によって、 $N^{(i)} \rightarrow \infty$ ($i = 1, 2, 3$) の極限で頻度分布の集合は真の確率分布の集合に一致し、線形推定量の推定値は真値に収束する。

線形推定量は計算が容易であるが、その一方で推定値が非物理的になりうるという問題がある。線形推定量を用いると非物理的な推定値が得られる場合の極端な例として、例 1 の設定で $N^{(1)} = N^{(2)} = N^{(3)} = 1$ の場合を考えてみよう。このとき得られる推定値は

$$|s^L(f)_\alpha| = 1, \alpha = 1, 2, 3 \quad (24)$$

を必ず満たすので、 $\|s^L(f)\|_2 = \sqrt{3} > 1$ となってブロッホベクトルの推定値はブロッホ球の外に出てしまう。これは $\rho^L(f)$ が負の固有値を持つことに対応する。各実験データ数 $N^{(i)}$ が 1 より大きかったとしても、有限であれば推定値は真値周辺にばらつきを持って発生する。線形推定量の場合は「密度行列は半正定値行列」という条件をデータ処理に反映させていないために、推定値が物理的な領域の外に出てしまうことがある。この問題は特に真値が物理的な領域の表面に近いところにある場合に発生しやすい。通常、量子計算の実験では純粋状態にできるだけ近い状態を準備しようとする。純粋状態は物理的な領域の表面（の一部）であるため、実験の状態準備精度が高いほど、線形推定量の推定値は非物理的になりやすい。したがってこの問題は量子計算の実験において無視できない。

この問題は「密度行列は半正定値」という条件を反映した推定量を導入する事で回避できる。そのような線形量は実験データに関して非線形な変換となる。非線形な推定量として最もよく言及されるのは最尤推定量 (maximum likelihood estimator) [29]

$$\rho^{\text{ML}}(f) := \underset{\rho': \rho' \geq 0 \text{ \& } \text{Tr}[\rho'] = 1}{\text{argmax}} \log L(f|\rho') \quad (25)$$

である。ここで L は尤度関数で、以下で定義される：

$$L(f|\rho') := \prod_{x,i} p(x|\rho', \Pi^{(i)})^{N_x^{(i)}}. \quad (26)$$

最尤推定量では推定値の候補を物理的な領域に限っているため、線形推定量のように非物理的な推定値が得られる事はない。その代わりとして、推定値の計算にかかるコストが増大する。対数尤度関数は確率分布空間の端点で発散するため、数値解を求める際、端点付近で計算が不安定となる。実際の実験ではこの問題を避けるために、対数尤度関数を2次近似することで対数尤度関数の最大化を最小二乗問題に置き換え、その結果得られる制約付き最小二乗推定量（とその亜種）を用いることが多い。制約付き最小二乗推定量の推定値は半正定値計画法を利用して計算する事ができる [30]。

推定値と真値の差を推定誤差と呼ぶ。量子状態トモグラフィの推定誤差の尺度には様々なものが用いられる。精度評価に最もよく用いられるのは忠実度 (fidelity)

$$F(\rho, \rho^{\text{est}}) := \text{Tr} \left[\sqrt{\sqrt{\rho^{\text{est}}} \rho \sqrt{\rho^{\text{est}}}} \right] \quad (27)$$

である。忠実度の二乗 F^2 が用いられる事もある。 F の値が1に近いほど精度が高い。精度ではなく誤差を評価する場合は不忠実度 (infidelity) $1 - F$ を用いる。その他、Frobenius norm

$$\|\rho^{\text{est}} - \rho\|_2 := \sqrt{\sum_{i,j} (\rho_{ij}^{\text{est}} - \rho_{ij})^2}, \quad (28)$$

や trace norm

$$\|\rho^{\text{est}} - \rho\|_1 := \text{Tr} [|\rho^{\text{est}} - \rho|], \quad (29)$$

が用いられる事もある。

量子計算では準備したい状態 ρ^{tar} があり、実際に準備された状態 ρ は実験装置の精度の問題から完全には ρ^{tar} とは一致しない。真の状態 ρ は未知であるため、この状態準備の誤差評価のための実験を行う。誤差評価のための実験として量子状態トモグラフィを行い、推定値 ρ^{est} が得られたとする。状態準備の誤差を何らかのノルムで評価する場合、評価したい量は $\|\rho^{\text{tar}} - \rho\|$ である。一方、推定誤差は $\|\rho^{\text{est}} - \rho\|$ であり、実験データから計算できる量は $\|\rho^{\text{tar}} - \rho^{\text{est}}\|$ である。3角不等式から以下の大小関係が成立する。

$$\|\rho^{\text{tar}} - \rho\| \leq \|\rho^{\text{tar}} - \rho^{\text{est}}\| + \|\rho^{\text{est}} - \rho\|. \quad (30)$$

実験では「データ数は十分多いため推定誤差 $\|\rho^{\text{est}} - \rho\|$ は十分小さく無視できる」として、 $\|\rho^{\text{tar}} - \rho\| \sim \|\rho^{\text{tar}} - \rho^{\text{est}}\|$ と近似して、 $\|\rho^{\text{tar}} - \rho^{\text{est}}\|$ を状態準備の誤差とみなす事が多い。

3.2 量子プロセストモグラフィ

量子プロセストモグラフィ (Quantum Process Tomography) は、未知の状態変化を推定する手法であり、量子計算機開発実験においては量子ゲートの精度評価に用いられる。量子プロセストモグラフィの実験には補助系を用いるものと用いないものがある。補助系を用いない標準的な実験は以下の5つのステップから成る：

(ステップ1) 既知の状態 ρ を準備する。

(ステップ2) 既知の量子状態に対して既知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(i)}$ を作用させる。

(ステップ3) 未知の量子ゲート $\mathcal{G}$ を作用させる。

(ステップ4) 既知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(j)}$ を作用させる。

(ステップ5) 既知の測定 Π を実行する。

このステップ1～5を各 $i, j \in \{1, \dots, n_G\}$ 毎に何度も繰り返し、集まった実験データから未知の量子ゲート $\mathcal{G}$ を推定する。この実験に対応する確率分布は以下で与えられる：

$$p(x|\rho, \mathcal{G}^{(i)}, \mathcal{G}, \mathcal{G}^{(j)}, \Pi) = \text{Tr}[\Pi_x \mathcal{G}^{(j)} \circ \mathcal{G} \circ \mathcal{G}^{(i)}(\rho)], \quad i, j = 1, \dots, n_G. \quad (31)$$

量子トモグラフィの場合と同様に、量子ゲートも物理的なパラメタ領域は限られているため、その情報を取り込んだ推定量を用いる必要がある。クラウド表現は一意ではないため、推定には利用しにくい。量子プロセストモグラフィの場合には一意性を持つ表現の一つであるチャイ行列表現 [31] が有用である。注目する量子系を記述するヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ に対して、拡大した空間 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ($\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}$) を考える。 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ の要素 $|I\rangle$ と $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 上のエルミート行列 C を次のように定義する：

$$|I\rangle := \sum_{i=0}^{d-1} |i\rangle|i\rangle, \quad (32)$$

$$C(\mathcal{G}) := \mathcal{G} \otimes I(|I\rangle)\langle I|. \quad (33)$$

このように定義された $C(\mathcal{G})$ を線形写像 $\mathcal{G}$ のチャイ行列とよぶ。線形写像 $\mathcal{G}$ の作用と量子プロセストモグラフィの確率分布はチャイ行列を用いて

$$\mathcal{G}(\rho) = \text{Tr}_2 [(I \otimes \rho^T) C(\mathcal{G})], \quad (34)$$

$$p(x|\rho, \mathcal{G}^{(i)}, \mathcal{G}, \mathcal{G}^{(j)}, \Pi) = \text{Tr}_{1,2} [\{\mathcal{G}^{(j)\dagger}(\Pi_x) \otimes \mathcal{G}^{(i)}(\rho)\} C(\mathcal{G})], \quad (35)$$

と表す事ができる。ここで Tr_1 は $\mathcal{H}_1$ に関する部分トレース、 T は基底 $\{|i\rangle\}_{i=0}^{d-1}$ に関する転置である。チャイ行列には、 $\mathcal{G}$ の TP 性、CP 性と以下のような同値条件が成り立つことが知られている。

- 写像 $\mathcal{G}$ は TP $\Leftrightarrow \text{Tr}_1[C(\mathcal{G})] = I_2$.
- 写像 $\mathcal{G}$ は CP $\Leftrightarrow C(\mathcal{G}) \geq 0$.

この2つの同値条件から、線形写像 $\mathcal{G}$ が TPCP 写像であることは、 $\frac{1}{d}C(\mathcal{G})$ が密度行列でかつ $\text{Tr}_1[\frac{1}{d}C(\mathcal{G})] = \frac{1}{d}I_2$ が成立することと同値である。したがって、量子プロセストモグラフィは拡大された空間における量子状態トモグラフィに等式制約が追加された問題に帰着される。制約付き最小二乗推定量を利用する場合は半正定値計画法を利用する事ができる。

量子プロセストモグラフィの推定精度と推定誤差の評価にも様々な基準が用いられる。最もよく利用されるのは平均ゲート忠実度 (average gate fidelity)

$$\int d\mu(|\psi\rangle) F(\mathcal{U}(|\psi\rangle\langle\psi|), \mathcal{G}(|\psi\rangle\langle\psi|)) \quad (36)$$

である。平均ゲート忠実度はユニタリゲート $\mathcal{U}$ と量子ゲート $\mathcal{G}$ の作用後の量子状態の近さを忠実度で評価した場合の、純粋状態に関する平均的な値を評価している。他の基準としては、ノイズ強度 (noise strength) と呼ばれる、ダイヤモンドノルムに基づく評価基準が用いられる場合もある。

$$\|\mathcal{G} - \mathcal{U}\|_0 := \max_{\mathcal{H}', \rho \text{ on } \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'} \|\{(\mathcal{G} - \mathcal{U}) \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{H}'}\}(\rho)\|_1 \quad (37)$$

ノイズ強度は、写像が作用する系 $\mathcal{H}$ が他の系 $\mathcal{H}'$ とエンタングルしている場合も考慮してより大きな空間 $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}'$ 上での状態変化の差をトレースノルムの最大値で評価する基準である。

3.3 POVM トモグラフィ

POVM トモグラフィは、未知の POVM を推定する手法である。量子計算機開発実験においては準備した測定 POVM の精度評価に用いられる。実験は以下の3ステップから成る：

(ステップ1) 既知の状態 ρ を準備する。

(ステップ2) 既知の量子状態に対して既知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(i)}$ を作用させる。

(ステップ3) 未知の測定 Π を実行する。

このステップ1～3を各 $i \in \{1, \dots, n_G\}$ 毎に何度も繰り返し、集まった実験データから未知の POVM Π を推定する。この実験に対応する確率分布は以下で与えられる：

$$p(x|\rho, \mathcal{G}^{(i)}, \Pi) = \text{Tr}[\Pi_x \mathcal{G}^{(i)}(\rho)] \quad (38)$$

実験としては量子状態トモグラフィと同じであるが、既知と仮定する部分と推定すべき未知の部分異なる。

3.4 測定プロセストモグラフィ

測定プロセストモグラフィは、未知の測定プロセスを推定する手法である。量子計算機開発実験においては、測定による状態変化を利用して状態を初期化したり量子演算を実行する場合があります、測定プロセストモグラフィはそのような測定による状態変化が適切に行われているかを調べるのに用いられる。実験は量子プロセストモグラフィの場合と同様に、以下の5つのステップから成る：

- (1) 既知の状態 ρ を準備する。
- (2) 既知の量子状態に対して既知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(i)}$ を作用させる。
- (3) 未知の測定 $\mathcal{M} = \{\mathcal{M}_x\}_{x \in \mathcal{X}}$ を実行し、測定値を得る。
- (4) 測定後の状態に既知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(j)}$ を作用させる。
- (5) 既知の測定 $\Pi = \{\Pi_y\}_{y \in \mathcal{Y}}$ を実行する。

このステップ1～5を各 $i, j \in \{1, \dots, n_G\}$ 毎に何度も繰り返し、集まった実験データから未知の測定プロセス $\mathcal{M}$ を推定する。この実験に対応する確率分布は以下で与えられる：

$$p(x, y | \rho, \mathcal{G}^{(i)}, \mathcal{M}, \mathcal{G}^{(j)}, \Pi) = \text{Tr}[\Pi_y \mathcal{G}^{(j)} \circ \mathcal{M}_x \circ \mathcal{G}^{(i)}(\rho)]. \quad (39)$$

3.5 量子トモグラフィの問題点

量子トモグラフィは量子計算機開発において、試作機の動作確認や物理演算の精度評価に利用されているが、その妥当性・有用性に関して主に3つの問題を抱えている。

3.5.1 高い実行コスト

量子計算機の試作機の動作確認や論理演算の精度評価に量子トモグラフィを用いて行う場合、量子トモグラフィの実行コストは物理量子ビットの数に関して指数関数的に増加する。そのため、近い将来実装されるであろう $O(10)$ $O(100)$ の物理量子ビットから成る試作機の動作確認や論理演算の精度評価を量子トモグラフィを用いて行うのは現実的ではない。量子トモグラフィに代わって、実行コストが物理量子ビット数に関して多項式的増加で済むような動作確認手法が必要である。

量子トモグラフィを物理演算の精度評価に利用する場合は、実行コストは物理量子ビット数に関して多項式的で済む（多くの場合 $O(n)$ ）。したがって、物理演算の精度評価への利用に限定した場合、実行コストの観点からは問題ないが、以下に述べる2つの理由からその妥当性に問題がある。

3.5.2 SPAM エラーに対する脆弱性

前章で4種類の量子トモグラフィについて説明したが、どの種類の量子トモグラフィでも推定対象以外は全て既知であるという仮定を置いていた。例えば量子プロセストモグラフィの場合、準備される量子状態を記述する密度行列と測定を記述する POVM を完全に知っているとは仮定している。しかしながら実際の実験ではこの仮定は厳密には成立しない。実験装置に固有の不完全性やノイズの影響により、準備したかった量子状態と実際に準備された量子状態は完全には一致しないし、実行したかった測定と実際に実行された測定も完全には一致しない。量子トモグラフィの分野ではこのようなエラーを State Preparation And Measurement Error、略して SPAM エラーと呼んでいる。SPAM エラーが存在する場合、データ数をどんなに増やしても推定誤差はゼロには収束せず、推定値は真値には収束しない。要求される推定精度がそれほど高くなければ SPAM エラーの影響を無視しても問題ないかもしれないが、近年の実験技術の大幅な向上により、例えば 2014 年に報告された超伝導量子ビット系における量子ゲートの誤差は、平均ゲート不忠実度換算で $O(10^{-2}) \sim O(10^{-3})$ 程度である?? (この値は RB を用いて推定された)。このように高精度な量子ゲートの推定を行う際に SPAM エラーの影響を無視することは妥当ではないと考えられるため、SPAM エラーの影響を受けにくい推定手法の開発や、SPAM エラーの影響を取り込んだ推定誤差の解析法の開発が求められている。次節では、SPAM エラーの影響を受けにくいように量子トモグラフィを改良した手法として近年注目されている、ゲートセットトモグラフィと呼ばれる手法について説明する。

4 ゲートセットトモグラフィ

量子トモグラフィの標準的な手法が持つ SPAM エラーに対する脆弱性を克服する試みの一つとして、ゲートセットトモグラフィ (Gate Set Tomography, GST) と呼ばれる手法が 2013 年に Sandia 国立研究所の Robin Blume-Kohout らによって提案された [32]。本章ではゲートセットトモグラフィの基本事項と課題について説明する。

4.1 手順

量子トモグラフィの標準的な手法では、推定目的に応じて量子状態、量子ゲート、測定を既知の部分と未知の部分に分けて推定する。この既知と仮定された部分が実際の実験では完全には既知ではないために SPAM エラーの影響を受けてしまう。ゲートセットトモグラフィではこの問題を避けるために、量子状態トモグラフィと量子プロセストモグラフィと POVM トモグラフィの実験をまとめて行い、得られた実験データから量子状態・量子ゲート・測定 (POVM) の全てを同時に

推定する、というアプローチを取る。ゲートセットトモグラフィの実験にはステップの短い基本的なもの、非マルコフ性を持つノイズが発生しているか調べるためのステップの長いものの2種類がある。ここでは基本となるステップの短い実験について説明する。基本的なゲートセットトモグラフィの実験では、量子状態 ρ 、複数の量子ゲート $\{\mathcal{G}^{(1)}, \dots, \mathcal{G}^{(n_G)}\}$ 、そして測定の POVM Π を推定するために、以下の3つの実験を各ステップに沿って行う。

実験 1 (ステップ 1) 未知の量子状態 ρ を準備する。

(ステップ 2) 未知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(i)}$ を実行する。

(ステップ 3) 未知の測定 Π を行い、測定値を得る。

実験 2 (ステップ 1) 未知の量子状態 ρ を準備する。

(ステップ 2) 未知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(i)}$ を実行する。

(ステップ 3) 未知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(j)}$ を実行する。

(ステップ 4) 未知の測定 Π を行い、測定値を得る。

実験 3 (ステップ 1) 未知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(i)}$ を実行する。

(ステップ 2) 未知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(j)}$ を実行する。

(ステップ 3) 未知の量子ゲート $\mathcal{G}^{(k)}$ を実行する。

(ステップ 4) 未知の測定 Π を行い、測定値を得る。

準備する量子状態 ρ 、実行する量子ゲートの集合 $\{\mathcal{G}^{(i)}\}_i$ 、実行する測定 Π は未知であるが、実験 1、2、3 を通して同一であると仮定している。この実験 1、2、3 を各 $i, j, k \in \{1, \dots, n_G\}$ 毎に何度も繰り返し、集まった実験データから $\rho, \mathcal{G}^{(1)}, \dots, \mathcal{G}^{(n_G)}, \Pi$ を推定する。これらの実験に対応する確率分布は以下で与えられる。

$$p(x|\rho, \mathcal{G}^{(i)}, \Pi) = \text{Tr}[\Pi_x \mathcal{G}^{(i)}(\rho)], \quad (40)$$

$$p(x|\rho, \mathcal{G}^{(i)}, \mathcal{G}^{(j)}, \Pi) = \text{Tr}[\Pi_x \mathcal{G}^{(j)} \circ \mathcal{G}^{(i)}(\rho)], \quad (41)$$

$$p(x|\rho, \mathcal{G}^{(i)}, \mathcal{G}^{(j)}, \mathcal{G}^{(k)}, \Pi) = \text{Tr}[\Pi_x \mathcal{G}^{(k)} \circ \mathcal{G}^{(j)} \circ \mathcal{G}^{(i)}(\rho)]. \quad (42)$$

4.2 ゲージ変換と推定量

$\mathcal{H}$ 上の正方行列の集合から $\mathcal{H}$ 上の正方行列の集合への線形写像 A が可逆のとき、 A をゲージ変換とよぶことにする。例えばユニタリ写像はゲージ変換である。ユニタリではないゲージ変換も存在する。集合 $S = \{\rho, \mathcal{G}^{(1)}, \dots, \mathcal{G}^{(n_G)}, \Pi\}$ へのゲ-

ジ変換の作用を以下のように定義する。

$$\tilde{\rho} := \mathcal{A}(\rho), \quad (43)$$

$$\tilde{\mathcal{G}}^{(i)} := \mathcal{A} \circ \mathcal{G}^{(i)} \circ \mathcal{A}^{-1}, \quad i = 1, \dots, n_G, \quad (44)$$

$$\tilde{\Pi} := \mathcal{A}^{-1\dagger}(\Pi). \quad (45)$$

ゲージ変換を作用した後の集合 $\tilde{S} := \{\tilde{\rho}, \tilde{\mathcal{G}}^{(1)}, \dots, \tilde{\mathcal{G}}^{(n_G)}, \tilde{\Pi}\}$ は S とゲージ等価であるという。 $\mathcal{A}$ がユニタリ写像のときは $\tilde{S}$ の各要素は物理的であるが、 $\mathcal{A}$ がユニタリ写像でないときは $\tilde{S}$ の各要素が非物理的になることがある。ゲージ等価な S と $\tilde{S}$ はゲートセットトモグラフィの実験において同一の確率分布を与える。即ち、

$$p(x|\rho, \mathcal{G}^{(i)}, \Pi) = p(x|\tilde{\rho}, \tilde{\mathcal{G}}^{(i)}, \tilde{\Pi}), \quad \forall i, \quad (46)$$

$$p(x|\rho, \mathcal{G}^{(i)}, \mathcal{G}^{(j)}, \Pi) = p(x|\tilde{\rho}, \tilde{\mathcal{G}}^{(i)}, \tilde{\mathcal{G}}^{(j)}, \tilde{\Pi}), \quad \forall i, j, \quad (47)$$

$$p(x|\rho, \mathcal{G}^{(i)}, \mathcal{G}^{(j)}, \mathcal{G}^{(k)}, \Pi) = p(x|\tilde{\rho}, \tilde{\mathcal{G}}^{(i)}, \tilde{\mathcal{G}}^{(j)}, \tilde{\mathcal{G}}^{(k)}, \tilde{\Pi}), \quad \forall i, j, k, \quad (48)$$

が成立する。したがって、ゲートセットトモグラフィ実験を記述する確率分布を与える集合 S は無限に存在するため、確率分布の情報からだけでは真の集合 S を知ることはできない。

Blume-Kohout ら [32] は、確率分布の情報から真の S とゲージ等価な特定の集合 $\tilde{S}$ を計算する手法を提案している。その手法によって計算された $\tilde{S}$ は S とはゲージ等価であるが各要素は非物理的になりうる。実験では確率分布の完全な情報は分からないので、確率分布の代わりに実験データから計算された頻度分布を用いて $\tilde{S}$ の推定値 $\tilde{S}^{\text{est}}$ を計算する。このままだと推定値は真値とはかけ離れているので、 $\tilde{S}^{\text{est}}$ とゲージ等価な集合のうち、準備したい集合 S^{tar} に二乗距離の意味で最も近くなるようなものを最終的な推定値としている。これらの数値計算を行うための Python ライブラリが公開されている [33]。

4.3 課題

ゲートセットトモグラフィでは量子状態・ゲート操作・測定のいずれにも既知という仮定を置いていないため、一見、通常の量子トモグラフィが持つ SPAM エラーの問題を回避できているように見える。しかしながらそれは正しくなく、既知という仮定を置かない代償としてゲージ変換の自由度が発生し、その自由度をどうやって固定するか、という選択が実験者に求められる。Blume-Kohout らは「準備したい集合 S^{tar} からの（2 ノルムの意味での）距離を最小にするように」ゲージを選んでいますが、その結果得られた推定値は多くの場合非物理的であるし、推定された集合 $\tilde{S}^{\text{est}}$ と準備したい集合 S^{tar} の差が量子誤り訂正符号の閾値定理に現れる物理エラーとどういった関係にあるのかも不明である。ゲートセットトモグラフィが物理演算の精度評価に適した手法となるためには、（１）推定結果は常に物理的である、（２）推定結果から、量子誤り訂正への利用という目的に適した物

理エラー情報を得ることができる、という2つの条件を満たすようにさらなる発展・改良が必要となる。

参考文献

- [1] P. W. Shor, In *SFCS '94 Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* (IEEE Computer Society Press, Washington, DC, 1994), p.124.
- [2] R. P. Feynman, *Int. J. Theor. Phys.* **21**, 467 (1982).
- [3] S. Lloyd, *Science* **273**, 1073 (1996).
- [4] I. M. Georgescu, S. Ashhab, and Franco Nori, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 153 (2014).
- [5] A. Montanaro, *npj Quantum Information* **2**, 15023 (2016).
- [6] P. W. Shor, *Phys. Rev. A* **52**, R2493 (1995).
- [7] D. A. Lidar and T. A. Brun (eds.), *"Quantum Error Correction"*, Cambridge University Press (2013).
- [8] B. Terhal, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 307 (2015).
- [9] S. B. Bravyi and A. Y. Kitaev, arXiv:quant-ph/9811052.
- [10] A. G. Fowler et al., *Phys. Rev. A* **86**, 032324 (2012).
- [11] A. D. Corcoles et al., *Nature Commun.* **6**, 6979 (2015).
- [12] D. Ristè et al., *Nature Commun.* **6**, 6983 (2015).
- [13] R. Barends et al., *Nature* **508**, 500 (2014).
- [14] J. Kelly et al., *Nature* **519**, 66 (2015).
- [15] S. Benjamin and J. Kelly, *Nature Materials* **14**, 561 (2015).
- [16] IARPA LogiQ Program, <https://www.iarpa.gov/index.php/research-programs/logiq>
- [17] Quantum Manifesto, <https://ec.europa.eu/futurium/en/content/quantum-manifesto-quantum-technologies>
- [18] E. Gibney, *Nature* **533**, 448 (2016).

- [19] M. Paris and J. Rehacek (eds.), *"Quantum State Estimation"*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (2004).
- [20] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *"Quantum Computation and Quantum Information"*, Cambridge University Press (2000).
- [21] G. Kimura, *Phys. Lett. A* **314**, 339 (2003).
- [22] M. S. Byrd and N. Khaneja, *Phys. Rev. A* **68**, 062322 (2003).
- [23] K. Kraus, *"States, Effects, and Operations: Fundamental Notions of Quantum Theory"*, Lecture Notes in Physics 190, Springer-Verlag, Berlin (1983).
- [24] J. Emerson, R. Alicki, and K. Życzkowski, *J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt.* **7**, S347 (2005).
- [25] J. Emerson et al., *Science* **317**, 1893 (2007).
- [26] E. Knill et al., *Phys. Rev. A* **77**, 012307 (2008).
- [27] E. Magesan, J. M. Gambetta, and J. Emerson, *Phys. Rev. A* **85**, 042311 (2012).
- [28] U.S. ARMY RESEARCH OFFICE BROAD AGENCY ANNOUNCEMENT W911NF-13-R-0010 Research in Quantum Computing, https://www.arl.army.mil/www/pages/8/Quantum_Computing_BAA_Final_June2013.pdf
- [29] Z. Hradil, *Phys. Rev. A* **55**, R1561 (1997).
- [30] R. L. Kosut, I. Walmsley, and H. Rabitz, arXiv:quant-ph/0411093.
- [31] M. -D. Choi, *Linear Algebra Appl.* **10**, 285 (1975).
- [32] R. Blume-Kohout et al., arXiv:quant-ph/1310.4492.
- [33] pyGSTi: A python implementation of Gate Set Tomography, <http://www.pygsti.info/>