

修士論文

変分量子アルゴリズムの応用と限界
(Application and Limitation of Variational Quantum Algorithm)

東京大学理学系研究科物理学専攻
田中研究室

大久保 龍之介

令和4年1月

概要

量子コンピュータは、従来のコンピュータでは解くことが難しいとされていた複雑な問題を解きうる可能性を秘めている。さらに、量子技術の急速な発展により、量子コンピュータは現実のものとなりつつある。しかし、現状の量子コンピュータは、量子ビットの数や精度良く計算可能な量子回路の深さに制約があり、複雑な問題を完全に解くのは難しい。変分量子アルゴリズムは、こうした制約の下でも機能すると期待されている代表的な量子アルゴリズムで、量子化学、組合せ最適化問題、物理系シミュレーション、機械学習といった様々な分野への応用が提案されている。変分量子アルゴリズムの特徴は、数理最適化問題の解の候補を量子回路上の量子状態として表現し、従来のコンピュータを用いてその最適解を探索する点にある。

物理系シミュレーションは、量子コンピュータの応用例の一つとして期待されている。しかし、現状の量子コンピュータの制約上、単純な手法による物理系の長時間発展シミュレーションは困難である。そこで、本論文では Restarted Quantum Dynamics という変分量子アルゴリズムを用いることで、サイズの小さな系の長時間発展シミュレーションを現状の量子コンピュータ上で実現した。物理系としては、空間格子上的 $1 + 1$ 次元量子電磁力学に対応する格子シュウィンガーモデルというモデルを例にとった。そして、同アルゴリズムが従来のコンピュータ上でシミュレーションできないほどサイズの大きな系に対して効率的に実行可能か否かは、格子シュウィンガーモデルの初期状態の電荷に依存しうることを解析的に導いた。

本論文では、さらに、広いクラスの変分量子アルゴリズムに対して、解の候補の空間を作り出す量子回路の表現能力が豊かになるほど、効率的に最適解を見つけることが難しくなることを示唆する解析的な結果を得た。また、その解析的な結果が、量子コンピュータのシミュレータを用いた数値計算の結果と矛盾しないことを確かめた。

目次

第 1 章	序論	4
1.1	研究背景	4
1.2	本論文の目的と貢献	5
1.3	本論文の構成	7
第 2 章	有限次元の量子論	8
2.1	準備	8
2.2	有限次元の量子論の公理	13
2.3	量子系の状態の記述	14
2.4	量子系の時間発展の記述	16
2.5	量子系の測定の記述	17
第 3 章	量子回路	19
3.1	量子ビット	19
3.2	量子ゲート	20
3.3	測定	24
3.4	雑音	25
3.5	Qiskit	27
第 4 章	変分量子アルゴリズム	30
4.1	変分量子アルゴリズムの一般的な枠組み	30
4.2	変分量子アルゴリズムの応用	39
4.3	バレンプラトー	40
第 5 章	NISQ デバイスの制約を超えた長時間発展シミュレーション	46
5.1	はじめに	46
5.2	トロッター分解	47

目次	2
5.3	Restarted Quantum Dynamics 48
5.4	方法 49
5.5	時間発展シミュレーションの結果 56
5.6	Restarted Quantum Dynamics のスケーラビリティ 58
5.7	議論 61
第 6 章	変分量子アルゴリズムのコスト関数の勾配の性質 63
6.1	はじめに 63
6.2	主結果 64
6.3	Random parametrized quantum circuit を用いたコスト関数の性質 67
6.4	粒子数保存アンザッツを用いたコスト関数の性質 69
6.5	数値計算 73
6.6	議論 77
第 7 章	結論 79
謝辞	81
参考文献	82
付録 A	測度と確率 90
A.1	測度論 90
A.2	確率論 93
A.3	一様球面測度 94
A.4	ユニタリ群上のハール測度 95
付録 B	ユニタリ群上のハール測度による積分公式 98
付録 C	デザイン 100
C.1	量子 t - デザイン 100
C.2	ユニタリ t - デザイン 101
付録 D	演算子ノルム 102
D.1	シャッテンノルム p - ノルム 102
D.2	ダイヤモンドノルム 102
付録 E	第 3 章の補足 104

E.1	(3.24) の導出	104
E.2	(3.26) の導出	105
付録 F	第 4 章の補足	106
F.1	(4.8) の導出	106
F.2	定理 4.1 の証明	107
付録 G	第 5 章の補足	108
G.1	(5.17) の導出	108
G.2	5.5.1 で用いた雑音のモデル	109
G.3	2 サイト格子シュウィンガーモデルの時間発展シミュレーションに用いた量子回路	110
付録 H	第 6 章の補足	112
H.1	準備	112
H.2	定理 6.1 の証明	114
H.3	命題 6.2 の証明	117
H.4	定理 6.3 の証明	122
H.5	系 6.4 の証明	124
H.6	系 6.5 の証明	124
H.7	(6.37) の導出	126
H.8	系 6.6 の証明	127
H.9	系 6.7 の証明	129
H.10	系 6.8 の証明	131

第 1 章

序論

1.1 研究背景

ショアの素因数分解アルゴリズム [1] が示唆するように、量子コンピュータは従来のコンピュータに比べ、優れた計算能力を持つと期待されている。本論文では、量子回路モデルと呼ばれる量子計算について述べる。量子回路モデルは主に、量子ビット、量子ゲート、測定から成る。量子論の言葉で言えば、 n 量子ビットとは n 個の 2 準位系の合成系であり、その合成系に作用するユニタリ演算子を量子ゲートという。量子回路では、量子ビットに適当なユニタリ演算子を繰り返し作用させた後に、量子ビットを測定することで、計算結果を得る。このように、量子コンピュータは量子状態を情報単位として計算を行うという、従来のコンピュータと異なる計算方法を実現する。従来のコンピュータのことを、量子コンピュータと区別して古典コンピュータともいう。

実際の量子コンピュータは、周囲からの雑音の影響を受けてしまい、誤り訂正機能 [2] なしで正確な計算を行うことはできない。しかしながら、誤り訂正機能を備えた量子コンピュータの実現にはまだ数十年かかると思われる [3]。一方で、誤り訂正機能を持たない数十量子ビットの量子コンピュータは既にクラウド上で利用可能である [4]。このような誤り訂正機能を持たない数十から数百量子ビットを持つ量子コンピュータは、NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) デバイスと呼ばれる [5]。

NISQ デバイスは、量子ビットの数や精度良く計算可能な量子ゲートの深さが限られている。量子ビットの数が限られていることは、計算に多くのメモリを要するアルゴリズムを実行できないことを意味し、量子ゲートの深さが限られていることは、計算に長時間を要するアルゴリズムを実行できないことを意味する。こうした制約の下で、今後数十年の NISQ 時代に、量子コンピュータを使ってどのようなことができるのかを議論することは、学術的のみならず産業的、社会的にも重要である。

フラインマンは *Simulating physics with computers* という講演の最後に、“And I’m not happy with all the analyses that go with just the classical theory, because nature isn’t classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you’d better make it quantum mechanical, and by golly it’s a wonderful problem, because it doesn’t look so easy.” と述べた [6]。NISQ デバイスがクラウド上で誰でも使用できる

ようになった今、ファインマンの言葉に対する自然な問として、NISQ デバイスを用いて量子系の時間発展シミュレーションが可能なのかという問が生まれるだろう。最も基本的な量子コンピュータ上での量子系の時間発展シミュレーションでは、 Trotter 分解を用いる [7, 8, 9, 10]。 Trotter 分解では、系の時間発展演算子を量子ゲートとして近似的に実現するが、シミュレーション時間に比例して必要な量子ゲートが増えてしまう。このような手法では、計算可能な量子ゲートの深さが限られた NISQ デバイス上での長時間発展シミュレーションは困難である。こうした問題を解決すべく、Restarted Quantum Dynamics (RQD) と呼ばれるアルゴリズムが提案された [11]。 RQD では、系の時間発展演算子を NISQ デバイス上で実現可能な深さの量子ゲートに近似する。こうして、NISQ デバイス上での長時間発展シミュレーションが可能になる。

RQD は、変分量子アルゴリズム [12] と呼ばれる、より一般的な枠組みとして捉えることができる。変分量子アルゴリズムは、NISQ デバイスを用いた最も代表的なアルゴリズムの一つで、数理最適化問題つまり関数の最小化問題を NISQ デバイスと古典コンピュータをハイブリッドに用いて解く。最小化すべき関数をコスト関数 $C(\gamma)$ と呼び、コスト関数はパラメータ γ をもつ量子ゲートの計算結果として定義される。パラメータ付きの量子ゲートのことをアンザッツという。変分量子アルゴリズムの特徴は、量子コンピュータ上で評価したコスト関数の値やその勾配の情報をもとに、古典コンピュータを用いてパラメータ更新を行うことで、コスト関数の最小点を探索する点にある。変分量子アルゴリズムはその汎用さ故に、量子化学 [13, 14]、組合せ最適化 [15]、機械学習 [16, 17]、実時間発展シミュレーション [18, 19, 20]、虚時間発展シミュレーション [21]、深い量子ゲートの浅いゲートへの近似 [22, 23, 24] といった幅広い分野への応用が提案されている。

しかしながら、変分量子アルゴリズムの中には、バレンプラトーと呼ばれる大きな問題を引き起こすアルゴリズムがあることが分かってきた [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32]。バレンプラトーとは、変分量子アルゴリズムに用いる NISQ デバイスの量子ビットの数に対して、指数的にコスト関数の勾配が消失してしまう問題である。これは、コスト関数の最適化には、量子ビットの数に対して指数的に多くの物理量の測定が必要であることを意味している [33, 34]。つまり、バレンプラトーが生ずる変分量子アルゴリズムは、問題サイズすなわち用いる量子ビットの数が十分大きいとき、効率的に実行できない可能性がある。

1.2 本論文の目的と貢献

本論文の目的は 2 点ある。1 点目は、NISQ デバイスの制約を超えた長時間の時間発展シミュレーションを、実際の量子コンピュータ上で実現することである。2 点目は、変分量子アルゴリズムのコスト関数の一般的な性質を理解し、バレンプラトーが起こる原因を明らかにすることである。

以下では、これらの目的それぞれに対して、本論文が達成したことについてまとめておく。

1.2.1 NISQ デバイスの制約を超えた長時間発展シミュレーション

量子コンピュータは、古典コンピュータ上で表現できないほどにサイズの大きな系のシミュレーションを可能にする。しかし、現状の NISQ デバイスの制約上、 Trotter 分解による長時間発展シミュレーションは困難である。この問題を解決する変分量子アルゴリズムが RQD であった。RQD では、物理系の時間発展演算子に対応する量子ゲートと NISQ デバイス上で計算可能な浅いアンザッツとの差をコスト関数として表現する。そして、コスト関数を最小化することで、時間発展演算子に対応する量子ゲートを浅い量子ゲートに近似する。

本論文では、物理系として、高エネルギー物理のための量子アルゴリズムのトイモデルとしてよく用いられる格子シュウィンガーモデル [35] を例にとった。そして、RQD によって、サイズの小さな系に対して、NISQ デバイスの制約を超えた長時間発展シミュレーションを実際の量子コンピュータ上で実現した。この実現のために、次の2点を工夫した。第1に、系の時間発展演算子に対応する量子ゲートを、格子シュウィンガーモデルの電荷保存則を必ず満たすような粒子数保存アンザッツ [36] と呼ばれるアンザッツに近似をした。系の対称性を満たすように近似量子ゲートを設計することで、NISQ デバイスの雑音の影響を緩和できることが、数値計算によって確かめられている [11]。第2に、時間発展演算子に対応する量子ゲートと粒子数保存アンザッツとの差を表現するコスト関数の最小化には、雑音に対して剛健な逐次最小化アルゴリズム [37] を用いた。逐次最小化アルゴリズムの雑音に対する剛健性は、本論文によって初めて示された。

本論文では、さらに、サイズの大きな系に対して、同様のアルゴリズムが効率的に実行可能か否かを明らかにした。そのために、同アルゴリズムで最小化したコスト関数の解析的な性質を詳細に調べた。粒子数保存アンザッツを用いた変分量子アルゴリズムのコスト関数の解析は、本論文によって初めて為された。この解析によって、格子シュウィンガーモデルの初期状態の電荷の固有空間の次元が大きくなるほど、コスト関数の平坦な領域が増大しうることが分かった。そして、初期状態の電荷によっては、コスト関数がバレンプラトーを示すこと、つまり同アルゴリズムが効率的に実行可能でないことを明らかにした。

1.2.2 変分量子アルゴリズムのコスト関数の一般的な性質

変分量子アルゴリズムの実現において、コスト関数の最適化に要する計算量がボトルネックとなる [12]。したがって、変分量子アルゴリズムのスケラビリティの理解のためには、コスト関数の性質を理解することが重要である。

従来の研究では、アンザッツの具体的な構造に依存したコスト関数の性質が詳しく調べられてきた。例えば、Random Parametrized Quantum Circuit (RPQC) や Hamiltonian Variational Ansatz (HVA) と呼ばれるクラスのアンザッツを用いたコスト関数の性質はすでに詳しく知られている [25, 38, 39]。例えば、これらのクラスのアンザッツを用いた変分量子アルゴリズムに対して、アンザッツの豊かな表現能力がコスト関数の平坦

な領域を増大させることが知られている。しかしながら、全てのアンザッツが RPQC や HVA といったクラスに属する訳ではない。実際、粒子数保存アンザッツはいずれのクラスにも属さない。

そこで、本論文では、アンザッツの具体的な構造に依存しないコスト関数の一般的な性質を調べた。コスト関数の勾配がある一定以上大きくなる領域の面積をアンザッツの表現能力を定量化する表現力 [39] という量と関係づけた。すると、アンザッツの豊かな表現能力が、コスト関数の平坦な領域を増大させることが分かった。つまり、従来 RPQC や HVA といった具体的なクラスのアンザッツを用いた場合に成り立つとされていた性質が、アンザッツの構造に依存せず成り立つ普遍的な性質であることを明らかにした。

1.3 本論文の構成

第2章では、量子コンピュータの計算原理の理解に必要な有限次元の量子論について述べる。第3章では、量子回路と呼ばれる量子コンピュータの計算モデルについて述べる。第4章では、変分量子アルゴリズムについて述べる。第5章では、NISQ デバイスの制約を超えた長時間発展シミュレーションについて述べる。第6章では、変分量子アルゴリズムのコスト関数の一般的な性質について述べる。第7章では、本論文についてまとめる。

付録 A, B, C, D には、本論文をより正確に理解をする上で必要な概念や公式をまとめた。付録 E, F, G, H にはそれぞれ、第3, 4, 5, 6章に登場する式や定理の導出の過程を記した。

第 2 章

有限次元の量子論

本章では、有限次元の量子論の基礎について簡単に述べる。特に断らない限り、線型空間の次元は有限であるとする。

本章の構成は以下の通りである。2.1 では、量子論を記述するのに必要な言葉の準備を行うとともに、本論文で用いる記法を定める。2.2 では、量子論の出発点となる公理について述べる。2.3 では、密度演算子という演算子が量子系の状態を記述することを述べる。2.4 では、CPTP 写像という線型写像が量子系の時間発展を記述することを述べる。2.5 では、POVM という演算子の集合が量子系の測定を記述することを述べる。

2.1 準備

量子論の議論に必要な言葉をまとめる。 \mathbb{K} を \mathbb{C} または \mathbb{R} とする。

2.1.1 線型空間

構造を持たない集合の中に加法とスカラー倍という演算を取り入れる。

定義 2.1 (線型空間 [40]) 空でない集合 V が以下の 2 つの条件を満たすとき、 V は \mathbb{K} 上線型空間であるという。特に、 \mathbb{C} 上線型空間を複素線型空間、 \mathbb{R} 上線型空間を実線型空間という。

(1) V の任意の 2 つの元 $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対して、 $|\psi\rangle + |\phi\rangle$ と書かれる V の元を対応させる、加法と呼ばれる演算が存在して、以下を満たす。

- 任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle, |\xi\rangle \in V$ に対して、 $(|\psi\rangle + |\phi\rangle) + |\xi\rangle = |\psi\rangle + (|\phi\rangle + |\xi\rangle)$ が成立。
- 任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in V$ に対して、 $|\psi\rangle + |\phi\rangle = |\phi\rangle + |\psi\rangle$ が成立。
- 零元と呼ばれる $|\theta\rangle \in V$ が存在して、任意の $|\psi\rangle \in V$ に対して、 $|\psi\rangle + |\theta\rangle = |\psi\rangle$ が成立。
- 任意の $|\psi\rangle \in V$ に対して、 $|\psi\rangle$ の逆元と呼ばれる $-|\psi\rangle \in V$ が存在して、 $|\psi\rangle + (-|\psi\rangle) = |\theta\rangle$ が成立。

(2) \mathbb{K} の任意の元 c と V の任意の元 $|\psi\rangle$ に対して, $c|\psi\rangle$ と書かれる V の元を対応させる, スカラー倍と呼ばれる演算が存在して, 以下を満たす.

- 任意の $a, b \in \mathbb{K}$, 任意の $|\psi\rangle \in V$ に対して, $(a+b)|\psi\rangle = a|\psi\rangle + b|\psi\rangle$ が成立.
- 任意の $a \in \mathbb{K}$, 任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in V$ に対して, $a(|\psi\rangle + |\phi\rangle) = a|\psi\rangle + a|\phi\rangle$ が成立.
- 任意の $a, b \in \mathbb{K}$, 任意の $|\psi\rangle \in V$ に対して, $(ab)|\psi\rangle = a(b|\psi\rangle)$ が成立.
- 任意の $|\psi\rangle \in V$ に対して, $1|\psi\rangle = |\psi\rangle$ が成立.

線型空間を特徴付ける線型空間の元の集合を定義する.

定義 2.2 (基底 [40]) \mathbb{K} 上線型空間 V の元の集合 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$ が以下の2条件を満たすとき, $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$ を V の基底といい, V は n 次元であるという. V の次元を $\dim V$ と書く.

- (1) $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle$ は線型独立である.
- (2) V の任意の元が, $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle$ の \mathbb{K} 上の線型結合で表せる.

2.1.2 内積空間

線型空間の中に, 長さや角度の概念に対応する内積という演算を取り入れる.

定義 2.3 (内積空間 [40]) \mathbb{K} 上線型空間 V の任意の2つの元 $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対して, $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ と書かれる \mathbb{K} の元を対応させる内積と呼ばれる演算が存在するときに, V を内積空間という. ここで, 内積とは次の3条件

- (1) 任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in V$ に対して, $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)^* = (|\phi\rangle, |\psi\rangle)$ が成立.
- (2) 任意の $a, b \in \mathbb{K}$, 任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle, |\xi\rangle \in V$ に対して, $(|\psi\rangle, a|\phi\rangle + b|\xi\rangle) = a(|\psi\rangle, |\phi\rangle) + b(|\psi\rangle, |\xi\rangle)$ が成立.
- (3) 任意の $|\psi\rangle \in V$ に対して, $(|\psi\rangle, |\psi\rangle) \geq 0$ が成立し, 等号は $|\psi\rangle$ が V の零元のときにのみ成立.

を満たす演算のことである. 特に, \mathbb{C} 上内積空間を複素内積空間, \mathbb{R} 上内積空間を実内積空間という.

量子論では, 内積 $(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ を $\langle\psi|\phi\rangle$ と表記することが多い. 内積空間 V のベクトル $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ が $\langle\psi|\phi\rangle = 0$ を満たすとき, $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ は直交するという. また, 内積空間 V には自然なノルム $\| |\psi\rangle \| := \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ が定義できる. ノルムが1のベクトルを単位ベクトルという.

内積空間の互いに直交する単位ベクトルから成る基底を正規直交基底という.

定義 2.4 (正規直交基底 [40]) \mathbb{K} 上内積空間 V の基底 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\dim V}$ が,

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, \dots, \dim V) \quad (2.1)$$

を満たすとき, $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\dim V}$ は V の正規直交基底であるという.

2.1.3 凸集合とアフィン写像

実線型空間の部分集合のうち、凹みのないような凸集合と呼ばれる集合を定義する。

定義 2.5 (凸集合 [40]) 実線型空間 V の部分集合 W が、任意の $w_1, w_2 \in W$ と $p \in [0, 1]$ に対して、

$$pw_1 + (1-p)w_2 \in W \quad (2.2)$$

を満たすとき、 W を凸集合という。

凸集合から凸集合への写像のうち、線型性のような性質を満たすアフィン写像と呼ばれる写像を定義する。

定義 2.6 (アフィン写像 [40]) V, W を凸集合とする。写像 $f: V \rightarrow W$ が、任意の $v_1, v_2 \in V$ と $p \in [0, 1]$ に対して、

$$f(pv_1 + (1-p)v_2) = pf(v_1) + (1-p)f(v_2) \quad (2.3)$$

を満たすとき、 f をアフィン写像という。

2.1.4 線型写像

線型空間から線型空間への写像として、線型写像を定義する。

定義 2.7 (線型写像 [40]) V, V' は \mathbb{K} 上線型空間とする。写像 $f: V \rightarrow V'$ が、

- (1) 任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in V$ に対して、 $f(|\psi\rangle + |\phi\rangle) = f(|\psi\rangle) + f(|\phi\rangle)$.
- (2) 任意の $c \in \mathbb{K}$, 任意の $|\psi\rangle \in V$ に対して、 $f(c|\psi\rangle) = cf(|\psi\rangle)$.

を満たすとき、 f は \mathbb{K} 上の線型写像や線型演算子であるという。

以下、 V から V' への線型写像全体の集合を $\mathcal{L}(V, V')$ と書く。特に、 $V = V'$ のとき $\mathcal{L}(V, V)$ を単に $\mathcal{L}(V)$ と書く。また、 $\mathcal{H}, \mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ は複素内積空間とする。

$\mathcal{L}(\mathcal{H})$ の線型演算子を特徴付ける固有値とトレースという量を定義する。

定義 2.8 (固有値 [40]) $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ がある $a \in \mathbb{C}$ と零元でない $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して、

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \quad (2.4)$$

を満たすとき、 a を A の固有値といい、 $|\psi\rangle$ を固有値 a の固有ベクトルという。また、 $E_a := \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} \mid A|\psi\rangle = a|\psi\rangle\}$ を固有値 a の固有空間という。さらに、 A の固有値全体の集合を $\sigma(A)$ と書く。

定義 2.9 (トレース [40]) \mathcal{H} の正規直交基底 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\dim \mathcal{H}}$ とする. \mathcal{H} 上のトレース $\text{Tr}: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ を,

$$\text{Tr} A = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}} \langle e_i | A | e_i \rangle \quad (2.5)$$

で定義する. ここで, $\text{Tr} A$ は正規直交基底の選び方に依らない.

恒等演算子, 随伴演算子, 正規演算子と呼ばれる線型演算子を定義する.

定義 2.10 (恒等演算子 [40]) $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して $A|\psi\rangle = |\psi\rangle$ を満たすとき, A を恒等演算子といい, I や $I_{\mathcal{H}}$ と書く.

定義 2.11 (随伴演算子 [40]) $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ とする. このとき, 任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1, |\phi\rangle \in \mathcal{H}_2$ に対して,

$$(|\phi\rangle, A|\psi\rangle) = (B|\phi\rangle, |\psi\rangle) \quad (2.6)$$

を満たす $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$ を A の随伴演算子といい, A^\dagger と書く.

定義 2.12 (正規演算子 [40]) $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が $AA^\dagger = A^\dagger A$ を満たすとき, A を正規演算子という.

正規演算子は, スペクトル分解と呼ばれる分解が可能である.

定理 2.13 (スペクトル分解 [40]) 任意の正規演算子 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ は,

$$A = \sum_{a \in \sigma(A)} a P_a \quad (2.7)$$

のように表せる. ここで, $\sigma(A)$ は A の固有値全体の集合, P_a は A の固有値 a の固有空間 E_a への射影演算子で, $P_a P_{a'} = \delta_{aa'} P_a$ を満たす.

正規演算子のうち, 量子論において重要な役割を果たす演算子を定義しておく.

定義 2.14 (正規演算子の例 [40])

- (1) $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して $\langle \psi | A | \psi \rangle \geq 0$ を満たすとき, A を正値演算子といい, $A \geq 0$ と書く. また, $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して, $A - B$ が正値演算子であるとき, $A \geq B$ と書く.
- (2) $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が $AA^\dagger = I_{\mathcal{H}}$ を満たすとき, A をユニタリ演算子という.
- (3) $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が $A = A^\dagger$ を満たすとき, A をエルミート演算子という.
- (4) $P \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が $P^2 = P = P^\dagger$ を満たすとき, P を射影演算子という.

線型写像全体の集合 $\mathcal{L}(V, V')$ に自然な加法とスカラー倍の演算を考えることで, $\mathcal{L}(V, V')$ も線型空間をなす. したがって, 線型写像全体の集合から線型写像全体の集合への線型写像が定義できる. そのうち量子論の記述に重要な役割を果たすものを定義しておく.

定義 2.15 (正写像, n -正写像, CP 写像, CPTP 写像 [40]) $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ を線型写像とする.

- (1) \mathcal{E} が正值演算子を正值演算子に写すとき, \mathcal{E} を正写像という.
- (2) \mathcal{I}_n を $\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$ 上の恒等写像として, $\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_n: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \otimes \mathcal{L}(\mathbb{C}^n) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2) \otimes \mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$ が正写像であるとき, \mathcal{E} は n -正写像という.
- (3) \mathcal{E} が任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して n -正写像であるとき, \mathcal{E} は CP 写像であるという. 特にトレースを保存する CP 写像を CPTP 写像という.

次の定理で述べるように, CPTP 写像には Kraus 表現と呼ばれる記述の方法が知られており, 量子コンピュータ上の雑音の記述等に用いられる.

定理 2.16 (Kraus 表現 [40]) 線型写像 $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ に対して, 以下は同値.

- (1) \mathcal{E} が CPTP 写像である.
- (2) $\sum_{k=1}^l V_k^\dagger V_k = I_{\mathcal{H}_1}$ を満たす $l \leq \dim \mathcal{H}_1 \dim \mathcal{H}_2$ 個の線型演算子 $V_k: \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ ($k = 1, 2, \dots, l$) があって, 任意の $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$ に対して,

$$\mathcal{E}(A) = \sum_{k=1}^l V_k A V_k^\dagger \quad (2.8)$$

と表せる. 各 $V_k: \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ のことを Kraus 演算子と呼ぶ.

2.1.5 テンソル積

2つの線型空間を用いて, テンソル積空間と呼ばれる新たな線型空間を作り出す.

定義 2.17 (テンソル積空間 [41]) V_1, V_2, V を \mathbb{K} 上線型空間とする. 写像 $F: V_1 \times V_2 \rightarrow V$ が次の2つの条件を満たすとする.

- (1) 任意の $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in V_1, |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle \in V_2, a, b \in \mathbb{K}$ に対して,

$$F(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle, |\phi_1\rangle) = aF(|\psi_1\rangle, |\phi_1\rangle) + bF(|\psi_2\rangle, |\phi_1\rangle) \quad (2.9)$$

$$F(|\psi_1\rangle, a|\phi_1\rangle + b|\phi_2\rangle) = aF(|\psi_1\rangle, |\phi_1\rangle) + bF(|\psi_1\rangle, |\phi_2\rangle) \quad (2.10)$$

- (2) V_1 の基底 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\dim V_1}, V_2$ の基底 $\{|f_j\rangle\}_{j=1}^{\dim V_2}$ に対して, $\{F(|e_i\rangle, |f_j\rangle)\}_{i=1,2,\dots,\dim V_1; j=1,2,\dots,\dim V_2}$ が V の基底.

このとき, V を V_1, V_2 のテンソル積空間と呼び, $V_1 \otimes V_2$ と書く. さらに, $F(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ を $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$ と書く.

定義 2.17 と同様に, 3つ以上の線型空間からテンソル積空間を作り出すことができる. 例えば, 線型空間 V_1, V_2, V_3 から, テンソル積空間 $V_1 \otimes V_2 \otimes V_3$ を作り出せる. 特に, n 個の線型空間 V から作り出せるテンソル積

空間を $V^{\otimes n}$ と書く.

次に, 2つの内積空間を用いて, 内積を備えたテンソル積空間を作り出す.

定義 2.18 (テンソル積ヒルベルト空間 [41]) $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ を複素内積空間とし, その基底をそれぞれ $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\dim \mathcal{H}_1}$, $\{|f_j\rangle\}_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_2}$ とする. このとき, テンソル積空間 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ の内積を, $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}_1} \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_2} \psi_{ij} |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle$, $|\phi\rangle = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}_1} \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_2} \phi_{ij} |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle$ に対して,

$$\langle \psi | \phi \rangle := \sum_{i,k=1}^{\dim \mathcal{H}_1} \sum_{j,l=1}^{\dim \mathcal{H}_2} \psi_{ij}^* \phi_{kl} \langle e_i | e_k \rangle \langle f_j | f_l \rangle \quad (2.11)$$

で定義する. このような内積を定めたテンソル積空間をテンソル積ヒルベルト空間という.

定義 2.18 と同様に, 3つ以上の複素内積空間からテンソル積ヒルベルト空間を作り出すことができる.

次に, 2つの線型空間上の線型演算子から, テンソル積空間上の線型演算子を作り出す.

定義 2.19 (線型演算子のテンソル積 [41]) V_1, V_2 を \mathbb{K} 上線型空間とし, その基底をそれぞれ $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\dim V_1}$, $\{|f_j\rangle\}_{j=1}^{\dim V_2}$ とする. このとき, $A \in \mathcal{L}(V_1)$, $B \in \mathcal{L}(V_2)$ に対して, $A \otimes B \in \mathcal{L}(V_1 \otimes V_2)$ を, $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\dim V_1} \sum_{j=1}^{\dim V_2} \psi_{ij} |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle$ に対して,

$$(A \otimes B) |\psi\rangle := \sum_{i=1}^{\dim V_1} \sum_{j=1}^{\dim V_2} \psi_{ij} A |e_i\rangle \otimes B |f_j\rangle \quad (2.12)$$

で定義する.

定義 2.19 と同様に, 3つ以上の線型空間の線型演算子から, テンソル積空間上の線型演算子を作り出すことができる.

テンソル積空間 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 上への線型演算子を, \mathcal{H}_1 上の線型演算子に変換する演算として, 部分トレースが定義される.

定義 2.20 (部分トレース) \mathcal{H}_2 上の部分トレース $\text{Tr}_{\mathcal{H}_2}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$ を, $X = \sum_j A_j \otimes B_j \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)$ に対して,

$$\text{Tr}_{\mathcal{H}_2} X = \sum_j \text{Tr}[B_j] A_j \quad (2.13)$$

で定義する. ここで, $\text{Tr}_{\mathcal{H}_2} X$ は X の分解の仕方に依らない.

2.2 有限次元の量子論の公理

有限次元の量子論の出発点となる公理系を述べる.

量子系の状態, 物理量, 測定に関して次のような公理を課す.

公理 2.21 ([40]) 有限次元の量子系は複素内積空間 \mathcal{H} で表現され、量子状態は \mathcal{H} 上の単位ベクトルで表現される。物理量は、エルミート演算子 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ で表現され、測定値はその固有値で与えられる。状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ の下で、物理量 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ を測定するとき、測定値が A の固有値 $a \in \mathbb{R}$ となる確率 $P(A = a | |\psi\rangle)$ は、

$$P(A = a | |\psi\rangle) = \langle \psi | P_a | \psi \rangle \quad (2.14)$$

で与えられ、測定値の期待値は $\langle \psi | A | \psi \rangle$ で与えられる。ここで、 $P_a \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ は A の固有値 a の固有空間への射影演算子とした。

閉じた量子系の時間発展に関して次のような公理を課す。

公理 2.22 ([40]) 閉じた系の時間発展はユニタリ演算子で記述できる。つまり、時刻 t_1 における量子状態 $|\psi(t_1)\rangle$ と時刻 t_2 における量子状態 $|\psi(t_2)\rangle$ との関係は、 t_1 と t_2 だけに依存するユニタリ演算子 U を用いて

$$|\psi(t_2)\rangle = U |\psi(t_1)\rangle \quad (2.15)$$

と関係づけられる。

量子系の合成系に関して次のような公理を課す。

公理 2.23 ([40]) 複素内積空間 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ によって表現される量子系 S_1, S_2 の合成系 $S_1 + S_2$ は、テンソル積ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ で表現される。 S_1 系の物理量 $A_1 \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$ は、合成系 $S_1 + S_2$ では $A_1 \otimes I_{\mathcal{H}_2} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)$ で表現される。同様に、 S_2 系の物理量 $A_2 \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ は、合成系 $S_1 + S_2$ では $I_{\mathcal{H}_1} \otimes A_2 \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2)$ で表現される。

2.3 量子系の状態の記述

量子状態の確率混合の操作と合成系から部分系を抽出する操作を許すことで、より一般的な量子状態を作り出すことができる。一般的な量子状態は、以下に定義する密度演算子によって記述される。

定義 2.24 (密度演算子) $\rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が $\rho \geq 0$ かつ $\text{Tr} \rho = 1$ であるとき、 ρ を密度演算子という。

以下、密度演算子全体の集合を $\mathcal{S}(\mathcal{H}) := \{\rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mid \rho \geq 0, \text{Tr} \rho = 1\}$ と書く。 $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ は凸集合である。

確率 p_i で状態 $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}$ を準備するという確率混合の操作によって得られた混合状態 s は、

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (2.16)$$

と密度演算子 ρ で記述できる。実際、混合状態 s に対して、任意の物理量 $A = \sum_{a \in \sigma(A)} a P_a$ の測定をして、測定値 a を得る確率は、

$$P(A = a | \rho) = \sum_i p_i P(A = a | |\psi_i\rangle) = \sum_i p_i \langle \psi_i | P_a | \psi_i \rangle = \text{Tr} [\rho P_a] \quad (2.17)$$

となっている。つまり、密度演算子さえわかれば、任意の物理量に対する測定値の確率分布を得ることが出来る。したがって、密度演算子には、混合状態 s の全ての物理的な情報が含まれていることがわかる。

さらに、確率 p_i で密度演算子 $\rho_i \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ で記述される混合状態 s_i を準備するという確率混合の操作によって得られた混合状態 s もまた

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i \quad (2.18)$$

と密度演算子 ρ で記述でき、混合状態 s に対して、任意の物理量 $A = \sum_{a \in \sigma(A)} a P_a$ の測定をして、測定値 a を得る確率は、

$$P(A = a | \rho) = \sum_i p_i P(A = a | \rho_i) = \sum_i p_i \text{Tr}[P_a \rho_i] = \text{Tr}[\rho P_a] \quad (2.19)$$

となっている。

合成系 $S + E$ から部分系 S の状態を抽出する操作によって得られる量子状態も密度演算子で記述できる。合成系 $S + E$ における量子状態を $\rho_{SE} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E)$ とし、 S の任意の物理量 A の任意の固有値 a に対して、量子状態 $\rho_S \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S)$ が

$$P(A = a | \rho_S) = P(A = a | \rho_{SE}) \quad (2.20)$$

を満たすとき、 ρ_S を合成系 $S + E$ の部分系 S の量子状態という。ここで、 $P(A = a | \rho_S)$ は ρ_S に対して測定をして測定値 a を得る確率、 $P(A = a | \rho_{SE})$ は ρ_{SE} に対して測定をして測定値 a を得る確率とした。このとき、全体系 $S + E$ の量子状態 $\rho_{SE} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E)$ の部分系 S の状態は密度演算子 $\text{Tr}_E \rho_{SE} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S)$ で記述される [40]。

こうして、量子状態の確率混合の操作と合成系から部分系を抽出する操作を許すことで作り出された一般的な量子状態は、密度演算子で記述できることがわかった。そこで、公理 2.21, 公理 2.22 を、密度演算子の言葉で書き直しておく。

命題 2.25 量子系は複素内積空間 \mathcal{H} で表現され、量子状態は $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ で表現される。物理量は、エルミート演算子 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ で表現され、測定値はその固有値で与えられる。量子状態 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ の下で、物理量 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ を測定するとき、測定値が A の固有値 $a \in \mathbb{R}$ となる確率 $P(A = a | \rho)$ は、

$$P(A = a | \rho) = \text{Tr}[\rho P_a] \quad (2.21)$$

で与えられ、測定値の期待値は $\text{Tr}[\rho A]$ で与えられる。ここで、 $P_a \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ は A の固有値 a の固有空間への射影演算子とした。

命題 2.26 閉じた系の時間発展はユニタリ演算子で記述できる。つまり、時刻 t_1 における量子状態 $\rho(t_1)$ と時刻 t_2 における量子状態 $\rho(t_2)$ との関係は、 t_1 と t_2 だけに依存するユニタリ演算子 U を用いて

$$\rho(t_2) = U \rho(t_1) U^\dagger \quad (2.22)$$

と関係づけられる。

さて、2つの量子状態 $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ の近さを定量化する指標として、忠実度を定義する。

定義 2.27 (忠実度 [7]) $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ に対して、忠実度 $F: \mathcal{S}(\mathcal{H}) \times \mathcal{S}(\mathcal{H}) \rightarrow [0, 1]$ を、

$$F(\rho, \sigma) = \text{Tr} \left[\sqrt{\sqrt{\rho}\sigma\sqrt{\rho}} \right] \quad (2.23)$$

で定義する。特に、 ρ, σ が純粋状態で、 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|, \sigma = |\phi\rangle\langle\phi|$ であるならば、 $F(\rho, \sigma)$ を $F(|\psi\rangle, |\phi\rangle)$ と書く。

純粋状態 $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対しては、

$$F(|\psi\rangle, |\phi\rangle) = |\langle\psi|\phi\rangle| \quad (2.24)$$

が成立する。したがって、 $|\psi\rangle$ と $|\phi\rangle$ が、位相因子を除いて等しい時にのみ忠実度は1になり、直交している時にのみ忠実度は0になる。一般に、純粋状態同士の忠実度に限らず、 $F(\rho, \sigma) = 1$ であることと $\rho = \sigma$ であることは同値である。

2.4 量子系の時間発展の記述

例えば、量子コンピュータと外界との相互作用によって引き起こされる雑音は、全体系で見ればユニタリ演算子で記述できる。一方で、量子コンピュータの部分系から見ると、その雑音は必ずしもユニタリ演算子で記述できるとは限らない。そこで、ここではより一般的な時間発展を記述する方法を述べる。

一般的な状態の時間変化は、複素内積空間 \mathcal{H}_A で表現される量子系 A の初期状態を複素内積空間 \mathcal{H}_B で表現される量子系 B の終状態に移す写像として捉えるのが自然である。このような写像を時間発展写像と呼ぶことにする。時間発展写像は、 $\mathcal{S}(\mathcal{H}_A)$ から $\mathcal{S}(\mathcal{H}_B)$ への写像であるから、TP 写像である。また、時間発展写像はアフィン性を備えるべきである。なぜなら、確率 $p, 1-p$ で、量子状態 $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A)$ が混合した量子状態 $p\rho + (1-p)\sigma$ を、時間発展写像 \mathcal{E} で時間発展させて得られた状態 $\mathcal{E}(p\rho + (1-p)\sigma)$ と量子状態 $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A)$ を時間発展写像 \mathcal{E} で時間発展させて得られた状態 $\mathcal{E}(\rho), \mathcal{E}(\sigma)$ が確率 $p, 1-p$ で混合した量子状態 $p\mathcal{E}(\rho) + (1-p)\mathcal{E}(\sigma)$ は同じ状態、つまり

$$\mathcal{E}(p\rho + (1-p)\sigma) = p\mathcal{E}(\rho) + (1-p)\mathcal{E}(\sigma) \quad (2.25)$$

が成立するべきであるからである。したがって、時間発展写像 $\mathcal{E}: \mathcal{S}(\mathcal{H}_A) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H}_B)$ は TP かつアフィンな写像であるべきといえる。ここで、次の命題が成り立つ。

命題 2.28 ([40]) 写像 $f: \mathcal{S}(\mathcal{H}_A) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H}_B)$ はアフィン写像であるとする。このとき、任意の $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A)$ に対して、 $\tilde{f}(\rho) = f(\rho)$ なる TP かつ正写像な線型写像 $\tilde{f}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_A) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_B)$ が一意に定まる。

命題 2.28 は、TP かつアフィンな時間発展写像 $\mathcal{E}: \mathcal{S}(\mathcal{H}_A) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H}_B)$ を、TP かつ正写像な線型写像 $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_A) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_B)$ と論じてよいことを意味している。以後、時間発展写像は、アフィン写像 $\mathcal{E}: \mathcal{S}(\mathcal{H}_A) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H}_B)$ ではなく、TP かつ正写像な線型写像 $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_A) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_B)$ として議論を進める。

時間発展写像は TP かつ正写像であるだけでなく, CP 写像であるべきである. 理由は以下の通りである. 量子系 A, B と相互作用しない複素内積空間 \mathbb{C}^n で表現される n 準位系 C_n があった場合に, $A + C_n$ の状態を $B + C_n$ の状態へと写す時間発展写像 $\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_n: \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathbb{C}^n) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_B \otimes \mathbb{C}^n)$ を考える. このとき, 上述の議論同様に, 任意の n に対して, 時間発展写像 $\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_n: \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathbb{C}^n) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_B \otimes \mathbb{C}^n)$ は TP かつ正写像であるべきである. つまり, $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_A) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_B)$ は CP 写像であるべきである. 以上より, 時間発展を記述する写像は CPTP 写像であるべきであると言えた.

ここまでで, 量子系の時間発展は少なくとも CPTP 写像であるべきだということを述べた. 一方, CPTP 写像による時間発展が, 量子論の公理に矛盾することなく実現可能であるのかを議論しなければならない. しかしながら, あらゆる CPTP 写像による時間発展は, 命題 2.25 で述べた量子系の状態, 物理量, 測定に関する公理, 命題 2.26 で述べた閉じた量子系の時間発展に関する公理, 公理 2.23 で述べた合成系の公理に矛盾することなく実現可能であることが知られている [40].

2.5 量子系の測定の記述

測定とは, 系の状態にある操作をすることで測定値を得ることと言えよう. ここでは, 測定によって得られる測定値は, 離散確率分布に従うとする. このとき, 量子状態の測定 M は, アフィン性を満たすべきである. つまり, 確率 $p, 1-p$ で量子状態 $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ が混合した量子状態 $p\rho + (1-p)\sigma$ の下で測定値 m を得る確率 $P(M = m | p\rho + (1-p)\sigma)$ は,

$$P(M = m | p\rho + (1-p)\sigma) = pP(M = m | \rho) + (1-p)P(M = m | \sigma) \quad (2.26)$$

を満たすべきである. 実は, 測定 M がアフィン性を満たすことは, 測定 M が POVM 測定であることと同値である [40]. ここで, POVM 測定とは以下のように定義される.

定義 2.29 (POVM, POVM 測定 [40])

- (1) 線型演算子の集合 $\{E_m: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}\}_{m \in \mathcal{M}}$ が POVM であるとは, 任意の $m \in \mathcal{M}$ に対して $E_m \geq 0$ かつ $\sum_{m \in \mathcal{M}} E_m = I_{\mathcal{H}}$ であることをいう. ここで, \mathcal{M} は有限集合とした.
- (2) 量子系における測定 M が POVM 測定であるとは, 状態 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ の下で, 測定値 $m \in \mathcal{M}$ を得る確率 $P(M = m | \rho)$ が, ある POVM $\{E_m: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}\}_{m \in \mathcal{M}}$ を用いて, $P(M = m | \rho) = \text{Tr}[E_m \rho]$ で与えられることをいう.

特に, 物理量 $A = \sum_{a \in \sigma(A)} a P_a$ の測定は, POVM $\{P_a\}_{a \in \sigma(A)}$ による POVM 測定である.

ここまでで, 量子系の測定は少なくとも POVM 測定であるべきだということを述べた. 一方, POVM 測定が, 量子論の公理に矛盾することなく実現可能であるのかを議論しなければならない. しかしながら, あらゆる POVM 測定は, 命題 2.25 で述べた量子系の状態, 物理量, 測定に関する公理, 命題 2.26 で述べた閉じた量子系

の時間発展に関する公理, 公理 2.23 で述べた合成系の公理に矛盾することなく実現可能であることが知られている [40].

第3章

量子回路

本章では、量子回路について述べる。量子回路では、量子ビットと呼ばれる情報の媒体に対して量子ゲートと呼ばれる操作することで計算を行い、測定によって計算結果を得る。

本章の構成は以下の通りである。3.1, 3.2, 3.3 では、量子回路の構成要素である量子ビット、量子ゲート、測定についてそれぞれ述べる。3.4 では、量子コンピュータへの雑音のモデルの例を挙げる。3.5 では、量子回路による量子計算のための SDK である Qiskit について述べる。

3.1 量子ビット

3.1.1 単一量子ビット

単一量子ビットとは複素内積空間 \mathbb{C}^2 で表現される量子系のことである。単一量子ビットのある正規直交基底を

$$\{|0\rangle, |1\rangle\} \quad (3.1)$$

とする。内積は $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ で定まっている。この基底のことを計算基底という。単一量子ビットは、量子回路図上で

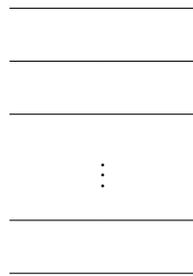
のように1本の配線として描かれる。

3.1.2 多量子ビット

n 量子ビットとは単一量子ビットを n 個合成した量子系のことである。つまり、 n 量子ビットとはテンソル積ヒルベルト空間 $(\mathbb{C}^2)^{\otimes n}$ で表現される量子系のことである。 n 量子ビットのある正規直交基底を

$$\left\{ |i_0 i_1 \dots i_{n-1}\rangle := \bigotimes_{k=0}^{n-1} |i_k\rangle \mid i_k \in \{0, 1\}, k = 0, 1, \dots, n-1 \right\} \quad (3.2)$$

と書く。この基底のことを計算基底という。添字 k に対応する複素内積空間 \mathbb{C}^2 を第 k 量子ビットという。本論文では、量子ビットを意味する添字は 0 オリジンとする。 n 量子ビットは、量子回路図上で



のように n 本の配線として描かれたり、



のように描かれたりする。上の配線から順に、第 0 量子ビット、第 1 量子ビット、... と対応させる。また、単一量子ビットと区別せず 1 本の配線でも描かれる。特に断らない限り、 n 量子ビットの初期状態は $|0\rangle^{\otimes n}$ とする。

3.2 量子ゲート

3.2.1 単一量子ゲート

単一量子ゲートとは、単一量子ビットに作用するユニタリ演算子 U のことである。公理 2.22 より、単一量子ゲートとは単一量子ビットの時間発展を決定する演算子のことである。単一量子ゲート U は、量子回路図上で



のように描かれる。量子回路図上で、単一量子ビットの初期状態 $|\psi_0\rangle$ に対して量子ゲート U を作用させた結果、単一量子ビットの状態が $|\psi_1\rangle$ に変化したこと

$$|\psi_1\rangle = U |\psi_0\rangle \quad (3.3)$$

を表現するとき、



と描く。

量子計算の議論において重要な単一量子ゲートの例を以下に挙げる。計算基底による行列表現を用いる。

例 3.1 (パウリ行列) パウリ行列 I, X, Y, Z はそれぞれ、

$$I := |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

$$X := |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

$$Y := i|1\rangle\langle 0| - i|0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

$$Z := |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

と定義される. また, $\sigma_0 := I$, $\sigma_1 = X$, $\sigma_2 = Y$, $\sigma_3 = Z$ とも書く.

例 3.2 (アダマールゲート, 位相ゲート, T ゲート) アダマールゲート H , 位相ゲート S , T ゲート T はそれぞれ,

$$H := \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

$$S := |0\rangle\langle 0| + i|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$T := |0\rangle\langle 0| + e^{i\frac{\pi}{4}}|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\pi}{4}} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

と定義される.

例 3.3 (回転ゲート) 回転ゲート R_X , R_Y , R_Z はそれぞれ,

$$R_X(\gamma) := e^{-i\gamma X/2} = \cos \frac{\gamma}{2} I - i \sin \frac{\gamma}{2} X = \begin{pmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} & -i \sin \frac{\gamma}{2} \\ -i \sin \frac{\gamma}{2} & \cos \frac{\gamma}{2} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

$$R_Y(\gamma) := e^{-i\gamma Y/2} = \cos \frac{\gamma}{2} I - i \sin \frac{\gamma}{2} Y = \begin{pmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} & -\sin \frac{\gamma}{2} \\ \sin \frac{\gamma}{2} & \cos \frac{\gamma}{2} \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

$$R_Z(\gamma) := e^{-i\gamma Z/2} = \cos \frac{\gamma}{2} I - i \sin \frac{\gamma}{2} Z = \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

と定義される.

3.2.2 多量子ビットゲート

多量子ビットゲートとは, n (≥ 2) 量子ビットに作用するユニタリ演算子 U のことである. 多量子ビットに作用する多量子ビットゲート U は, 量子回路図上で



のように描かれる. n ビットの初期状態 $|\psi_0\rangle$ に対して量子ゲート U を作用させた結果, n ビットの状態が $|\psi_1\rangle$ に変化したこと

$$|\psi_1\rangle = U |\psi_0\rangle \quad (3.14)$$

を表現するとき,

$$|\psi_0\rangle \text{ --- / --- } \boxed{U} \text{ --- / --- } |\psi_1\rangle$$

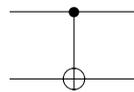
と描く.

多量子ビットゲートでは, 単一量子ビットゲートにはない制御演算と呼ばれる演算が可能である. 制御演算とは, 制御量子ビットの量子状態が $|1\rangle$ であるときに限り, 標的量子ビットに対してユニタリ演算を作用させる演算のことである. 量子計算の議論において重要な制御演算の例を以下に挙げる. 計算基底による行列表現を用いる.

例 3.4 (CNOT ゲート) 制御量子ビットを 1 量子ビット, 標的量子ビットを 1 量子ビットとする. 制御量子ビットの量子状態が $|1\rangle$ のときに限り, 標的量子ビットに X ゲートを作用させる演算を CNOT ゲートという. 制御量子ビットが第 i 量子ビット, 標的量子ビットが第 j 量子ビットのとき, CNOT ゲートを $C_j^i[X]$ と書く. 2 量子ビットに作用する $C_1^0[X]$ は,

$$C_1^0[X] = |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |11\rangle\langle 10| + |10\rangle\langle 11| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

のように表され, 量子回路図上で

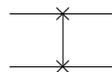


のように描く.

例 3.5 (SWAP ゲート) 第 i 量子ビット, 第 j 量子ビットに作用する SWAP ゲート SWAP_{ij} は,

$$\text{SWAP}_{ij} := C_j^i[X] C_i^j[X] C_j^i[X] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

と定義され, 量子回路図上で



のように描く. SWAP ゲート SWAP_{ij} は, 第 i 量子ビットと第 j 量子ビットの状態を入れ替えるような働きをする.

SWAP ゲートは, 量子コンピュータ上で隣接していない量子ビット間に 2 量子ビットゲートを作用させるときに用いられる. ここでは, 図 3.1a のような量子ビットのトポロジーを持つ 3 量子ビットの量子コンピュー

タ上で、隣接していない第0量子ビットと第2量子ビットに CNOT ゲート $C_2^0[X]$ を作用させたい。そのためには、図 3.1b のように、 $SWAP_{12}$ で第1量子ビットと第2量子ビットの状態を入れ替えたのち、第0量子ビットと第1量子ビットに CNOT ゲートを作用させ、再び $SWAP_{12}$ で第1量子ビットと第2量子ビットの状態を入れ替えれば良い。

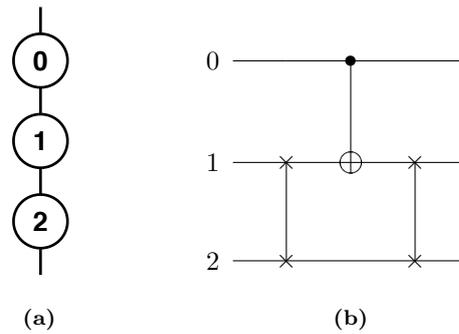
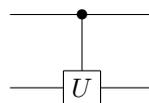


図 3.1: (a) のような量子ビットのトポロジーを持つ量子コンピュータ上で、第0量子ビットと第2量子ビットに CNOT ゲート $C_2^0[X]$ を作用させるには、(b) のように SWAP ゲートを用いれば良い。

例 3.6 (制御 U ゲート) CNOT ゲートを一般化する。制御量子ビットを1量子ビット、標的量子ビットを1量子ビットとする。制御量子ビットの量子状態が $|1\rangle$ のときに限り、標的量子ビットに単一量子ゲート U を作用させる演算を制御 U ゲートという。制御量子ビットが第 i 量子ビット、標的量子ビットが第 j 量子ビットのとき、制御 U ゲートを $C_j^i[U]$ と書く。2量子ビットに作用する $C_1^0[U]$ は、

$$C_1^0[U] = |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + (I \otimes U)|10\rangle\langle 10| + (I \otimes U)|11\rangle\langle 11| = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

のように表され、量子回路図上で



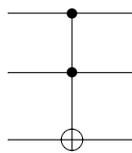
のように描く。

例 3.7 (トフォリゲート) 制御量子ビットを2量子ビット、標的量子ビットを1量子ビットとする。制御量子ビットの量子状態が $|11\rangle$ のときに限り、標的量子ビットに X ゲートを作用させる演算をトフォリゲートという。制御量子ビットが第 i_1, i_2 量子ビット、標的量子ビットが第 j 量子ビットのとき、トフォリゲートを $C_j^{i_1, i_2}[X]$ と書く。3量子ビットに作用する $C_2^{0,1}[X]$ は、

$$C_2^{0,1}[X] = |000\rangle\langle 000| + |001\rangle\langle 001| + |010\rangle\langle 010| + |011\rangle\langle 011| + |100\rangle\langle 100| + |101\rangle\langle 101| + |111\rangle\langle 110| + |110\rangle\langle 111| \quad (3.18)$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

のように表され, 量子回路図上で



のように描く.

3.3 測定

量子コンピュータでは, 量子ビットに対して量子ゲートを作用させることで得た量子状態を測定することで, 計算結果を得る.

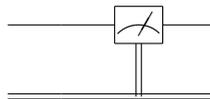
単一量子ビットの測定を, 量子回路図上で



のようにメーター記号を用いて描く. 特に断らない限り, 単一量子ビットの測定は, 計算基底による測定, つまり POVM

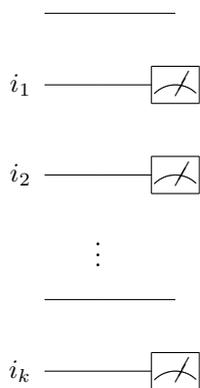
$$\{|0\rangle\langle 0|, |1\rangle\langle 1|\} \quad (3.20)$$

による POVM 測定を指す. また, 単一量子ビットの測定結果を古典ビットの情報として格納することを強調するとき, 量子回路図上で



のように表す. ここで, 2重線の配線が古典ビットを表している.

同様に, n 量子ビットの第 i_1, i_2, \dots, i_k ($0 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k < n$) 量子ビット測定は,



のように描く. 特に断らない限り, n 量子ビットの第 i_1, i_2, \dots, i_k 量子ビット測定は, POVM

$$\{I^{\otimes i_1} \otimes |j_1\rangle\langle j_1| \otimes I^{\otimes i_2 - i_1 - 1} \otimes |j_2\rangle\langle j_2| \otimes \dots \otimes |j_k\rangle\langle j_k| \otimes I^{\otimes n - i_k - 1} \mid j_l \in \{0, 1\}, l = 1, 2, \dots, k\} \quad (3.21)$$

による POVM 測定を指す. 特に, n 量子ビット全てを測定する場合は, n 量子ビットの計算基底による測定に対応する.

3.4 雑音

量子コンピュータに対する雑音は, CPTP 写像として記述できる. ここでは, 量子コンピュータに対する雑音のモデルとの例として, ビット反転チャンネルと分極解消チャンネルを紹介する.

3.4.1 ビット反転チャンネル

1 量子ビットを考える. $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ とする.

定義 3.8 (ビット反転チャンネル) ビット反転チャンネルを, CPTP 写像 $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ で, $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して,

$$\mathcal{E}(A) = pA + (1 - p)XAX \quad (3.22)$$

なる写像と定義する. ここで, $p \in [0, 1]$ とした.

定義 3.8 より, ビット反転チャンネル \mathcal{E} は, 確率 p で始状態を保ち, 確率 $1 - p$ で X を始状態に作用させる雑音のモデルと理解できる.

3.4.2 分極解消チャンネル

n 量子ビットを考える. $\mathcal{H} = (\mathbb{C}^2)^{\otimes n}$ とする. 分極解消チャンネルは次のように定義される.

定義 3.9 (分極解消チャンネル) 分極解消チャンネルを, CPTP 写像 $\mathcal{D}_p: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ で, $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して,

$$\mathcal{D}_p(A) = pA + \frac{\text{Tr}[A](1-p)}{2^n} I_{\mathcal{H}} \quad (3.23)$$

なる写像と定義する. ここで, $p \in \left[-\frac{1}{4^n-1}, 1\right]$ とした.

分極解消チャンネルの Kraus 演算子の集合は,

$$\left\{ \sqrt{p + \frac{1-p}{4^n}} M_{\mathbf{0}} \right\} \cup \left\{ \frac{\sqrt{1-p}}{2^n} M_{\alpha} \right\}_{\alpha \neq \mathbf{0}} \quad (3.24)$$

で与えられる*1. ここで, $\left\{ M_{\alpha := (\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{n-1})} = \bigotimes_{i=0}^{n-1} \sigma_{\alpha_i} \right\}_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n}$ とした.

さて, 分極解消チャンネルを用いて, 量子コンピュータ上の簡単な雑音のモデルを考える. 実際の量子コンピュータ上で, 初期状態 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ に対して量子ゲート U を作用させる際には, U をいくつかの基本ゲートの積 $U = U_{N_g} \cdots U_1$ に分解する必要がある. そこで, 図 3.2a のような基本ゲート U_i を量子状態に作用させる度に \mathcal{D}_{p_i} が作用するという雑音のモデル $\mathcal{N}: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ を考える. すると, CPTP 写像 $\mathcal{U}_i: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \ni A \mapsto U_i A U_i^\dagger \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ として, 雑音のモデルは,

$$\mathcal{N} = \bigcirc_{j=1}^{N_p} (\mathcal{D}_{p_j} \circ \mathcal{U}_j) \quad (3.25)$$

で表せる. すると, $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して,

$$\mathcal{N}(A) = \mathcal{D}_p \circ \mathcal{U}(A) \quad (3.26)$$

が成立する*2. ここで, $\mathcal{U}: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \ni A \mapsto U A U^\dagger \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, $p := p_{N_g} \cdots p_2 p_1$ とした. これは, 図 3.2 で示しているように, 雑音のモデル \mathcal{N} が, ユニタリ演算 U が作用したのちに分極解消チャンネル \mathcal{D}_p が作用する雑音のモデルと等価であることを意味している. ここで述べた2つの雑音のモデルの等価性は後に用いるので, 命題という形でまとめておく.

命題 3.10 $U_i \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ($i = 1, 2, \dots, N_g$) をユニタリ演算子とし, $\mathcal{U}_i: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \ni A \mapsto U_i A U_i^\dagger \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ とする. また, \mathcal{D}_{p_i} ($i = 1, 2, \dots, N_g$) は分極解消チャンネルとする. さらに, CPTP 写像 $\mathcal{N}: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ を,

$$\mathcal{N} := \bigcirc_{j=1}^{N_p} (\mathcal{D}_{p_j} \circ \mathcal{U}_j) \quad (3.27)$$

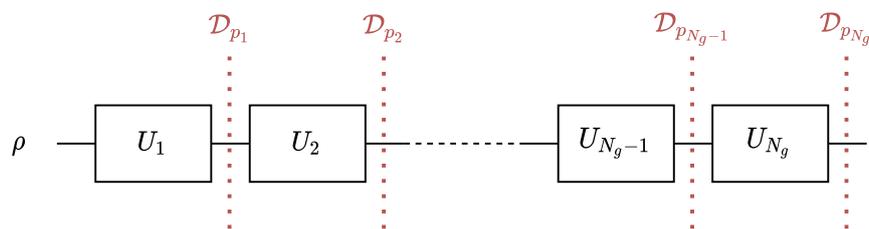
で定義する. このとき,

$$\mathcal{N} = \mathcal{D}_p \circ \mathcal{U} \quad (3.28)$$

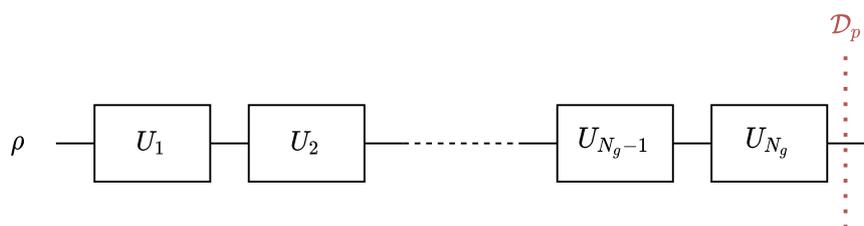
である. ここで, $U := U_{N_g} \cdots U_2 U_1$ に対して, $\mathcal{U}: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \ni A \mapsto U A U^\dagger \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ とし, $p := \prod_{i=1}^{N_g} p_i$ とした.

*1 導出については, 付録 E.1 を参照.

*2 導出については, 付録 E.2 を参照.



(a) 各ゲート U_i が作用するたびに、分極解消チャンネル \mathcal{D}_{p_i} が作用する雑音のモデル



(b) ゲート $U_{N_g} \cdots U_2 U_1$ が作用したのちに、分極解消チャンネル $\mathcal{D}_{p:=p_{N_g} \cdots p_2 p_1}$ が作用する雑音のモデル

図 3.2: 2つの雑音のモデル (a), (b) は等価なモデルである。

3.5 Qiskit

Qiskit は、IBM 社が中心となって開発を行っている、量子回路による量子計算のためのオープンソースの Python 用 SDK である [42]。本論文では、Qiskit を用いて量子回路を作成し、シミュレータや実機を用いて計算を行った。そこで、ここでは Qiskit について簡単に述べる。

Qiskit では、量子回路を QuantumCircuit オブジェクトとして表現する。QuantumCircuit オブジェクトは、量子ビットに対応する QuantumRegister オブジェクトや測定結果を保存する古典ビットに対応する ClassicalRegister オブジェクトをコンストラクタの引数にとり初期化する。こうして初期化した QuantumCircuit オブジェクトに、量子ゲートや測定の操作をメソッドによって追加していき、所望の量子回路を得る。図 3.3a にベル状態を生成し全ての量子ビットを測定する量子回路を作るためのサンプルコードを示し、図 3.3b にその量子回路図を示した。

Qiskit では、雑音のない場合だけでなく自ら定義した雑音のモデルの下でも、作成した量子回路をシミュレータによって計算することができる。計算結果を double の精度で状態ベクトルや密度演算子として得るシミュレータや有限回の測定まで考慮に入れた計算を行うシミュレータがある。本論文では、前者を測定回数が ∞ 回のシミュレータとも呼ぶ。

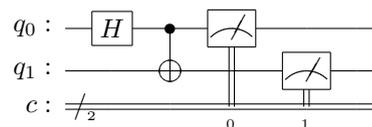
さらに、Qiskit では、作成した量子回路を IBM 社が開発している超伝導型量子コンピュータ [43, 44] によっ

```

1 from qiskit import QuantumCircuit,
    QuantumRegister, ClassicalRegister
2
3 nqubit = 2
4 qr = QuantumRegister(nqubit, 'q')
5 cr = ClassicalRegister(nqubit, 'c')
6 qc = QuantumCircuit(qr, cr)
7 qc.h(qr[0])
8 qc.cx(qr[0], qr[1])
9 qc.measure(qr, cr)

```

(a) サンプルコード



(b) 量子回路図

図 3.3: Qiskit を用いてベル状態を生成するための量子回路を作成した。(a) に示したサンプルコードによって作成された量子回路図を (b) に示した。

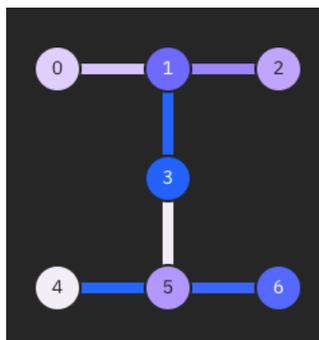


図 3.4: ibm_lagos の量子ビットのトポロジー。

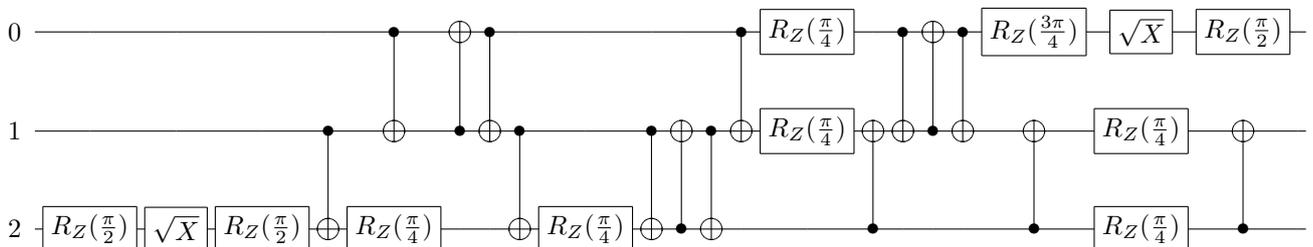
て計算することもできる。実際の量子コンピュータは、図 3.4 のように、必ずしも全ての量子ビットが隣接しているわけではないことに注意する。隣接していない量子ビット間には、2 量子ビットゲートを直接作用させることはできない。この問題は、例 3.5 で述べたように SWAP ゲートを用いることで解決できる。また、IBM 社の量子コンピュータでは、マイクロ波パルスを制御することで、量子ゲートや量子ビットの測定を実現している。本論文では、あらかじめ IBM 社によってキャリブレーションされたパルス制御のためのパラメータを用いた。このようなパラメータは、あらゆる量子ゲートに対してあらかじめ定められているのではなく、いくつかの基本ゲートに対してのみあらかじめ定まっていることに注意する。こうした事情から、作成した量子回路を、実際の量子コンピュータの量子ビットのトポロジーを考慮しつつ基本ゲートに分解する必要がある。そこで、本論文では、transpile モジュールを用いて所望の量子回路を基本ゲートに分解した。図 3.5a に、transpile モジュールによって、図 3.4 で示した ibm_lagos の量子ビットトポロジーの下、トフォリゲートを基本ゲート X , \sqrt{X} , R_Z , CNOT に分解するためのサンプルコードを示した。こうして得られたトフォリゲートの量子回路図を図 3.5b に示した。

```

1 from qiskit import QuantumCircuit, QuantumRegister
2 from qiskit.compiler import transpile
3
4 coupling_map = [[0, 1], [1, 0], [1, 2], [1, 3], [2, 1], [3, 1], [3, 5], [4, 5],
5                 [5, 3], [5, 4], [5, 6], [6, 5]]
6
7 basis_gates = ['rz', 'sx', 'x', 'cx']
8
9 nqubit = 3
10 qr = QuantumRegister(nqubit, 'q')
11 qc = QuantumCircuit(qr)
12 qc.toffoli(qr[0], qr[1], qr[2])
13 transpiled_qc = transpile(circuits=qc, basis_gates=basis_gates, coupling_map=
14                           coupling_map)

```

(a) サンプルコード



(b) 分解後のトフォリゲート

図 3.5: Qiskit の `transpile` モジュールによって, `ibm_lagos` の量子ビットトポロジーの下, トフォリゲートを基本ゲート X , \sqrt{X} , R_Z , CNOT に分解した. (a) に示したサンプルコードによって分解されたトフォリゲートの量子回路図を (b) に示した.

第4章

変分量子アルゴリズム

本章では、NISQ デバイスを用いた代表的なアルゴリズムである変分量子アルゴリズム (Variational Quantum Algorithm, VQA) [12] について述べる。

本章の構成は以下の通りである。4.1 では、変分量子アルゴリズムの一般的な枠組みについて述べる。4.2 では、変分量子アルゴリズムの応用例を挙げる。4.3 では、変分量子アルゴリズムの抱えるバレンプラトーと呼ばれる問題点について述べる。

4.1 変分量子アルゴリズムの一般的な枠組み

変分量子アルゴリズムの流れを簡単に述べる。まず、解きたい問題を最適化問題、つまり関数の最小化問題へとマッピングする。最小化すべき関数 $C(\gamma)$ のことをコスト関数という。ここで、コスト関数 $C(\gamma)$ は、パラメータ γ に依存する量子ゲート $U(\gamma)$ を用いて定義される。パラメータに依存する量子ゲートをアンザッツという。変分量子アルゴリズムでは、図 4.1 のように、量子コンピュータを用いてコスト関数の値や勾配の計算を評価することと、古典コンピュータを用いてコスト関数を最小化するようにパラメータをアップデートすることを交互に繰り返し行うことで、コスト関数の最小点を求める。一般に、コスト関数の最小点を探索するアルゴリズムをオプティマイザーという。

以下では、変分量子アルゴリズムにおけるコスト関数、アンザッツ、オプティマイザーについてそれぞれ述べる。

4.1.1 コスト関数

変分量子アルゴリズムの最初の一步は、解きたい問題を数理最適化問題にマッピングする、つまりコスト関数を定義することである。数理最適化問題では、解きたい問題の解の候補を $\Gamma \subset \mathbb{R}^{N_p}$ 上の点として表現する。コスト関数は、解きたい問題の解が最小値に対応するように定義された関数で、解と解の候補の差を定量的に表現する関数 $\Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ である。したがって、コスト関数を最小化するようなパラメータ γ を探索することで、解

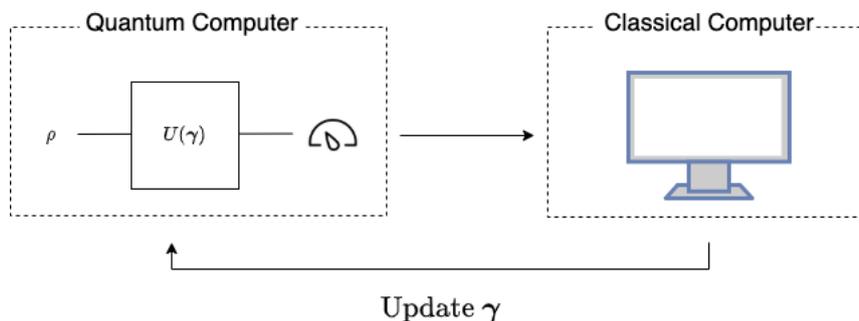


図 4.1: 変分量子アルゴリズムにおける, 量子古典ハイブリッドループ. 量子コンピュータを用いたコスト関数値や勾配の評価と, 古典コンピュータを用いたパラメータのアップデートを交互に繰り返すことで, コスト関数の最小点を求める.

きたい問題の解を求めることができる. どのようにしてコスト関数の最小点を探索するのかについては, 4.1.3 で述べる.

変分量子アルゴリズムのコスト関数は, 多くの場合

$$C(\gamma) = \sum_i f_i \left(\text{Tr} \left[O_i U(\gamma) \rho_i U(\gamma)^\dagger \right] \right) \quad (4.1)$$

の形で定義される. ここで, 各 O_i は物理量, 各 ρ_i は入力状態, f_i は $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ の関数, $U(\gamma)$ はアンザッツである. 変分量子アルゴリズムでは, コスト関数を量子状態 ρ_i や量子的な操作 $U(\gamma)$ を用いて定義することで, 古典コンピュータ上では計算不可能なコスト関数を計算できていると期待している.

変分量子アルゴリズムのコスト関数が満たすべき条件として, 次の4点が提案されている [12].

- (C1) コスト関数の最小点が解きたい問題の解に対応する.
- (C2) コスト関数の値が小さい点ほど良い解に対応する.
- (C3) コスト関数の値や勾配は, 量子コンピュータ上の測定と必要があれば測定後の後処理を古典コンピュータによって効率的に計算できる.
- (C4) コスト関数の最小点は効率的に求めることができる.

(C1), (C2) は, 変分量子アルゴリズムに限らず, 一般の数値最適化問題が満たすべき条件である. (C3) において, 量子コンピュータ上の測定とは (4.1) の $\text{Tr} \left[O_i U(\gamma) \rho_i U(\gamma)^\dagger \right]$ の期待値計算に対応し, 古典コンピュータ上の後処理とは, (4.1) の $f_i(\cdot)$ の計算や i についての足し合わせ \sum_i の計算に対応する. (C4) については, 4.3 で詳しく述べる.

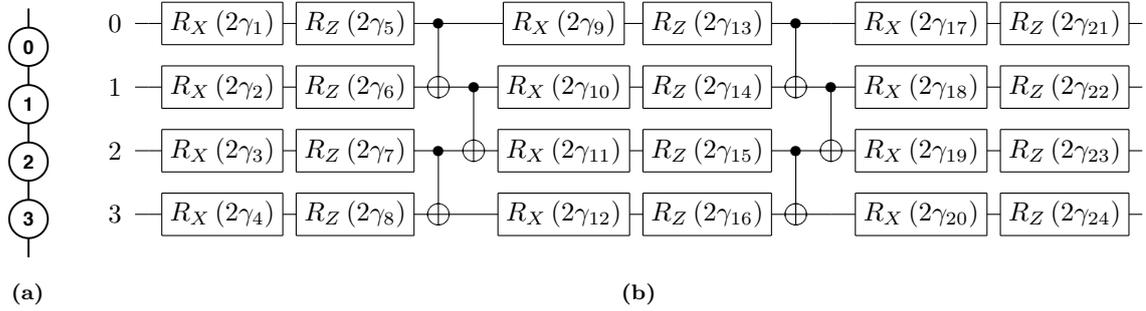


図 4.2: (a) のような量子ビットのトポロジーを持つ量子コンピュータ上の Hardware Efficient アンザッツの例を (b) に示した.

4.1.2 アンザッツ

パラメータ付きの量子ゲートのことをアンザッツという. 例えば, N_p 個のパラメータを持つ量子ゲート $U_{\text{RPQC}}: [0, 2\pi)^{N_p} \rightarrow \mathcal{U}(2^n)$ を

$$U_{\text{RPQC}}(\gamma) = \prod_{j=1}^{N_p} U_j(\gamma_j) W_j = U_{N_p}(\gamma_{N_p}) W_{N_p} \dots U_2(\gamma_2) W_2 U_1(\gamma_1) W_1 \quad (4.2)$$

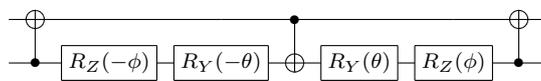
と定義すると^{*1}, $U_{\text{RPQC}}(\gamma)$ はアンザッツである. $U_{\text{RPQC}}(\gamma)$ を Random Parametrized Quantum Circuit (RPQC) と呼ぶ. ここで, W_j はパラメータを持たない量子ゲートとし, $U_j(\gamma_j)$ は $V_j^2 = I$ を満たすエルミート V_j を用いて, $U_j(\gamma_j) := \exp[-i\gamma_j V_j]$ とした.

アンザッツは大きく分けて problem-agnostic アンザッツと problem-inspired アンザッツの 2 種類に分類できる [38]. problem-agnostic アンザッツとは, 解きたい問題に関する前提知識を用いずに設計された汎用的なアンザッツのことをいう. 一方で, problem-inspired アンザッツとは, 解きたい問題に関する前提知識を組み込んで設計されたアンザッツのことをいう.

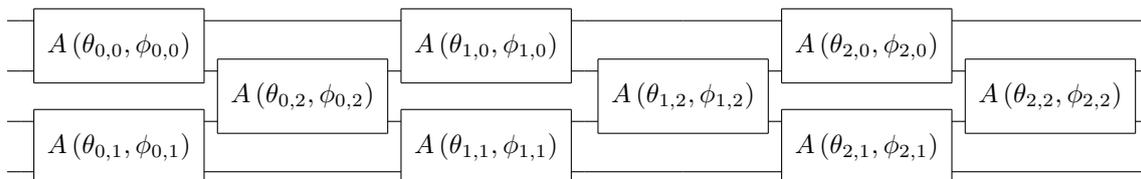
problem-agnostic アンザッツの例として, Hardware Efficient アンザッツ [14] がある. Hardware Efficient アンザッツとは, 用いる量子コンピュータのアーキテクチャに依存した構造を持つアンザッツのことである. 例えば, 図 4.2a のような量子ビットトポロジーを持つ量子コンピュータ上の Hardware Efficient アンザッツの例として, 隣接している量子ビット間でのみ 2 量子ビットゲートが作用している 図 4.2b のようなアンザッツが挙げられる. 図 4.2b で示したアンザッツは, (4.2) で一般的に定義したアンザッツ $U_{\text{RPQC}}(\gamma)$ の一例となっている.

一方で, problem-inspired アンザッツの例として, 粒子数保存アンザッツ [36] がある. 粒子数保存アンザッツとは, 入力量子状態の粒子数を保存するアンザッツで, A ゲートと呼ばれる 2 量子ゲートを繰り返し作用す

*1 本論文では, 演算子に対する \prod の積の順序は (4.2) のように取ることにする.



(a) A ゲート $A(\theta, \phi)$ の R_Y ゲート, R_Z ゲート, CNOT ゲートによる分解.



(b) 粒子数保存アンザッツ. A ゲートを繰り返し用いる.

図 4.3: A ゲートと粒子数保存アンザッツの構造.

ることで実現できる (図 4.3). 粒子数とは, 量子状態の計算基底による表示において, 1 が立っている量子ビットの個数のことで, 古典コンピュータでいう popcount に対応する量である. 例えば, $|0111\rangle$ の粒子数は 3 である. したがって, 解きたい問題の解に関する前提知識によってアンザッツで表現すべき量子状態の粒子数が既にわかっている場合には, 粒子数保存アンザッツは有用である. 第 5 章で, 粒子数保存アンザッツを用いた変分量子アルゴリズムの一例について詳しく述べる.

アンザッツの表現力

自らの設計したアンザッツによって, 解きたい問題の解が表現できているかは一般には分からない. しかしながら, 個々のアンザッツの性質を定量化して評価することを考えることで, その特性を理解しようとすることはできる. アンザッツの性質の指標として, エンタングルメント容量 [45], 表現力 [45, 46, 39], 表現度 [47] という量が提案されている. ここでは, [39] で提案されている, n 量子ビット系 \mathcal{H} に作用するアンザッツ $U: \Gamma \rightarrow \mathcal{U}(2^n)$ の表現力について述べる.

アンザッツ $U(\gamma)$ を量子状態 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ に作用させることで, 量子状態 $U(\gamma)\rho U(\gamma)^\dagger$ を得ることができる. γ を様々な値に変化させることで, $U(\gamma)$ は様々なユニタリ演算子となりうるので, $U(\gamma)\rho U(\gamma)^\dagger$ はまた様々な量子状態を表現しうる. ここで, γ が Γ の中の様々な値をとりうるという意味で分布 ν^{*2} を持つ Γ -値確率変数と見なすことにすると, $U(\gamma)$ もまた確率変数と見なすことができる^{*3}. 一方で, $\mathcal{U}(2^n)$ 上の “一様分布”, つ

^{*2} 分布については, 定義 A.12 を参照.

^{*3} 本論文では, アンザッツ $U: \Gamma \rightarrow \mathcal{U}(2^n)$ は連続であると仮定する. この仮定は合理的である. というのも, 変分量子アルゴリズムに用いられる多くのアンザッツは, 回転ゲートとパラメータを持たないゲートから成るので, $U(\gamma)$ の行列表示の各成分は, $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{N_p}$ に依存する三角関数たちの線型和, つまり連続関数で書けるからである. よって, $U(\gamma)$ の各成分が連続なので, ボレル可測, つまり確率変数である [48]. さらに, $U(\gamma)$ の各成分が確率変数ならば, $U(\gamma)$ も確率変数となる [49].

まりハール分布^{*4}に従う確率変数 V を考えてみると, $V\rho V^\dagger$ はユニタリ時間発展によって作り出せる全ての量子状態を表現する. つまり, 確率変数 V が最も表現能力のあるアンザッツに対応すると考えることができる. よって, 確率変数 $U(\gamma)$ と確率変数 V の差として, アンザッツ $U(\gamma)$ の表現力を定義していくのが良さそうである.

そこで, 確率変数 $U(\gamma)$ と確率変数 V の差に対応する量として, 線型写像 $\mathcal{A}_{U(\gamma),\nu}^{(t)}: \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes t}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes t})$ を

$$\mathcal{A}_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(\cdot) := \int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dV) V^{\otimes t}(\cdot)(V^\dagger)^{\otimes t} - \int_{\Gamma} \nu(d\gamma) U(\gamma)^{\otimes t}(\cdot)(U(\gamma)^\dagger)^{\otimes t} \quad (4.3)$$

で定義する. ここで, t は自然数, ν はアンザッツのパラメータ γ の分布, μ_{H} はユニタリ群 $\mathcal{U}(2^n)$ 上のハール測度とした. 任意の $X \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes t})$ に対して, $\mathcal{A}_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(X) = 0$ であるとき, $\mathcal{U}(2^n)$ -値確率変数 $U(\gamma)$ はユニタリ t -デザインであるという^{*5}. そして, $\mathcal{A}_{U(\gamma),\nu}^{(t)}$ を用いて, 入力 $X \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して, アンザッツ $U(\gamma)$ の表現力 $\epsilon_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(X)$ を

$$\epsilon_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(X) := \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(X^{\otimes t}) \right\|_2 \quad (4.4)$$

で定義する. ここで, $\|\cdot\|_p$ は, シャッテン p -ノルムとした^{*6}.

アンザッツの表現力 $\epsilon_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(X)$ は, 一般化フレームポテンシャルという量と関係づけられる [39]. アンザッツ $U(\gamma)$ とそのパラメータ γ の分布 ν , $X \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して, 一般化フレームポテンシャルを,

$$\mathcal{F}_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(X) := \int_{\Gamma} \nu(d\gamma) \int_{\Gamma} \nu(d\gamma') \text{Tr} \left[XU(\gamma')^\dagger U(\gamma) X^\dagger U(\gamma)^\dagger U(\gamma') \right]^t \quad (4.5)$$

で定義する. 特に, $\mathcal{U}(2^n)$ -値確率変数 $U(\gamma)$ が, ハール分布 μ_{H} に従うとき,

$$\mathcal{F}_{\text{H}}^{(t)}(X) := \int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dV) \int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dW) \text{Tr} [XW^\dagger V X^\dagger V^\dagger W]^t \quad (4.6)$$

とする. すると, $X \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して,

$$\mathcal{F}_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(X) - \mathcal{F}_{\text{H}}^{(t)}(X) \geq 0 \quad (4.7)$$

が成り立ち, アンザッツの表現力 $\epsilon_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(X)$ と一般化フレームポテンシャルとの関係は,

$$\epsilon_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(X) = \sqrt{\mathcal{F}_{U(\gamma),\nu}^{(t)}(X) - \mathcal{F}_{\text{H}}^{(t)}(X)} \quad (4.8)$$

で与えられる^{*7}.

(4.4) で定義したアンザッツの表現力は, $\mathcal{A}_{U(\gamma),\nu}^{(t)}$ への入力 X に依存する量だった. そこで, 入力に依らないアンザッツの表現力を定義する. つまり, 2つの線型写像 $\mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes t}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes t})$, $\int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dV) V^{\otimes t}(\cdot)(V^\dagger)^{\otimes t}$ と $\int_{\Gamma} \nu(d\gamma) U(\gamma)^{\otimes t}(\cdot)(U(\gamma)^\dagger)^{\otimes t}$ の差を, アンザッツの表現力として採用する. 一般に, 2つの線型写像

^{*4} ユニタリ群上のハール分布 (測度) については付録 A.4 を参照.

^{*5} ユニタリ t -デザインについては, 付録 C.2 を参照.

^{*6} シャッテン p -ノルムについては, 付録 D.1 を参照.

^{*7} 導出については, F.1 を参照.

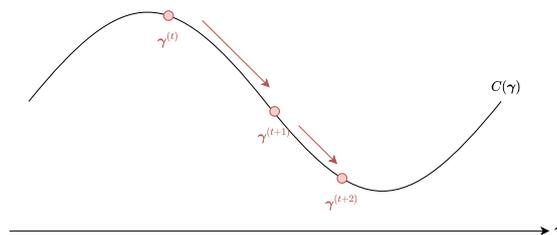


図 4.4: オプティマイザーがパラメータを更新していく様子. パラメータ更新を繰り返すことで, コスト関数 $C(\gamma)$ の最小点を求める.

$\mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ 同士の差を定量化するノルムとして, ダイヤモンドノルム $\|\cdot\|_{\diamond}$ という量が知られている*8. そこで, アンザッツ $U(\gamma)$ の表現力 $\epsilon_{U(\gamma), \nu}^{\diamond(t)}$ を,

$$\epsilon_{U(\gamma), \nu}^{\diamond(t)} := \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma), \nu}^{(t)} \right\|_{\diamond} \quad (4.9)$$

で定義する.

アンザッツ $U(\gamma)$ の表現力 $\epsilon_{U(\gamma), \nu}^{\diamond(t)}(X)$, $\epsilon_{U(\gamma), \nu}^{\diamond(t)}$ は, 最も表現能力のあるユニタリ V との差として定義したので, 表現力の値が小さいほど, アンザッツがより豊かな表現能力を持つという点に注意しなければならない. 以後, 本論文では表現力と表現能力を厳密に使い分ける.

4.1.3 オプティマイザー

オプティマイザーとは, 関数の最小点を求めるアルゴリズムのことをいう. 多くのオプティマイザーは, 図 4.4 のように, 関数のパラメータの更新を繰り返すことで関数の最小点を求める. 第 t 回目のパラメータ更新を第 t イテレーションと呼び, 第 t イテレーションにおけるパラメータの値を $\gamma^{(t)}$ と書く. 変分量子アルゴリズムでは, 量子コンピュータ上で計算したコスト関数の値やその勾配の値をもとに, 古典コンピュータ上でパラメータの更新を行う.

オプティマイザーは, コスト関数の 1 階微分や 2 階微分の情報, つまり勾配の情報を用いるオプティマイザーとコスト関数の勾配の情報を用いないオプティマイザーに大別される. コスト関数の 2 階微分の情報を用いるオプティマイザーとして, ニュートン法 [50] が挙げられる. また, コスト関数の 1 階微分の情報を用いるオプティマイザーとして, 共役勾配法 [50], L-BFGS [50], 確率的勾配降下法 [51] が挙げられる. 一方, コスト関数の勾配の情報を用いないオプティマイザーとして, Nelder-Mead [52], COBYLA (Constrained Optimization By Linear Approximation optimizer) [53], SPSA (Simultaneous Perturbation Stochastic Approximation) [54], ベイズ最適化 [55], 逐次最小化アルゴリズム [37], Rotoselect [56] などが挙げられる. 特に, 逐次最小化アルゴリズムと Rotoselect は, 変分量子アルゴリズムのコスト関数に特化したオプティマイザーである.

*8 ダイヤモンドノルムについては, 付録 D.2 を参照.

以下では、変分量子アルゴリズムにおける確率的勾配降下法と逐次最小化アルゴリズムについてそれぞれ述べる。

確率的勾配降下法

まず、変分量子アルゴリズムのコスト関数の勾配をいかにして計算するかを述べる。パラメータ γ の第 j 成分 γ_j に関するコスト関数 (4.1) の勾配は、

$$\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma_j} = \sum_i \frac{\partial \langle O_i \rangle_\gamma}{\partial \gamma_j} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x} \Big|_{x=\langle O_i \rangle_\gamma} \quad (4.10)$$

で表される。ここで、 $\langle O_i \rangle_\gamma := \text{Tr} [O_i U(\gamma) \rho_i U(\gamma)^\dagger]$ とした。この勾配を計算するには、各 i に対して、 $\langle O_i \rangle_\gamma$ と $\partial_{\gamma_j} \langle O_i \rangle_\gamma$ を計算すれば良い。 $\langle O_i \rangle_\gamma$ は、量子状態 ρ_i にアンザッツ $U(\gamma)$ を作用させて、物理量 O_i を測定することで得られる。一方、 $\partial_{\gamma_j} \langle O_i \rangle_\gamma$ は、例えば差分法を用いることで近似的に求めることができる。しかし、アンザッツの構造によっては、パラメータシフトルール [16] と呼ばれる方法で $\partial_{\gamma_j} \langle O_i \rangle_\gamma$ を正確に求めることができる。

ここでは、アンザッツとして (4.2) で定義した $U_{\text{RPQC}}(\gamma)$ をとり、いかにして $\partial_{\gamma_j} \langle O_i \rangle_\gamma$ をパラメータシフトルールによって求めるかを述べる。このとき、 $\langle O_i \rangle_\gamma = \text{Tr} [O_i U_{\text{RPQC}}(\gamma) \rho_i U_{\text{RPQC}}(\gamma)^\dagger]$ は、 γ_j に依らない実数 a_1, a_2, a_3 を用いて、

$$\langle O_i \rangle_\gamma = a_1 \sin 2\gamma_j + a_2 \cos 2\gamma_j + a_3 \quad (4.11)$$

と表すことができる [37]。したがって、 γ の第 j 成分 γ_j をそれぞれ $\gamma_j \pm \pi/4$ に置き換えたものを γ_\pm とすれば、

$$\frac{\partial \langle O_i \rangle_\gamma}{\partial \gamma_j} = \langle O_i \rangle_{\gamma_+} - \langle O_i \rangle_{\gamma_-} \quad (4.12)$$

を得る。つまり、量子状態 ρ_i にアンザッツ $U(\gamma_\pm)$ を作用させて、物理量 O_i を測定して得られた結果 $\langle O_i \rangle_{\gamma_\pm}$ から $\partial_{\gamma_j} \langle O_i \rangle_\gamma$ を正確に計算することができる。ただし、実際には $\langle O_i \rangle_{\gamma_\pm}$ を有限回の物理量の測定によって推定するので、その真の値を得ることはできず、統計誤差が生じることに注意しておく。このように $\partial_{\gamma_j} \langle O_i \rangle_\gamma$ を計算する方法をパラメータシフトルールという。ここでは、 $U_{\text{RPQC}}(\gamma)$ のような構造を持つアンザッツの構造に関するパラメータシフトルールを考えたが、より一般的なアンザッツの構造に対するパラメータシフトルールも提案されている [57, 58, 59]。

勾配の情報を用いる代表的なオプティマイザーの1つとして、勾配降下法が挙げられる。勾配降下法とは、コスト関数のパラメータを $\gamma^{(0)}$ に適当に初期化した後

$$\gamma^{(t+1)} \leftarrow \gamma^{(t)} - \alpha \nabla C(\gamma^{(t)}) \quad (4.13)$$

のように、勾配方向にパラメータの更新を行うことを何度も繰り返すことで、コスト関数の最小点を求めるアルゴリズムである。ここで、 $\alpha \in \mathbb{R}$ を学習率という。上述したように、変分量子アルゴリズムにおけるコスト関

数の勾配の評価では、有限回の物理量の測定によって $\nabla C(\gamma^{(t)})$ を推定していることに注意しなければならない。このように、コスト関数の勾配の値を推定する勾配降下法を一般に確率的勾配降下法という。ここまで、学習率 α はイテレーション t に依らない定数としていたが、Adam オプティマイザー [60] のように、学習率 α をイテレーション t ごとに更新させることで、オプティマイザーの収束性を向上させることができる [51]。

逐次最小化アルゴリズム

逐次最小化アルゴリズムは、変分量子アルゴリズムのコスト関数が、ある 1 つのパラメータに注目すると単純な関数形で書けるという性質を生かした最適化アルゴリズムである。コスト関数が、4.2 で述べる変分量子固有値ソルバーや Fixed input state compiling と呼ばれる変分量子アルゴリズムのように、

$$C_{\text{RPQC}}(\gamma) = \text{Tr} \left[O U_{\text{RPQC}}(\gamma) \rho U_{\text{RPQC}}(\gamma)^\dagger \right] \quad (4.14)$$

で表せるとする。ここで、アンザッツは (4.2) で定義した $U_{\text{RPQC}}(\gamma)$ とした。この設定の下、パラメータ γ_j に注目してコスト関数の解析的な性質を考える。第 t イテレーションにおけるコスト関数の値 $C_{\text{RPQC}}(\gamma^{(t)})$ において、 γ_j 以外のパラメータを固定した関数

$$C_j^{(t)}(\gamma_j) := C_{\text{RPQC}}(\gamma) \Big|_{\gamma_{j'} = \gamma_{j'}^{(t)} (j' \neq j)} \quad (4.15)$$

は、 γ_j に依らない実数 $a_1^{(t)}, a_2^{(t)}, a_3^{(t)}$ を用いて、

$$C_j^{(t)}(\gamma_j) = a_1^{(t)} \sin 2\gamma_j + a_2^{(t)} \cos 2\gamma_j + a_3^{(t)} \quad (4.16)$$

と表すことができる [37]。実数 $a_1^{(t)}, a_2^{(t)}, a_3^{(t)}$ は、 $C_j^{(t)}(\gamma_j)$ の独立な 3 点の値から計算できる。例えば、独立な 3 点として、 $\gamma_j^{(t)}, \gamma_j^{(t)} + \frac{\pi}{4}, \gamma_j^{(t)} - \frac{\pi}{4}$ を選べばよい。すると、 $C_j^{(t)}(\gamma_j) = a_1^{(t)} \sin 2\gamma_j + a_2^{(t)} \cos 2\gamma_j + a_3^{(t)}$ は簡単な三角関数なので、その最小点を容易に求めることができる。このように、コスト関数のあるパラメータ γ_j について注目してみれば、 $C_j^{(t)}(\gamma_j)$ の最小点を求めることができる。この最小点を求めるステップを、注目するパラメータ γ_j の添字 j を変化させて何度も繰り返すことで、コスト関数の最小点を探索するアルゴリズムを逐次最小化アルゴリズムという。疑似コードを図 4.5 に示した。逐次最小化アルゴリズムは、既存のオプティマイザーに比べ、コスト関数の推定における統計誤差に対して剛健かつ収束が速いことが数値計算により確かめられている [37]。いま、アンザッツとして $U_{\text{RPQC}}(\gamma)$ を考えたが、より一般的なアンザッツに拡張して考えることができる。例えば、アンザッツとして粒子数保存アンザッツを用いた場合の逐次最小化アルゴリズムについては、5.4.3 で述べる。

雑音のある NISQ デバイス上で逐次最小化アルゴリズムが有用であることを議論する。変分量子アルゴリズムのコスト関数を、より一般に

$$C(\gamma) = \text{Tr} \left[O U(\gamma) \rho U(\gamma)^\dagger \right] \quad (4.17)$$

とし、第 t イテレーションにおけるコスト関数の値 $C(\gamma^{(t)})$ において、 γ_j 以外のパラメータを固定した関数を $C_j^{(t)}(\gamma_j)$ とする。逐次最小化アルゴリズムでは、パラメータの添字 j を変化させて $C_j^{(t)}(\gamma_j)$ の最小点を求め

Algorithm 1 逐次最小化アルゴリズム

Require: コスト関数は, (4.14) で定義した $C_{\text{RPQC}}(\gamma)$ とする.

```

1: パラメータの初期値  $\gamma^{(0)}$  を定める.
2: while  $t < t_{\text{max}}$  do
3:   for  $j = 1, 2, \dots, N_p$  do
4:     for  $j' = 1, 2, \dots, N_p$  do
5:       if  $j' = j$  then
6:          $C_j^{(t)}(\gamma_j^{(t)}), C_j^{(t)}(\gamma_j^{(t)} + \frac{\pi}{4}), C_j^{(t)}(\gamma_j^{(t)} - \frac{\pi}{4})$  を推定し,  $a_1^{(t)}, a_2^{(t)}, a_3^{(t)}$  を求める.
7:          $\gamma_j^{(t+1)} \leftarrow \arg \min_{\gamma_j} a_1^{(t)} \sin \gamma_j + a_2^{(t)} \cos \gamma_j + a_3^{(t)}$ 
8:       else
9:          $\gamma_{j'}^{(t+1)} \leftarrow \gamma_{j'}^{(t)}$ 
10:      end if
11:    end for
12:     $t \leftarrow t + 1$ 
13:  end for
14: end while

```

図 4.5: 変分量子アルゴリズムにおける逐次最小化アルゴリズムの疑似コード.

ることを繰り返す. そのアルゴリズムの流れは, 図 4.6 のようになる. 変分量子アルゴリズムを NISQ デバイス上で実装するためには, アンザッツを $U(\gamma) = U_{N_g} U_{N_g-1} \dots U_2 U_1$ のようにハードウェア上で実装可能な基本ゲートに分解する必要がある. そこで, NISQ デバイスへの雑音のモデルとして, (3.25) で定義した

$$\mathcal{N} = \bigcirc_{j=1}^{N_p} (\mathcal{D}_{p_i} \circ \mathcal{U}_i) \quad (4.18)$$

なるモデルを考える. ここで, CPTP 写像 $\mathcal{U}_i(\cdot) = U_i(\cdot)U_i^\dagger$ とし, \mathcal{D}_{p_i} ($p_i \in (0, 1]$) は分極解消チャンネルとした. この雑音のモデルに対して, 逐次最小化アルゴリズムが剛健であることを裏付ける次の定理 4.1 が成立する. 定理の証明は, 付録 F.2 に述べた.

定理 4.1 (4.17) で定義したコスト関数 $C(\gamma)$ を考える. (4.18) で定義した雑音のモデル \mathcal{N} の下で計算されるコスト関数を $\tilde{C}(\gamma)$ とする. このとき, 物理量の期待値の推定のための測定回数が無限回であれば, 任意の自然数 t に対して, 逐次最小化アルゴリズムによって求めた第 t イテレーション後の $C(\gamma)$ の最適点と $\tilde{C}(\gamma)$ の最適点は一致する.

Algorithm 2 一般的な逐次最小化アルゴリズム**Require:** コスト関数は (4.17) の形で表される.

```

1: パラメータの初期値  $\gamma^{(0)}$  を定める.
2: while  $t < t_{\max}$  do
3:   for  $j = 1, 2, \dots, N_p$  do
4:     for  $j' = 1, 2, \dots, N_p$  do
5:       if  $j' = j$  then
6:          $\gamma_j^{(t+1)} \leftarrow \arg \min_{\gamma_j} C_j^{(t)}(\gamma_j)$ 
7:       else
8:          $\gamma_{j'}^{(t+1)} \leftarrow \gamma_{j'}^{(t)}$ 
9:       end if
10:    end for
11:     $t \leftarrow t + 1$ 
12:  end for
13: end while

```

図 4.6: 一般的な逐次最小化アルゴリズムの疑似コード.

4.2 変分量子アルゴリズムの応用

4.2.1 変分量子固有値ソルバー

変分量子固有値ソルバー (Variational Quantum Eigensolver, VQE) は、量子系の基底状態とその固有値 (基底エネルギー) を求める変分量子アルゴリズムである [13].

変分量子固有値ソルバーでは、量子コンピュータ上で量子系を表現する必要があるため、対象となる量子系をスピン系にマッピングする。例えば、ジョルダン・ウィグナー変換 [61] やブラヴィイ・キタエフ変換 [62, 63] によって、フェルミオン系をスピン系にマッピングできる。こうして、対象となる量子系を n スピン系にマッピングしたハミルトニアン H とすると、一般にハミルトニアン H は、

$$H = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{\alpha=1}^3 h_{\alpha}^i \sigma_{\alpha}^i + \sum_{i,j=0}^{n-1} \sum_{\alpha,\beta=1}^3 h_{\alpha\beta}^{ij} \sigma_{\alpha}^i \sigma_{\beta}^j + \dots \quad (4.19)$$

のように表される [13]. ここで、各 $h_{\alpha}^i, h_{\alpha\beta}^{ij}$ 等は実数、 $\sigma_{\alpha}^i := I^{\otimes i} \otimes \sigma_{\alpha} \otimes I^{\otimes (n-i-1)}$ とした。

変分量子固有値ソルバーのコスト関数は、

$$C_{\text{VQE}}(\gamma) = \langle \psi(\gamma) | H | \psi(\gamma) \rangle \quad (4.20)$$

で定義される。ここで、 $|\psi(\gamma)\rangle = U(\gamma)|\psi_0\rangle$ は、初期状態 $|\psi_0\rangle$ にアンザッツ $U(\gamma)$ を作用させて得られる量子状態で、試行状態という。試行状態は n スピン系の量子状態であるから、 2^n 次元の複素内積空間の単位ベクトルで表現される。試行状態を愚直に古典コンピュータ上で表現するには $O(2^n)$ ビットが必要であるが、量子コンピュータ上であれば n 量子ビットで良い。つまり、変分量子固有値ソルバーでは、古典コンピュータ上では表現しきれない程に次元の大きい複素内積空間の試行状態から基底状態を探索することができよう。

4.2.2 Fixed input state compiling

Fixed input state compiling (FISC) とは、 n 量子ビットの状態 $|\psi_0\rangle$ に作用する V と同等の計算を行う量子ゲートを求める変分量子アルゴリズムである [22]。すると、 $U(\gamma)$ をアンザッツすれば、FISC の目的は

$$V|\psi_0\rangle = U(\gamma)|0\rangle^{\otimes n} \quad (4.21)$$

を満たす γ を求めることにある。

2つの量子状態 $V|\psi_0\rangle, U(\gamma)|0\rangle^{\otimes n}$ 間の近さは、例えば、忠実度 $F(V|\psi_0\rangle, U(\gamma)|0\rangle^{\otimes n})$ で定量化される。したがって、(4.21) を近似的に満たす $U(\gamma)$ を求めるには、忠実度を最大化する γ を求めればよい。これは、コスト関数 $C_{\text{global}}(\gamma) = -F(V|\psi_0\rangle, U(\gamma)|0\rangle^{\otimes n})^2$ を最小化することで実現できる。このコスト関数は、物理量

$$O_{\text{global}} := -(|0\rangle\langle 0|)^{\otimes n} \quad (4.22)$$

を用いて、 $C_{\text{global}}(\gamma) = \text{Tr}[O_{\text{global}}|\psi(\gamma)\rangle\langle\psi(\gamma)|]$ と書ける。ここで、 $|\psi(\gamma)\rangle := U(\gamma)^\dagger V|\psi_0\rangle$ とした。 $C_{\text{global}}(\gamma)$ は、 $|\psi(\gamma)\rangle$ の n 量子ビット全てを測定して $|0\rangle^{\otimes n}$ を得る確率に、 -1 をかけることで得られる。したがって、 $C_{\text{global}}(\gamma)$ は -1 以上 0 以下の値をとりうる。

FISC では、 C_{global} 以外のコスト関数を定義することができる。物理量 O_{local} を、

$$O_{\text{local}} := -\frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} I^{\otimes j} \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes I^{\otimes n-j-1} \quad (4.23)$$

として、FISC のコスト関数を $C_{\text{local}}(\gamma) = \text{Tr}[O_{\text{local}}|\psi(\gamma)\rangle\langle\psi(\gamma)|]$ で定義する。すると、 $C_{\text{local}}(\gamma)$ は、 -1 以上 0 以下の値をとり、 γ が (4.21) を満たすときにのみ最小値 -1 をとる。 $C_{\text{local}}(\gamma)$ は、 $|\psi(\gamma)\rangle$ の第 j 量子ビットのみを測定して $|0\rangle$ が得られる確率の、 $j = 0, 1, \dots, n-1$ に対する平均に -1 をかけることで得られる。

4.3 バレンプラトー

変分量子アルゴリズムのコスト関数には、バレンプラトーと呼ばれる勾配消失問題が起こりうる。変分量子アルゴリズムで解く問題のサイズ、つまり用いる量子ビットの数に対して、指数的にコスト関数の勾配が消失してしまう問題である。図 4.7 に示すように、バレンプラトーを引き起こす変分量子アルゴリズムのコスト関

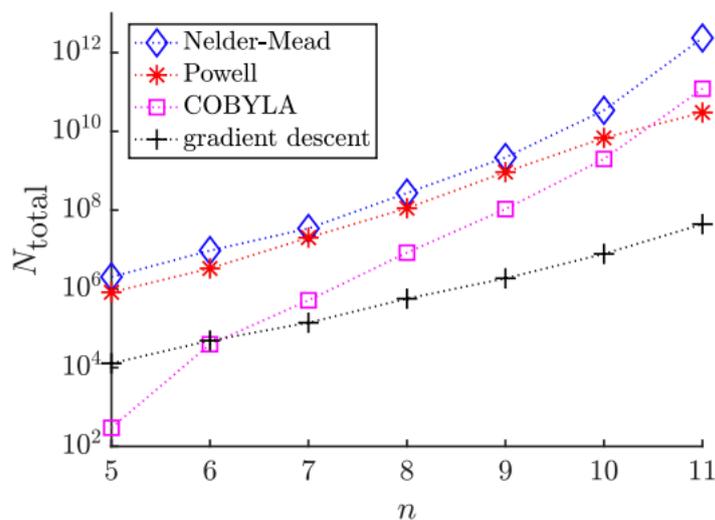


図 4.7: バレンプラトーを引き起こす量子ビット数 n の変分量子アルゴリズムにおいて, 必要な物理量の測定回数 N_{total} [33]. 勾配の情報を用いるオプティマイザー (gradient descent) に限らず, 勾配の情報を用いないオプティマイザー (Nelder-Mead, Powell, COBYLA) についても, 量子ビット数に対して指数的に多くの物理量の測定が必要である.

数やその勾配の推定のためには, 量子ビットの数に対して指数的に大きな回数の物理量の測定が必要であり, 最適化を効率的に行うことはできない. つまり, コスト関数が満たすべき条件 (C4) を満たさない.

近年, どのような変分量子アルゴリズムにバレンプラトーが生じるのか否かの議論がなされている. 例えば, ユニタリ 2 - デザインをなす程に十分深い RPQC を用いた変分量子アルゴリズムにはバレンプラトーが起こる [25]. 量子ビットの数 n に対して $O(\log n)$ 程の深さの Alternating Layerd Ansatz というクラスのアプローチを用いた変分量子アルゴリズムについては, (4.22) で定義した O_{global} のように全ての量子ビットに作用するような物理量 O を用いる場合にはバレンプラトーが起こる一方で, (4.23) で定義した O_{local} ように一部の量子ビットに作用するような物理量 O を用いる場合にはバレンプラトーが起こらないことが示されている [26]. また, バレンプラトーが起こらないアルゴリズムの例として, 量子畳み込みニューラルネットワーク [64] やアンザッツがツリーテンソルネットワーク構造を持つ量子ニューラルネットワーク [65] が知られている.

バレンプラトーの影響を軽減するためのアルゴリズムも提案され始めている [66, 67, 68, 69, 70]. 例えば, パラメータの一部をランダムに初期化し, 残りのパラメータをアンザッツが恒等演算子となるように選ぶパラメータ初期化の手法である [66]. また, アンザッツのパラメータを層ごとに最適化していく手法が提案されている [67].

以下では、コスト関数

$$C_{\text{RPQC}}(\gamma) := \text{Tr} \left[O U_{\text{RPQC}}(\gamma) \rho U_{\text{RPQC}}(\gamma)^\dagger \right] \quad (4.24)$$

を例として、バレンプラトールについてより詳細に議論する。ここで、 ρ は n 量子ビットの量子状態とし、 $U_{\text{RPQC}}(\gamma)$ は (4.2) で定義したアンザッツである。4.3.1 で、NISQ デバイスの雑音がないという仮定のもとに引き起こされるバレンプラトールについて述べる。4.3.2 で、外界からの NISQ デバイスへの雑音がコスト関数の勾配に及ぼす影響を議論する。

4.3.1 noise-free バレンプラトール

(noise-free) バレンプラトールは、形式的には次のように定義される。

定義 4.2 Γ -値確率変数 γ は一様分布に従うとする。 n 量子ビットの変分量子アルゴリズムのコスト関数を $C: \Gamma \ni \gamma \mapsto C(\gamma) \in \mathbb{R}$ とし、コスト関数 C は C^1 級とする*⁹。このとき、 $C(\gamma)$ がパラメータ γ_j に関してバレンプラトールであるとは、パラメータ γ_j に関するコスト関数の 1 階微分の $\partial_{\gamma_j} C(\gamma)$ の期待値が 0 で、分散がある $b > 1$ を用いて $O(b^{-n})$ でスケールすること。つまり、

$$\mathbb{E}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right] = 0, \quad \mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right] = O(b^{-n}) \quad (4.25)$$

となることをいう。

定義 4.2 にチェビシエフの不等式 (補題 A.15) を用いると、任意の $\delta > 0$ に対し、

$$\nu \left(\left| \frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right| \geq \delta \right) \leq \frac{1}{\delta^2} \mathbb{E}_\gamma \left[\left| \frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right|^2 \right] = \frac{1}{\delta^2} \mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right] = O(b^{-n}) \quad (4.26)$$

を得る。ここで、 ν は γ の従う一様分布とした。(4.26) は、 Γ から一様に γ を選んだ時に、その点での γ_j に関する勾配の大きさが δ 以上である確率が、量子ビットの数 n に対して指数的に減少することを意味している。つまり、量子ビットの数 n が十分大きいと、図 4.8 のように、コスト関数の定義域 Γ の広い領域でコスト関数の勾配がほとんど 0 になっていることを示している。また、バレンプラトールが生じるようなコスト関数には、図 4.8 のように峡谷 (narrow gorge) が生じる [72]。

さて、コスト関数 $C_{\text{RPQC}}(\gamma)$ がバレンプラトールか否かを調べる。そこで、定義 4.2 に基づき、 γ を一様分布 ν に従う確率変数とみなし、 γ_j に関するコスト関数の勾配の期待値と分散を計算する。まず、 $U_{\text{RPQC}}(\gamma)$ を注目しているパラメータ γ_j に依存する部分と依存しない部分に分解して考える。つまり、図 4.9 のように、

$$U_R(\gamma_R = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{j-1})) := W_j \prod_{j'=1}^{j-1} U_{j'}(\gamma_{j'}) W_{j'} \quad (4.27)$$

*⁹ [71] にない、コスト関数は C^1 級と仮定した。 $\partial_{\gamma_j} C(\gamma)$ が連続であれば、 $\partial_{\gamma_j} C(\gamma)$ が確率変数になるからである。

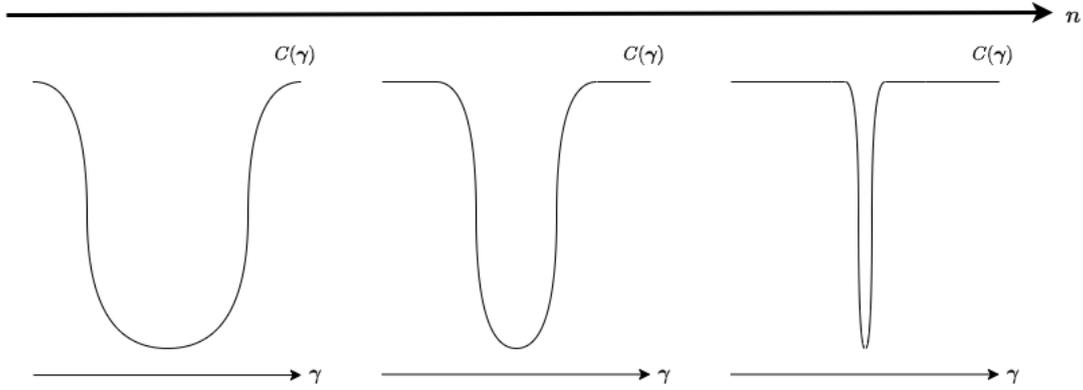


図 4.8: 変分量子アルゴリズムのコスト関数に生じるバレンプラトーのイメージ。量子ビットの数 n に対して指数的に、コスト関数の平坦な領域が増大する。

$$U_L(\gamma_L = (\gamma_{j+1}, \gamma_{j+2}, \dots, \gamma_{N_p})) := \prod_{j'=j+1}^{N_p} U_{j'}(\gamma_{j'}) W_{j'} \quad (4.28)$$

として, $U_{\text{RPQC}}(\gamma) = U_L(\gamma_L) U_j(\gamma_j) U_R(\gamma_R)$ とする。すると, コスト関数のパラメータ γ_j に関する勾配は,

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma_j} &= \text{Tr} [O U_L(\gamma_L) U_{j, \gamma_j}(\gamma_j) U_R(\gamma_R) \rho U_R(\gamma_R)^\dagger U_j(\gamma_j)^\dagger U_L(\gamma_L)^\dagger] \\ &\quad + \text{Tr} [O U_L(\gamma_L) U_j(\gamma_j) U_R(\gamma_R) \rho U_R(\gamma_R)^\dagger U_{j, \gamma_j}(\gamma_j)^\dagger U_L(\gamma_L)^\dagger] \end{aligned} \quad (4.29)$$

で与えられる。ここで, $U_{j, \gamma_j}(\gamma_j) := \partial \gamma_j U_j(\gamma_j)$ とした。いま, γ_R, γ_L はそれぞれ確率変数であり, それらに依存する $U_R(\gamma_R), U_L(\gamma_L)$ もまた確率変数である。計算を進めるために, $U(2^n)$ -値確率変数 $U_R(\gamma_R), U_L(\gamma_L)$ がユニタリ 2-デザインである程に十分な表現能力を持つとする。すると, 後に示す系 6.4 より,

$$\mathbb{E}_\gamma \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right] = 0 \quad (4.30)$$

$$\mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right] = \frac{2^{n+1} \Delta_{2^n}^{(2)}(\rho) \Delta_{2^n}^{(2)}(O) \Delta_{2^n}^{(2)}(V_j)}{(4^n - 1)^2} \quad (4.31)$$

を得る。ここで,

$$\Delta_d^{(2)}(X) := \text{Tr}[X^2] - \frac{\text{Tr}[X]^2}{d} \quad (4.32)$$

とした。例えば, O を (4.22) で定義した O_{global} とし, ρ を純粋状態とし, V_j をトレースレスとすると, $\Delta_{2^n}^{(2)}(V_j) = 2^n, \Delta_{2^n}^{(2)}(O) = \Delta_{2^n}^{(2)}(\rho) = 1 - 2^{-n}$ であるから,

$$\mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right] = \frac{1}{2(2^n + 1)^2} = O(4^{-n}) \quad (4.33)$$

となる。すると, コスト関数 $C_{\text{RPQC}}(\gamma)$ の勾配の期待値が 0 であり, 分散が量子ビットの数 n に対して指数的に減少していくので, 定義 4.2 よりバレンプラトーが生じていることがわかる。ここで, バレンプラトーが生じていることを導くのに, $U(2^n)$ -値確率変数 $U_R(\gamma_R), U_L(\gamma_L)$ がユニタリ 2-デザインである程に十分な表現能力を持つという仮定をおいたことに注意しておく。

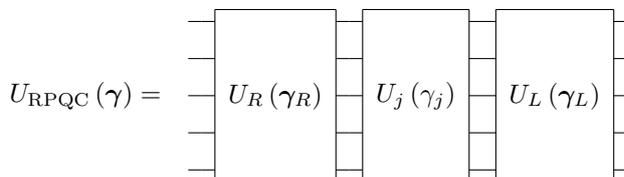


図 4.9: $U_{\text{RPQC}}(\gamma)$ の $U_R(\gamma_R)$, $U_j(\gamma_j)$, $U_L(\gamma_L)$ への分解.

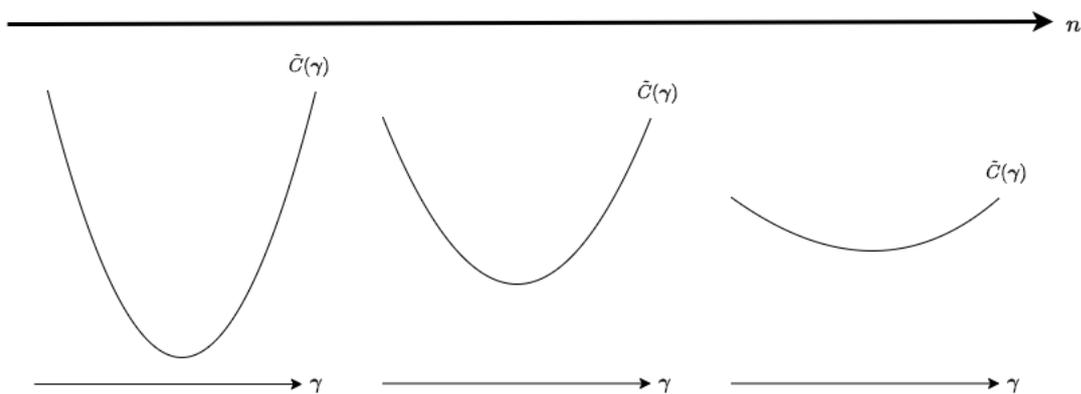


図 4.10: 変分量子アルゴリズムのコスト関数に生じる noise-induced バレンプラトーのイメージ. 量子ビットの数 n に対して指数的に, コスト関数が全体的に平坦になっていく.

4.3.2 Noise-induced バレンプラトー

NISQ デバイスは誤り訂正機能を持たないので, 外界からの雑音の影響を受ける. そこで, 外界からの雑音の影響によって, 変分量子アルゴリズムのコスト関数の勾配がどのようになるかを議論する.

NISQ デバイスへの雑音のモデルとして,

$$\mathcal{N} = \bigcirc_{j=1}^{N_p} (\mathcal{D}_{p_j} \circ \mathcal{U}_j) \tag{4.34}$$

なるモデルを考える. ここで, $\mathcal{U}_j(\cdot) = U_j(\gamma_j) W_j(\cdot) W_j^\dagger U_j(\gamma_j)^\dagger$ とし, \mathcal{D}_{p_j} ($p_j < 1$) は分極解消チャンネルとした. 雑音のモデル \mathcal{N} は, アンザツを構成する各量子ゲート $U_j(\gamma_j)$ が作用する度に, 分極解消チャンネル \mathcal{D}_{p_j} が作用するというモデルとなっている. すると, この雑音のモデルはの下でのコスト関数 $\tilde{C}_{\text{PQC}}(\gamma)$ は,

$$\tilde{C}_{\text{PQC}}(\gamma) = \text{Tr} [O \mathcal{N}(\rho)] \tag{4.35}$$

で表せる. ここで, 命題 3.10 より, $\mathcal{U}(\cdot) = U_{\text{RPQC}}(\gamma)(\cdot)U_{\text{RPQC}}(\gamma)^\dagger$ とし, $p := \prod_{j=1}^{N_p} p_j$ とすると,

$$\mathcal{N} = \mathcal{D}_p \circ \mathcal{U} \tag{4.36}$$

である。したがって、雑音のモデル \mathcal{N} の下でのコスト関数 $\tilde{C}(\gamma)$ は、

$$\tilde{C}_{\text{PQC}}(\gamma) = \text{Tr}[O(\mathcal{D}_p \circ \mathcal{U})(\rho)] = pC(\gamma) + \frac{1-p}{2^n} \text{Tr}[O] \quad (4.37)$$

となる。 $|p| < 1$ であるから、雑音のモデル \mathcal{N} の下でのコスト関数 $\tilde{C}(\gamma)$ は、雑音がない場合のコスト関数 $C(\gamma)$ に比べて、 p 倍縮小されることがわかる。このとき、雑音のモデル \mathcal{N} の下でのコスト関数 $\tilde{C}(\gamma)$ のパラメータ γ_j に関する勾配は、 $q := \max_{j=1,2,\dots,N_p} |p_j| (< 1)$ として、

$$\left| \frac{\partial \tilde{C}_{\text{PQC}}(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right| = \left| p \frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right| \leq q^{N_p} \left| \frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right| \quad (4.38)$$

と評価できる。よって、 $N_p = \Omega(n)$ とすると、雑音のモデル \mathcal{N} の下でのコスト関数 $\tilde{C}(\gamma)$ の勾配の絶対値が、雑音からの寄与 q^{N_p} により、量子ビットの数 n に対して指数的に減衰していく。このように、雑音の影響によって引き起こされる勾配消失問題を、noise-induced バレンプラトーと呼ぶ [27]。

noise-induced バレンプラトーと定義 4.2 に定義したバレンプラトーは異なる概念であることに注意する。定義 4.2 に定義したバレンプラトーを、noise-induced バレンプラトーと区別して、noise-free バレンプラトーということもある。noise-free バレンプラトーは、図 4.8 のように、パラメータ空間のほとんどの領域コスト関数の勾配が十分小さくなる現象であった。一方で、noise-induced バレンプラトーは、図 4.10 のように、コスト関数全体が平坦になっていく現象である。

第 5 章

NISQ デバイスの制約を超えた長時間発展シミュレーション

5.1 はじめに

量子コンピュータは、その量子ビットの数 n に対して指数的に大きな $O(2^n)$ 次元の情報を表現できる。一方、古典コンピュータは、その古典ビットの数 n に対して $O(n)$ 次元の情報を表現できる。この量子コンピュータの持つ広大な空間が、古典コンピュータでは実現不可能な程にサイズの大きい系の時間発展シミュレーションを実現する可能性を秘めている。

最も基本的な量子コンピュータ上での系の時間発展シミュレーションでは、 Trotter 分解によって系の時間発展演子に対応する量子ゲートを量子コンピュータ上で実装する。しかしながら、Trotter 分解に依る手法では、シミュレーション時間に比例して、必要な量子ゲートの深さが深くなる。つまり、精度良く計算可能な量子回路の深さが限られた NISQ デバイス上での長時間の時間発展シミュレーションは困難である。

そこで、NISQ デバイス上での長時間の時間発展シミュレーションを可能にする、Restarted Quantum Dynamics (RQD) と呼ばれるアルゴリズムが提案された [11]。RQD は、Fixed Input State Compiling (FISC) [22, 23] と呼ばれる変分量子アルゴリズムを繰り返し用いる。4.2.2 で述べたように、FISC とは、量子ビットの状態に作用するユニタリと同等の計算を行う量子ゲートを求める変分量子アルゴリズムであった。RQD では、FISC を用いて、系の時間発展演子に対応する量子ゲートを NISQ で実行可能な深さの量子ゲートに近似する。こうして、NISQ 上での長時間の時間発展シミュレーションが可能になることが期待される。

そこで、本論文では、RQD を用いることで、実際の量子コンピュータ上において、2 サイトの格子シュウィンガーモデル [35] の長時間の時間発展シミュレーションを実現した。加えて、サイズの小さな系に対して、RQD が単なる Trotter 分解による時間発展シミュレーションに比べて有用であることを実証した。本論文では、さらに、古典コンピュータ上でシミュレーション不可能な程にサイズの大きな格子シュウィンガーモデルに対して、RQD が効率的に実行可能かを議論すべく、粒子数保存アンザッツを用いた FISC のコスト関数の解析的

な性質について調べた。

本章の構成は以下の通りである。5.2 では、 Trotter 分解に依る時間発展シミュレーションについて述べる。5.3 では、RQD に依る時間発展シミュレーションについて述べる。5.4 では、RQD に依る格子シュウィンガーモデルの長時間発展シミュレーションをいかにして実現したかを述べる。5.5 では、サイズの小さな格子シュウィンガーモデルに対する、 Trotter 分解と RQD に依る長時間発展シミュレーションの結果を述べる。5.6 では、サイズの大きな格子シュウィンガーモデルに対して、RQD に依る長時間発展シミュレーションが効率的に実行できるかについて述べる。5.7 では、本章で得られた結果について議論する。

5.2 Trotter 分解

ハミルトニアン H で表される系の実時間発展を量子コンピュータ上で行うことを考える。量子コンピュータ上でハミルトニアンを表現するために、考えたい系のハミルトニアンをスピン系のハミルトニアン H_{spin} へと変換する。系の初期状態 $|\psi(0)\rangle$ を量子コンピュータ上で準備し、時間発展演算子 $e^{-iH_{\text{spin}}T}$ を量子ゲートにマッピングすることができれば、時間発展シミュレーションが可能になる。しかしながら、量子コンピュータ上では対象となる量子ゲートを、いくつかの基本ゲートに分解することで実装するので、必ずしも時間発展演算子 $e^{-iH_{\text{spin}}T}$ それ自身を量子ゲートとして実装できるとは限らない。

そこで、 $e^{-iH_{\text{spin}}T}$ を Trotter 分解と呼ばれる方法で、近似的に複数の基本ゲートに分解することを考える。 Trotter 分解では、まず、 Trotter ステップ数 M として、 $e^{-iH_{\text{spin}}T} = (e^{-iH_{\text{spin}}\Delta T})^M$ と分解する。そして、時間 ΔT の時間発展演算子 $e^{-iH_{\text{spin}}\Delta T}$ を量子ゲートに分解することを考える。さらに、ハミルトニアン H_{spin} を $H_{\text{spin}} = \sum_i H_i$ と分解する。ここで、量子コンピュータ上で $e^{-iH_i\Delta T}$ が実装できるようにハミルトニアンを分解する。もし、全ての j, k に対して $[H_j, H_k] = 0$ であれば、 $e^{-iH_{\text{spin}}\Delta T} = \prod_i e^{-iH_i\Delta T}$ が成り立つ。しかしながら、一般に $[H_j, H_k] \neq 0$ ($j \neq k$) であり、このとき、

$$e^{-iH_{\text{spin}}\Delta T} = \prod_i e^{-iH_i\Delta T} + O((\Delta T)^2) = U_{\text{trot}}(\Delta T) + O((\Delta T)^2) \quad (5.1)$$

が成り立つ [7]。ここで、 $e^{-iH\Delta T}$ を $O(\Delta t)$ のオーダーで近似した量子ゲートを $U_{\text{trot}}(\Delta T) := \prod_i e^{-iH_i\Delta T}$ とした。すると、

$$e^{-iH_{\text{spin}}T} = (e^{-iH_{\text{spin}}\Delta T})^M = (U_{\text{trot}}(\Delta T))^M + O((\Delta T)^2) \quad (5.2)$$

であるから、 M 個の $U_{\text{trot}}(\Delta T)$ を作用させることで、欲しかった時間発展演算子 $e^{-iH_{\text{spin}}T}$ を $O(\Delta T)$ の精度で、量子コンピュータ上で実現できる。

Trotter 分解によって、NISQ デバイス上で時間 $T = M\Delta T$ の実時間発展シミュレーションを、 $O((\Delta T))$ の精度で行うことを考える。すると、 $M = T/\Delta T$ 個の量子ゲート $U_{\text{trot}}(\Delta T)$ が必要となる。つまり、図 5.1a に示したように、 Trotter ステップ数 M に比例して、必要な量子ゲートの数が増えていく。よって、計算可能な量子ゲートの深さが限られている NISQ デバイスでは、 Trotter 分解による長時間の時間発展シミュ

レーションの実現は難しいと言える。この問題を解決しうる、Restarted Quantum Dynamics (RQD) と呼ばれる変分量子アルゴリズムを 5.3 で述べる。

5.3 Restarted Quantum Dynamics

RQD は、4.2.2 で述べた FISC という変分量子アルゴリズムを繰り返し用いる。FISC とは、 n 量子ビットの初期状態 $|\psi_0\rangle$ に作用する V と同等の計算を行う量子ゲートを求める目的で、

$$V |\psi_0\rangle = U(\gamma) |0\rangle^{\otimes n} \quad (4.21)$$

を満たす γ を変分的に求めるアルゴリズムであった。FISC では、

$$O_{\text{global}} := -(|0\rangle\langle 0|)^{\otimes n} \quad (5.3)$$

$$O_{\text{local}} := -\frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} I^{\otimes j} \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes I^{\otimes n-j-1} \quad (5.4)$$

として、 $C_{\text{global}}(\gamma) = \text{Tr}[O_{\text{global}} |\psi(\gamma)\rangle\langle\psi(\gamma)|]$ 、 $C_{\text{local}}(\gamma) = \text{Tr}[O_{\text{local}} |\psi(\gamma)\rangle\langle\psi(\gamma)|]$ の 2 種類のコスト関数が定義された。ここで、 $|\psi(\gamma)\rangle := U(\gamma)^\dagger V |\psi_0\rangle$ とした。

さて、RQD について述べる。初期状態 $|\psi(0)\rangle = W |0\rangle^{\otimes n}$ のハミルトニアン H_{spin} で表される系の時間発展シミュレーションを考える。RQD には 2 つのステップ：

- (S1) 時間発展演算子に対応する量子ゲートを FISC によって浅い量子ゲートに近似する
- (S2) 近似した量子ゲートを用いて時間発展シミュレーションをする

がある。(S1) では、 K トロッターステップごとに時間発展演算子を浅い量子ゲートに近似することを繰り返す。まず、FISC によって、 K トロッターステップの時間発展演算子 $(U_{\text{trot}}(\Delta T))^K$ を $U(\hat{\gamma}_1)$ に近似する。ここで、 $\hat{\gamma}_1$ は $(U_{\text{trot}}(\Delta T))^K W |0\rangle^{\otimes n} = U(\gamma_1) |0\rangle^{\otimes n}$ を満たすように最適化されたパラメータである。ただし、FISC に用いる量子ゲート $U(\gamma_1)^\dagger (U_{\text{trot}}(\Delta T))^K W$ は、NISQ が計算可能な量子ゲートの深さより浅くなければならないことに注意する。こうして、時刻 $K\Delta T$ の量子状態 $|\psi(K\Delta T)\rangle$ を $U(\hat{\gamma}_1) |0\rangle^{\otimes n}$ によって作り出すことができる。同様に、時刻 $2K\Delta T$ の量子状態 $|\psi(2K\Delta T)\rangle$ を $U(\hat{\gamma}_2) |0\rangle^{\otimes n}$ によって作り出す。これは、FISC によって、 $(U_{\text{trot}}(\Delta T))^K U(\hat{\gamma}_1) |0\rangle^{\otimes n} = U(\gamma_2) |0\rangle^{\otimes n}$ を満たすように最適化されたパラメータ γ_2 を求めればよい。この手続きを繰り返すことで、時刻 $3K\Delta T$, $4K\Delta T$, ... における量子状態を生成するための浅い量子ゲート $U(\hat{\gamma}_3)$, $U(\hat{\gamma}_4)$, ... を用意することができる。そして、(S2) で、 $U(\hat{\gamma}_1)$, $U(\hat{\gamma}_2)$, ... を $|0\rangle^{\otimes n}$ に作用させることで、時刻 $K\Delta T$, $2K\Delta T$, ... の状態をシミュレーションすることができる。ここで述べた RQD の一連の手続きを 図 5.1b にまとめた。RQD において必要な量子ゲートの深さは、シミュレーション時間に依らない。したがって、RQD によって、NISQ デバイス上の長時間発展シミュレーションを実現できる可能性がある。

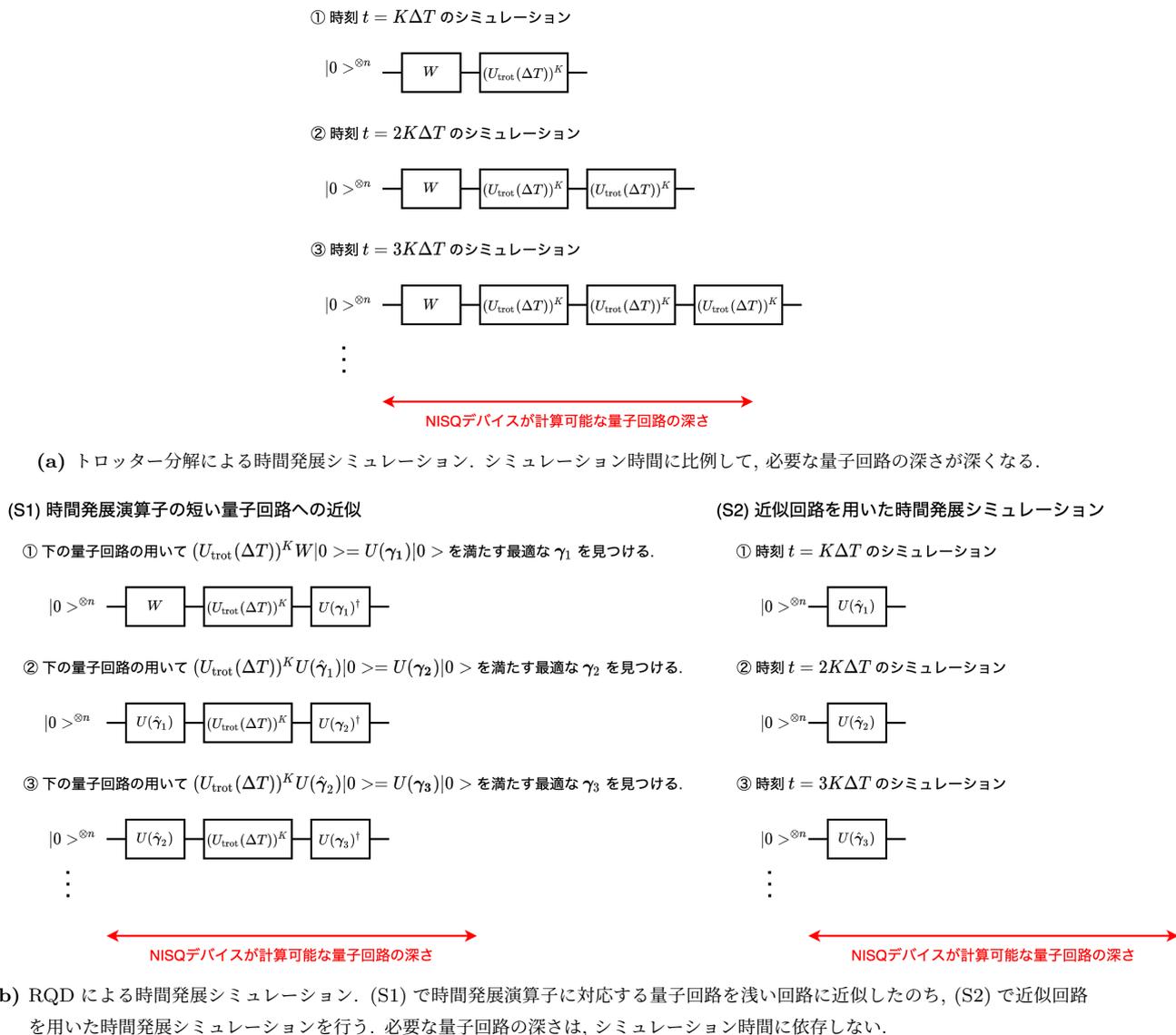


図 5.1

5.4 方法

本論文では, RQD を用いて格子シュウィンガーモデルと呼ばれるモデルの時間発展シミュレーションを行った. 本節では, 5.4.1 で格子シュウィンガーモデルについて述べる. 続いて, 5.4.2 で格子シュウィンガーモデルの時間発展演算子を粒子数保存アンザッツと呼ばれるアンザッツで近似することについて述べる. そして, 5.4.3 でコスト関数の最適化に用いた逐次最小化アルゴリズムについて述べる.

5.4.1 格子シュウィンガーモデル

格子シュウィンガーモデルとは、1次元空間格子上の量子電磁力学を記述し、高エネルギー物理のための量子アルゴリズムのトイモデルとしてよく用いられる [73, 74, 75, 76, 77]. n を正の偶数として、格子間隔 a の n サイトの格子シュウィンガーモデルのハミルトニアン H_{lat} は、

$$H_{\text{lat}} = -\frac{i}{2a} \sum_{j=0}^{n-2} \left(\chi_j^\dagger e^{i\theta_j} \chi_{j+1} - \chi_{j+1}^\dagger e^{-i\theta_j} \chi_j \right) + \frac{g^2 a}{2} \sum_{j=0}^{n-2} L_j^2 + m \sum_{j=0}^{n-1} (-1)^j \chi_j^\dagger \chi_j \quad (5.5)$$

で与えられる. ここで、 χ_j は第 j サイトの質量 m のスタaggerドフェルミオン [35] であり、正準反交換関係

$$\{\chi_j^\dagger, \chi_k\} = \delta_{jk}, \quad \{\chi_j, \chi_k\} = 0 \quad (5.6)$$

を満たす. 奇数サイトの非占有状態を電子の存在に、偶数サイトの占有状態を陽電子の存在に対応させる. また、 L_j と θ_j は、第 j サイトと第 $j+1$ サイトのリンク上のゲージ場とその共役運動量に対応し、正準交換関係

$$[\theta_j, L_k] = i\delta_{jk} \quad (5.7)$$

を満たす. さらに、フェルミオン場とゲージ場の相互作用の強さは結合定数 g で特徴付けられている.

ゲージ場の自由度 L_j と θ_j は、 H_{lat} から取り除くことができる. まず、ガウスの法則

$$L_j - L_{j-1} = \chi_j^\dagger \chi_j - \frac{1 - (-1)^j}{2} \quad (5.8)$$

を境界条件 $L_{-1} = 0$ の下で解くと、

$$L_j = \sum_{k=0}^j \left(\chi_k^\dagger \chi_k - \frac{1 - (-1)^k}{2} \right) \quad (5.9)$$

となり、 L_j をスタaggerドフェルミオン $\chi_0, \chi_1, \dots, \chi_j$ を用いて書き表せる. さらに、スタaggerドフェルミオンを正準反交換関係 (5.6) を保つように

$$\chi_j \rightarrow \prod_{k=0}^{j-1} e^{-i\theta_k} \chi_j \quad (5.10)$$

と再定義することで、 θ_j の自由度を H_{lat} から取り除くことができる. こうして、 H_{lat} をスタaggerドフェルミオンのみを用いて、

$$H_{\text{lat}} = -\frac{i}{2a} \sum_{j=0}^{n-2} \left(\chi_n^\dagger \chi_{n+1} - \chi_{n+1}^\dagger \chi_n \right) + \frac{g^2 a}{2} \sum_{j=0}^{n-2} \left(\sum_{k=0}^j \chi_k^\dagger \chi_k - \frac{1 - (-1)^k}{2} \right)^2 + m \sum_{j=0}^{n-1} (-1)^j \chi_j^\dagger \chi_j \quad (5.11)$$

と書き直せる.

量子コンピュータ上でハミルトニアン H_{lat} を表現するためには、 H_{lat} をスピン系の言葉で書き直す必要があった. ここでは、正準反交換関係 (5.6) を保つように、ジョルダン・ウィグナー変換 [61]

$$\chi_j \rightarrow \frac{X_j - iY_j}{2} \prod_{k=0}^{j-1} (-iZ_k) \quad (5.12)$$

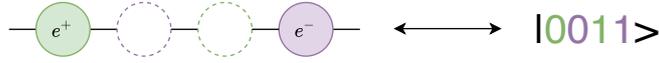


図 5.2: 格子シュウィンガーモデルの状態と量子コンピュータ上での状態の対応. 偶数番目の量子ビットの $|0\rangle$ が陽電子の存在に, 奇数番目の量子ビットの $|1\rangle$ が電子の存在に対応する. ここで, サイトの添字, 量子ビットの添字は 0 オリジンとした.

によって, スタaggered フェルミオンをパウリ行列に書き直す. ここで, $X_j := I^{\otimes j} \otimes X \otimes I^{n-j-1}$, $Y_j := I^{\otimes j} \otimes Y \otimes I^{n-j-1}$, $Z_j := I^{\otimes j} \otimes Z \otimes I^{n-j-1}$ とした. すると, 奇数番目の量子ビットの $|1\rangle$ が電子の存在に, 偶数番目の量子ビットの $|0\rangle$ が陽電子の存在に対応する (図 5.2). この変換によって, H_{lat} をスピン系の言葉で書き換えたハミルトニアン

$$H_{\text{spin}} = \frac{1}{4a} \sum_{j=0}^{n-2} (X_j X_{j+1} + Y_j Y_{j+1}) + \frac{g^2 a}{2} \sum_{j=0}^{n-2} \left(\sum_{k=0}^j \frac{Z_k + (-1)^k}{2} \right)^2 + \frac{m}{2} \sum_{j=0}^{n-1} (-1)^j Z_j \quad (5.13)$$

を得る. ここで, 本来 H_{spin} に加わる恒等演算子に比例する項を書くことを省いた. 1 サイトあたりの粒子の数を数密度と呼ぶことにすると, 数密度 N は,

$$N = \frac{1}{2n} \sum_{j=0}^{n-1} ((-1)^j Z_j + 1) \quad (5.14)$$

で与えられる. また, 物理量 Q

$$Q = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{n-1} Z_j \quad (5.15)$$

を定義すると, $[H_{\text{spin}}, Q] = 0$ が成り立つので, Q は電荷となっている.

格子シュウィンガーモデル H_{spin} の時間発展演算子 $e^{-iH_{\text{spin}}\Delta T}$ の量子ゲート $U_{\text{trot}}(\Delta T)$ への分解を考える. (5.13) で与えられた H_{spin} は,

$$\begin{aligned} H_Z &:= \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^Z Z_j \quad \text{with} \quad \alpha_j^Z := \frac{m(-1)^j}{2} + \frac{g^2 a}{4} \left(\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor - \left\lfloor \frac{j}{2} \right\rfloor \right) \\ H_{XY} &:= \sum_{j=0}^{n-2} \alpha_j^{XY} (X_j X_{j+1} + Y_j Y_{j+1}) \quad \text{with} \quad \alpha_j^{XY} := \frac{1}{4a} \\ H_{ZZ} &:= \sum_{j=0}^{n-3} \sum_{k=j+1}^{n-2} \alpha_{jk}^{ZZ} Z_j Z_k \quad \text{with} \quad \alpha_{jk}^{ZZ} := \frac{g^2 a}{4} (n - k - 1) \end{aligned} \quad (5.16)$$

を用いて,

$$H_{\text{spin}} = H_Z + H_{XY} + H_{ZZ} \quad (5.17)$$

と表せる*1. ここで, 本来 H_{spin} に加わる恒等演算子に比例する項を書くことを省いた. そして, 1 トロッター

*1 導出については, G.1 を参照

$$j \text{ --- } \boxed{R_Z(2\alpha_j^Z \Delta T)} \text{ ---}$$

(a) $e^{-iH_Z \Delta T} = \prod_j e^{-i\alpha_j^Z \Delta T Z_j}$ の各項 $e^{-i\alpha_j^Z \Delta T Z_j}$ の量子ゲートによる実装.

$$\begin{array}{c} j \text{ --- } \boxed{H} \text{ --- } \boxed{S} \text{ --- } \bullet \text{ --- } \boxed{R_X(2\alpha_j^{XY} \Delta T)} \text{ --- } \bullet \text{ --- } \boxed{S^\dagger} \text{ --- } \boxed{H} \text{ ---} \\ | \\ j+1 \text{ --- } \boxed{H} \text{ --- } \boxed{S} \text{ --- } \oplus \text{ --- } \boxed{R_Z(2\alpha_j^{XY} \Delta T)} \text{ --- } \oplus \text{ --- } \boxed{S^\dagger} \text{ --- } \boxed{H} \text{ ---} \end{array}$$

(b) $e^{-iH_{XY} \Delta T} = \prod_j e^{-i\alpha_j^{XY} \Delta T (X_j X_{j+1} + Y_j Y_{j+1})}$ の各項 $e^{-i\alpha_j^{XY} \Delta T (X_j X_{j+1} + Y_j Y_{j+1})}$ の量子ゲートによる実装.

$$\begin{array}{c} j \text{ --- } \bullet \text{ ---} \\ | \\ k \text{ --- } \oplus \text{ --- } \boxed{R_Z(2\alpha_{jk}^{ZZ} \Delta T)} \text{ --- } \oplus \text{ ---} \\ | \\ j \text{ --- } \bullet \text{ ---} \end{array}$$

(c) $e^{-iH_{ZZ} \Delta T} = \prod_{j,k} e^{-i\alpha_{jk}^{ZZ} \Delta T Z_j Z_k}$ の各項 $e^{-i\alpha_{jk}^{ZZ} \Delta T Z_j Z_k}$ の量子ゲートによる実装.

図 5.3: $e^{-iH_Z \Delta T}$, $e^{-iH_{XY} \Delta T}$, $e^{-iH_{ZZ} \Delta T}$ の量子ゲートによる実装.

ステップの時間発展演算子を

$$U_{\text{trot}}(\Delta T) := e^{-iH_Z \Delta T} e^{-iH_{XY} \Delta T} e^{-iH_{ZZ} \Delta T} \quad (5.18)$$

$$= \left(\prod_{j=0}^{n-1} e^{-i\alpha_j^Z \Delta T Z_j} \right) \left(\prod_{j=0}^{n-2} e^{-i\alpha_j^{XY} \Delta T (X_j X_{j+1} + Y_j Y_{j+1})} \right) \left(\prod_{j=0}^{n-3} \prod_{k=j+1}^{n-2} e^{-i\alpha_{jk}^{ZZ} \Delta T Z_j Z_k} \right) \quad (5.19)$$

とする. ここで, $e^{-iH_Z \Delta T}$, $e^{-iH_{XY} \Delta T}$, $e^{-iH_{ZZ} \Delta T}$ はそれぞれ 図 5.3a, 図 5.3b, 図 5.3c で表される量子ゲートを用いて実装できる. 一般に, トロッター分解によって, 系の対称性が必ずしも保たれるとは限らないことに注意しなければならない. しかしながら, 今の場合, $[Q, U_{\text{trot}}(\Delta T)] = 0$ であるから, $U_{\text{trot}}(\Delta T)$ に依る時間発展によって電荷 Q の保存則は保たれる.

5.4.2 アンザッツ: 粒子数保存アンザッツ

RQD が NISQ の雑音下でも機能するためには, $U_{\text{trot}}(\Delta T)$ を系の対称性を保存するアンザッツによって近似することが必要である [11]. 本論文では, 格子シュウィンガーモデルの電荷 Q の保存則を実現するために, 粒子数保存アンザッツを用いた.

まず, n 量子ビット系を記述する複素内積空間 \mathcal{H} の部分空間 $\mathcal{H}_{n,m}$ ($m = 0, 1, \dots, n$) を

$$\mathcal{H}_{n,m} = \text{span} \left\{ \bigotimes_{k=0}^{n-1} |i_k\rangle \mid i_k \in \{0, 1\}, \sum_{k=0}^{n-1} i_k = m \right\} \quad (5.20)$$

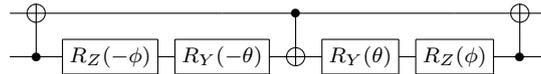
と定義し, m を粒子数と呼ぶ. すると, $\mathcal{H} = \bigoplus_{m=0}^n \mathcal{H}_{n,m}$ である. また, $\mathcal{H}_{n,m}$ は, n 量子ビットのうち, m 量子ビットが $|1\rangle$, $n-m$ 量子ビットが $|0\rangle$ となっている量子状態を正規直交基底として持つ. したがって, $\mathcal{H}_{n,m}$ の次元 $d_{n,m}$ は ${}_n C_m$ となる.

n サイト格子シュウィンガーモデルの電荷 Q の固有値 q の固有空間は, $\mathcal{H}_{n, \frac{n}{2}-q}$ である. これは, 次のように確かめられる. まず, $q \geq 0$ とする. このとき, 電荷 q の系の状態は電子が k 個, 陽電子が $q+k$ 個 ($k=0, 1, \dots, \frac{n}{2}-q$) の状態の重ね合わせである. 今, 奇数番目の量子ビットの $|1\rangle$ が電子の存在に, 偶数番目の量子ビットの $|0\rangle$ が陽電子の存在に対応させる描像をとっていることを思い出しておく. すると, 陽電子が $q+k$ 個, 電子が k 個の状態を量子ビット上で表現すると, 粒子数 $k + (n/2 - (q+k)) = \frac{n}{2} - q$ の量子状態となる. また, 陽電子が $q+k$ 個, 電子が k 個の状態が張る空間の次元は, ${}_{\frac{n}{2}} C_k \cdot {}_{\frac{n}{2}} C_{q+k}$ であるから, 電荷 q の固有空間の次元は, $\sum_{k=0}^{\frac{n}{2}-q} {}_{\frac{n}{2}} C_{q+k} \cdot {}_{\frac{n}{2}} C_k = {}_n C_{\frac{n}{2}-q} = d_{n, \frac{n}{2}-q}$ である*2. 以上より, $q \geq 0$ のとき, 電荷 Q の固有値 q の固有空間は, $\mathcal{H}_{n, \frac{n}{2}-q}$ であることが言えた. $q < 0$ の場合も同様に示すことができる. したがって, 格子シュウィンガーモデルの電荷 Q の保存則は, 量子ビット上の粒子数の保存則と言い換えることができる.

そこで, 量子ビット上の粒子数保存を満たす粒子数保存アンザッツと呼ばれるアンザッツを考える. 粒子数保存アンザッツの最も単純なものは特に A ゲート [11] と呼ばれる. A ゲート $A(\theta, \phi)$ は, 2 量子ビットに作用する量子ゲートで, 計算基底 $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ による行列表現

$$A(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sin \theta & e^{i\phi} \cos \theta & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\theta \in [0, 2\pi), \phi \in [0, 2\pi)) \quad (5.21)$$

によって定義される. A ゲートは R_Y, R_Z, CNOT ゲートを用いて,



のように構成できる. $|00\rangle$ や $|11\rangle$ に対して, A ゲートが作用しても状態は変化しない. 一方で, A ゲートは, $\mathcal{H}_{2,1}$ の量子状態を $\mathcal{H}_{2,1}$ の量子状態に写す. したがって, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{2,m}$ であれば, $A(\theta, \phi)|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{2,m}$ である. つまり, A ゲートは粒子数 m を保存する量子ゲートと言える.

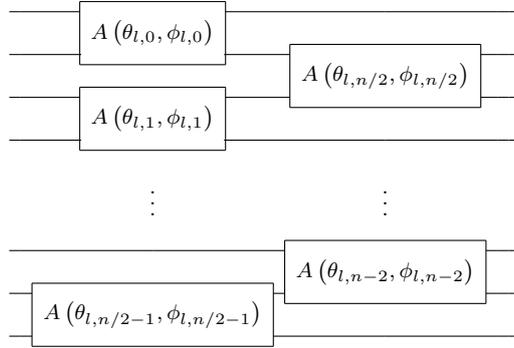
粒子数保存アンザッツは, A ゲートを複数用いることで実現できる. 形式的に, n 量子ビットに作用する L 層の粒子数保存アンザッツ $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta} = (\theta_{l,i})_{l,i}, \boldsymbol{\phi} = (\phi_{l,i})_{l,i})$ を

$$A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \prod_{l=0}^{L-1} \tilde{A}_n((\theta_{l,i})_{i=0}^{n-2}, (\phi_{l,i})_{i=0}^{n-2}) \quad (5.22)$$

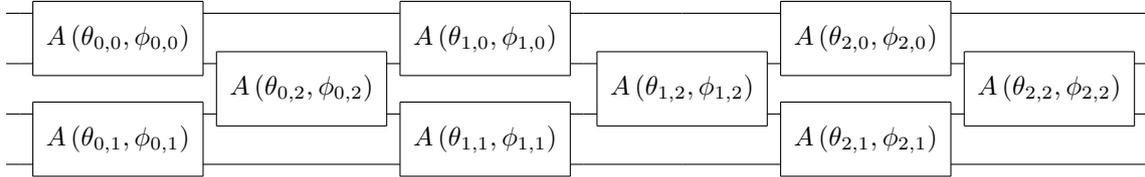
によって定義する. ここで, $\tilde{A}_n((\theta_{l,i})_{i=0}^{n-2}, (\phi_{l,i})_{i=0}^{n-2})$ は, 粒子数保存アンザッツ $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ の第 l 層に対応

*2 x に関する恒等式 $\sum_{j=0}^n {}_n C_j x^j = (x+1)^n = (x+1)^{\frac{n}{2}} (x+1)^{\frac{n}{2}} = \sum_{j_1=0}^{\frac{n}{2}} \sum_{j_2=0}^{\frac{n}{2}} {}_{\frac{n}{2}} C_{j_1} \cdot {}_{\frac{n}{2}} C_{j_2} x^{j_1+j_2}$ の $x^{\frac{n}{2}-q}$ の係数を見れば, ${}_n C_{\frac{n}{2}-q} = \sum_{k=0}^{\frac{n}{2}-q} {}_{\frac{n}{2}} C_{q+k} \cdot {}_{\frac{n}{2}} C_k$ を得る.

し, $n - 1$ 個の A ゲートを用いて



のように分解される. 例えば, 4 量子ビットに作用する 3 層の粒子数保存アンザッツ $A_{n=4,L=3}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ は



となる. 粒子数保存アンザッツ $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ は, 粒子数を保存する A ゲートのみから構成されているので, 粒子数保存アンザッツ $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ もまた粒子数を保存する. つまり, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{n,m}$ ならば, $A(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{n,m}$ である. したがって, 粒子数 m の状態に粒子数保存アンザッツを作用させることで, パラメータ付きの粒子数 m の状態を作り出すことができる.

そこで, 量子回路の初期状態 $|0\rangle^{\otimes n}$ に作用することで, 粒子数 m となる量子状態を作り出すゲートを考える. 量子ゲート $X_{n,m}$ を,

$$X_{n,m} = \bigotimes_{j=0}^{n-1} \sigma_{\tau_j} \quad (5.23)$$

とする. ここで, $\tau_j \in \{0, 1\}$ は, $\sum_{j=0}^{n-1} \tau_j = m$ を満たすとした. すると, $X_{n,m}|0\rangle^{\otimes n}$ は粒子数 m の量子状態となる. したがって, $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})X_{n,m}|0\rangle^{\otimes n}$ は, 粒子数 m のパラメータ付きの量子状態を表現できる.

さて, n サイト格子シュウイングーモデルの初期状態 $|\psi(0)\rangle$ が, $Q|\psi(0)\rangle = q|\psi(0)\rangle$ を満たすとする, 初期状態は固有値 q の固有空間の元, つまり $|\psi(0)\rangle \in \mathcal{H}_{n, \frac{n}{2}-q}$ である. 格子シュウイングーモデルは電荷 Q を保存するので, 時刻 $t > 0$ の状態 $|\psi(t)\rangle$ もまた固有値 q の固有ベクトルで, $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}_{n, \frac{n}{2}-q}$ を満たす. よって, $|\psi(t)\rangle$ を, ある $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ と $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ を用いて $A_{n,L}(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \hat{\boldsymbol{\phi}})X_{n, \frac{n}{2}-q}|0\rangle^{\otimes n}$ に近似することができる. つまり, $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})X_{n, \frac{n}{2}-q}$ を RQD に用いるアンザッツとすれば良い.

5.4.3 オプティマイザー: 逐次最小化アルゴリズム

本論文では, FISC のコスト関数の最小化には逐次最小化アルゴリズムを用いた. 逐次最小化アルゴリズムは, 収束が早く, 統計誤差に対して剛健な最適化アルゴリズムである [37]. また, 定理 4.1 で示したように, 逐次最小化アルゴリズムは雑音に対して剛健である.

本論文で用いた逐次最小化アルゴリズムの詳細について述べる. 初期状態 $|\psi(0)\rangle$ が電荷 q の固有状態である, n サイトの格子シュウィンガーモデルの時間発展を RQD によってシミュレーションすることを考える. ここで, 時刻 $sK\Delta T$ の状態 $|\psi(sK\Delta T)\rangle$ は, 既に用意できているとする. このとき, RQD によって, 時刻 $(s+1)K\Delta T$ の状態 $|\psi((s+1)K\Delta T)\rangle$ を作り出すには,

$$A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}_{s+1}, \boldsymbol{\phi}_{s+1}) X_{n, \frac{n}{2}-q} |0\rangle^{\otimes n} = (U_{\text{trot}}(\Delta T))^K |\psi((sK\Delta T))\rangle \quad (5.24)$$

を満たす $(\boldsymbol{\theta}_{s+1}, \boldsymbol{\phi}_{s+1})$ を求める必要がある. 見やすさのため, 以下 $\boldsymbol{\theta}_{s+1}, \boldsymbol{\phi}_{s+1}$ をそれぞれ $\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}$ と書きかえると, これは, FISC のコスト関数

$$C(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \text{Tr} \left[X_{n, \frac{n}{2}-q}^\dagger A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})^\dagger |\psi(sK\Delta T)\rangle \langle \psi(sK\Delta T)| A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) X_{n, \frac{n}{2}-q} O \right] \quad (5.25)$$

を最小化することで実現できる. ここで, O は O_{global} または O_{local} とした.

第 t イテレーションにおけるパラメータの値を $(\boldsymbol{\theta}^{(t)} = (\theta_{l,i}^{(t)})_{l,i}, \boldsymbol{\phi}^{(t)} = (\phi_{l,i}^{(t)})_{l,i})$ とする. このとき, コスト関数のパラメータ $(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ のある 1 つのパラメータ $\gamma_{l,i}$ ($\gamma \in \{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}\}$) に注目する. このとき, $\gamma_{l,i}$ 以外のパラメータの値を $\boldsymbol{\gamma}^{(t)}$ に固定したコスト関数を

$$C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_{l,i}) := \begin{cases} C(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})|_{\theta_{l',i'} = \theta_{l,i}^{(t)} \text{ (for } (l',i') \neq (l,i)), \phi_{l',i'} = \phi_{l',i'}^{(t)} \text{ (for all } (l',i'))} & (\gamma = \boldsymbol{\theta}) \\ C(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})|_{\phi_{l',i'} = \phi_{l,i}^{(t)} \text{ (for } (l',i') \neq (l,i)), \theta_{l',i'} = \theta_{l',i'}^{(t)} \text{ (for all } (l',i'))} & (\gamma = \boldsymbol{\phi}) \end{cases} \quad (5.26)$$

とする. このとき, $C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_{l,i})$ は, 5 つの実数 $a_1^{(t)}, a_2^{(t)}, \dots, a_5^{(t)}$ を用いて,

$$C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_{l,i}) = a_1^{(t)} \sin 2\gamma_{l,i} + a_2^{(t)} \cos 2\gamma_{l,i} + a_3^{(t)} \sin \gamma_{l,i} + a_4^{(t)} \cos \gamma_{l,i} + a_5^{(t)} \quad (5.27)$$

と表せる. 5 つの実数 $a_1^{(t)}, a_2^{(t)}, \dots, a_5^{(t)}$ は, $C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_{l,i})$ の独立な 5 点 $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_5$ の値 $C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_1), C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_2), \dots, C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_5)$ を推定することで求めることができる. 実際, 連立方程式

$$\begin{pmatrix} C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_1) \\ C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_2) \\ C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_3) \\ C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_4) \\ C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_5) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin 2\gamma_1 & \cos 2\gamma_1 & \sin \gamma_1 & \cos \gamma_1 & 1 \\ \sin 2\gamma_2 & \cos 2\gamma_2 & \sin \gamma_2 & \cos \gamma_2 & 1 \\ \sin 2\gamma_3 & \cos 2\gamma_3 & \sin \gamma_3 & \cos \gamma_3 & 1 \\ \sin 2\gamma_4 & \cos 2\gamma_4 & \sin \gamma_4 & \cos \gamma_4 & 1 \\ \sin 2\gamma_5 & \cos 2\gamma_5 & \sin \gamma_5 & \cos \gamma_5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1^{(t)} \\ a_2^{(t)} \\ a_3^{(t)} \\ a_4^{(t)} \\ a_5^{(t)} \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

を解けば良い. ここで, $C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_1), C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_2), \dots, C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_5)$ の推定には, 量子回路の測定回数が有限であることによる統計誤差や外界からの雑音の影響があることを注意しておく. こうして, $C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_{l,i})$ の関数形を定めることができた. $C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_{l,i})$ の定義域は有限区間 $[0, 2\pi)$ なので, 力任せ探索 (brute force)*³によってその正確な最小点を効率的に求めることができる. この力任せ探索による $C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_{l,i})$ の最小化の手続きを, 全てのパラメータに注目して何度も繰り返すことで, コスト関数 $C(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ の最小点を探索することができる. ここで述べた逐次最小化アルゴリズムの疑似コードを図 5.4 に示した.

*³ 力任せ探索とは, コスト関数の定義域をグリッド上に分割し, グリッドの各点におけるコスト関数の値を全て計算することで, コスト関数の最小点を求める手法のこと.

Algorithm 3 粒子数保存アンザッツを用いた RQD における逐次最小化アルゴリズム

Require: コスト関数 $C(\theta, \phi)$ は (5.25) で与えられたものとする.

```

1: パラメータの初期値  $(\theta^{(0)} = (\theta_{l,i}^{(0)})_{l,i}, \phi^{(0)} = (\phi_{l,i}^{(0)})_{l,i})$  を定める.
2: while  $t < t_{\max}$  do
3:   for  $(\gamma, l, i) \in \{\theta, \phi\} \times \{0, 1, \dots, L-1\} \times \{0, 1, \dots, n-2\}$  do
4:     for  $(\gamma', l', i') \in \{\theta, \phi\} \times \{0, 1, \dots, L-1\} \times \{0, 1, \dots, n-2\}$  do
5:       if  $(\gamma, l, i) = (\gamma', l', i')$  then
6:         独立な 5 点における  $C_{\gamma,l,i}^{(t)}(\gamma_{l,i})$  の値を推定し, (5.27) の  $a_1^{(t)}, a_2^{(t)}, \dots, a_5^{(t)}$  を求める.
7:          $\gamma_{l,i}^{(t+1)} \leftarrow \arg \min_{\gamma_{l,i}} a_1^{(t)} \sin 2\gamma_{l,i} + a_2^{(t)} \cos 2\gamma_{l,i} + a_3^{(t)} \sin \gamma_{l,i} + a_4^{(t)} \cos \gamma_{l,i} + a_5^{(t)}$ 
8:       else
9:          $\gamma_{l',i'}^{(t+1)} \leftarrow \gamma_{l',i'}^{(t)}$ 
10:      end if
11:    end for
12:   $t \leftarrow t + 1$ 
13: end for
14: end while

```

図 5.4: 粒子数保存アンザッツを用いた RQD における逐次最小化アルゴリズムの疑似コード.

5.5 時間発展シミュレーションの結果

5.5.1 シミュレータを用いた 4 サイト格子シュウィンガーモデルの時間発展シミュレーション

初期状態 $|\psi(0)\rangle$ が真空 (全てのサイト上に電子, 陽電子が存在しない状態) の 4 サイトの格子シュウィンガーモデルの時間発展シミュレーションを, トロッター分解と RQD の 2 通りの方法で行った. シュウィンガーモデルのモデルパラメータは, $a = 0.5, g = 2, m = 0.5$ とし, 1 トロッターステップの時間間隔 $\Delta T = \pi/30$ とした. RQD において, コスト関数は C_{global} あるいは C_{local} を用いて, $K = 1$ トロッターステップの時間発展演算子をアンザッツ $A_{4,2}(\theta, \phi)(X \otimes I)^{\otimes 2}$ (図 5.6a) に近似した. 量子計算部分において,

- (a) 1 量子回路あたりの測定回数 ∞ の雑音なし量子コンピュータシミュレータ
- (b) 1 量子回路あたりの測定回数 10^6 の雑音なし量子コンピュータシミュレータ
- (c) 1 量子回路あたりの測定回数 10^6 の雑音あり量子コンピュータシミュレータ

を用いて、比較を行った。(c) で用いた雑音のモデルについては、G.2 で述べた。

図 5.5 上段では、第 sK トロッターステップにおいて、時間発展演算子をどの程度近似できているかを示している。トロッター分解の場合、忠実度 $F(e^{-iH_{\text{spin}} sK \Delta T} |\psi(0)\rangle, (U_{\text{trot}}(\Delta T))^{sK} |\psi(0)\rangle)$ を示している。RQD の場合、量子計算部分に (a), (b), (c) を用いた際に得られた $(U_{\text{trot}}(\Delta T))^{sK}$ の近似 $A_{4,2}(\hat{\theta}_s, \hat{\phi}_s)(X \otimes I)^{\otimes 2}$ に対して、忠実度 $F(e^{-iH_{\text{spin}} sK \Delta T} |\psi(0)\rangle, A_{4,2}(\hat{\theta}_s, \hat{\phi}_s)(X \otimes I)^{\otimes 2} |0\rangle^{\otimes 4})$ を示している。図 5.5 下段では、各手法を用いた際に得られた系の数密度の時間発展を示している。

図 5.5 上段によれば、トロッター分解による時間発展演算子の近似の誤差は高々 0.003 となっている。また、雑音のない場合であれば、1 量子回路あたりの測定回数が有限回であったとしても、RQD による時間発展演算子の近似の誤差は高々 0.004 となっている。これは、雑音のない場合であれば、RQD の (S1) における回路の近似を精度良く行うことができていることを示している。一方、図 5.5c 上段によれば、雑音の影響のもとで、1 量子回路あたりの測定回数が有限回であると、RQD による時間発展演算子の近似の誤差は 0.01 程度まで大きくなる。これは、雑音と統計誤差の影響で、回路の近似の精度が悪くなることを示している。さらに、回路の近似を繰り返すごとに、その近似の精度が悪くなっていくこともわかる。

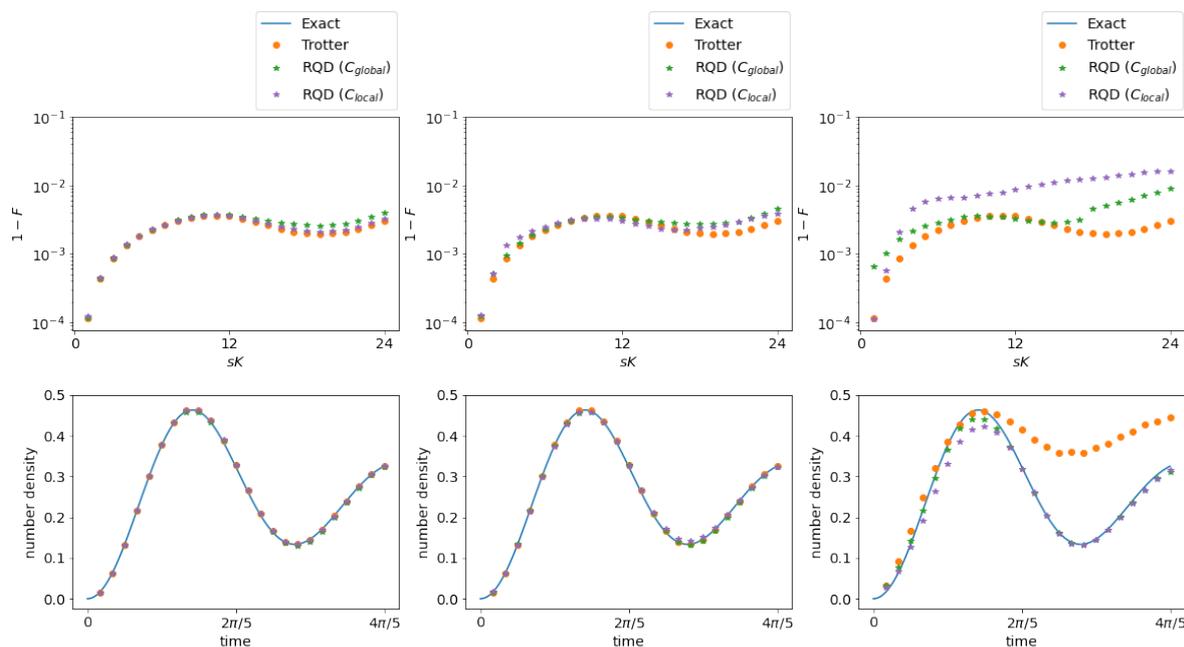
図 5.5 下段によれば、雑音の影響がなければ、トロッター分解、RQD ともに理論値に沿った時間発展を示している。しかしながら、雑音の影響の下で、トロッター分解を用いた時間発展は、時刻 $> \pi/5$ の領域で理論値から大幅にずれていく。これは、用いる量子ゲートの数がシミュレーション時間に比例する分、雑音の影響を大きく受けるからである。一方で、RQD の場合、時刻 $> \pi/5$ の領域であっても、定性的には理論値に沿った結果を得られている。

5.5.2 実機を用いた 2 サイト格子シュウィンガーモデルの時間発展シミュレーション

初期状態 $|\psi(0)\rangle$ が真空 (全てのサイト上に電子、陽電子が存在しない状態) の 2 サイトの格子シュウィンガーモデルの時間発展シミュレーションを、トロッター分解と RQD の 2 通りの方法で行った。シュウィンガーモデルのモデルパラメータは、 $a = 0.5$, $g = 2$, $m = 0.5$ とした。1 トロッターステップの時間間隔 $\Delta T = 3\pi/255$ とした。RQD において、コスト関数は C_{global} を用いて、 $K = 3$ トロッターステップをアンザッツ $A_{2,1}(\theta, \phi)(X \otimes I)$ (図 5.6b) に近似した。さらに、量子計算部分において、IBM Quantum Falcon Processor の 1 つである `ibm_lagos` という量子コンピュータを用いた [4]。ここで、1 つの量子回路あたりの測定回数は 819200 とした。

図 5.7a に、時刻 0.6π の時間発展をシミュレーションするのに用いた量子回路の深さとゲート数を示した。実際に用いた量子回路の図は G.3 に示した。トロッター分解による手法で用いた 715 個の 1 量子ビットゲート、102 個の 2 量子ビットゲートからなる量子回路を、RQD によって 11 個の 1 量子ビットゲート、3 個の 2 量子ビットゲートからなる量子回路に圧縮した。

図 5.7b に、格子シュウィンガーモデルの数密度の期待値の時間発展シミュレーションの結果を示した。トロッター分解に依る方法では、シミュレーション時間が長くなるにつれて数密度が 0.5 に漸近していく。これ



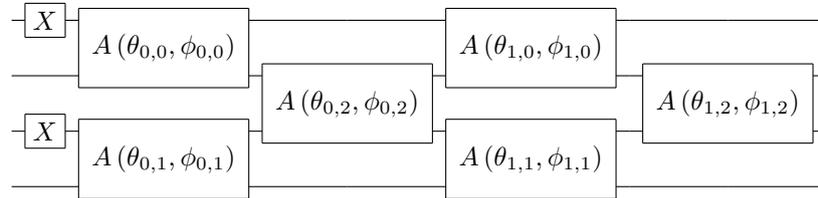
(a) 1 量子回路あたりの測定回数 ∞ の雑音なし量子コンピュータシミュレータを用いた場合 (b) 1 量子回路あたりの測定回数 10^6 の雑音なし量子コンピュータシミュレータを用いた場合 (c) 1 量子回路あたりの測定回数 10^6 の雑音あり量子コンピュータシミュレータを用いた場合

図 5.5: 量子シミュレータを用いた 4 サイト格子シュウィンガーモデルの時間発展. トロッター分解による手法と RQD による手法を比較した. 上段は, 時間発展演算子の近似誤差を表している. オレンジ色の点は, $(U_{\text{trot}}(\Delta T))^{sK} |\psi(0)\rangle$ と $e^{-iH_{\text{spin}} sK \Delta T} |\psi(0)\rangle$ の忠実度を表している. 上段の緑色, 紫色の点は, RQD によって求めた $(U_{\text{trot}}(\Delta T))^{sK} |\psi(0)\rangle$ の近似 $A_{4,2}(\hat{\theta}, \hat{\phi})(X \otimes I)^{\otimes 2} |0\rangle^{\otimes 4}$ と $e^{-iH_{\text{spin}} sK \Delta T} |\psi(0)\rangle$ の忠実度を表している. 下段は, 数密度の時間発展を示している. 青い線はハミルトニアン H_{spin} の厳密対角化により求まる理論値を示している. オレンジ色の点はトロッター分解を用いた場合, 緑色, 紫色の点は RQD を用いた場合に対応している.

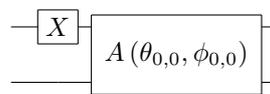
は, シミュレーション時間に比例して量子ゲートの数が多くなることにより, 雑音の影響が大きくなっていき, 量子ビットの状態がやがて完全混合状態 $I^{\otimes 2}/4$ に漸近していくためであると考えられる. 実際, 完全混合状態の下測定した数密度の期待値は 0.5 である. 一方で, RQD に依る方法では, シミュレーション時間が長くなっても, 定性的には理論値に沿った結果を得られている. これは, NISQ デバイスを用いた時間発展シミュレーションを実現する方法として, RQD が有用であることを示唆する結果となっている.

5.6 Restarted Quantum Dynamics のスケーラビリティ

5.5 において, 実際の NISQ デバイス上でサイズの小さな系の長時間発展シミュレーションを行ったところ, RQD がトロッター分解に比べて有用であることを確かめた. しかしながら, 古典コンピュータ上で時間発展シミュレーションできないほどにサイズの大きな系に対して, RQD が現実的な時間で実行できることを実証



(a) 4 サイト格子シュウィンガーモデルの RQD による時間発展シミュレーションで用いたアンザッツ.

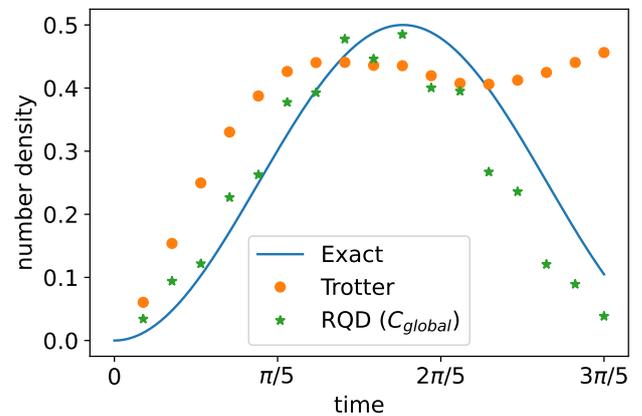


(b) 2 サイト格子シュウィンガーモデルの RQD による時間発展シミュレーションで用いたアンザッツ.

図 5.6

手法	深さ	ゲート数			
		\sqrt{X}	X	R_Z	CNOT
Trotter 分解	563	306	0	409	102
RQD	15	4	1	6	3

(a) 時刻 0.6π のシミュレーションに用いた量子回路の深さとゲート数.



(b) 数密度の時間発展. 青い線はハミルトニアン H_{spin} の厳密対角化により求まる理論値を示している. オレンジ色の点は Trotter 分解を用いた場合, 緑色の点は RQD を用いた場合に対応している.

図 5.7: `ibm.lagos` を用いた 2 サイト格子シュウィンガーモデルの時間発展. Trotter 分解に依る手法と RQD に依る手法を比較した.

したわけではない。そこで、ここでは、粒子数保存アンザッツを用いた格子シュウィンガーモデルの RQD に注目して、系のサイズに関するスケーラビリティについて議論する。簡単のため、NISQ デバイスによる雑音の影響はないとする。

RQD を含め、変分量子アルゴリズムのボトルネックのひとつは、コスト関数の最適化に要する時間計算量である [12]。4.3 で述べたように、コスト関数がバレンプラトーとなるような変分量子アルゴリズムはスケーラブルではない。そこで、本研究で用いたコスト関数の性質について考える。本研究では、電荷 q の初期状態を、量子コンピュータ上の粒子数 $m = \frac{n}{2} - q$ の状態にマッピングした。その後、時間発展演算子に対応するゲートを近似する際に、(5.25) で定義された FISC のコスト関数

$$C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \text{Tr} \left[X_{n,m}^\dagger A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})^\dagger |\psi(sK\Delta T)\rangle \langle \psi(sK\Delta T)| A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) X_{n,m} O_{\text{global}} \right] \quad (5.29)$$

$$C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \text{Tr} \left[X_{n,m}^\dagger A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})^\dagger |\psi(sK\Delta T)\rangle \langle \psi(sK\Delta T)| A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) X_{n,m} O_{\text{local}} \right] \quad (5.30)$$

を最適化した。こうして、時刻 $(s+1)K\Delta T$ における系の状態 $|\psi((s+1)K\Delta T)\rangle$ を、電荷 q の固有状態からなる集合

$$\{A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) X_{n,m} |0\rangle^{\otimes n}\}_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} \subset \mathcal{H}_{n,m} \quad (5.31)$$

の中から探索した。

後に示す系 6.7 より、これらのコスト関数のアンザッツのパラメータ $\gamma \in \{\boldsymbol{\theta} := \theta_{l,i}, \boldsymbol{\phi} := \phi_{l,i}\}$ に関する勾配について、アンザッツがユニタリ 2 - デザインとなるほどに深いという仮定の下、

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} \left[\frac{\partial C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})}{\partial \gamma} \right] = 0, \quad \mathbb{V}_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} \left[\frac{\partial C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})}{\partial \gamma} \right] = \begin{cases} 0 & (m = 0, n) \\ \frac{4b_\gamma d_{n-2,m-1}}{d_{n,m}(d_{n,m}+1)^2} & (m = 1, 2, \dots, n-1) \end{cases} \quad (5.32)$$

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} \left[\frac{\partial C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})}{\partial \gamma} \right] = 0, \quad \mathbb{V}_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} \left[\frac{\partial C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})}{\partial \gamma} \right] = \begin{cases} 0 & (m = 0, n) \\ \frac{16b_\gamma d_{n-2,m-1}^2 m(n-m)}{(d_{n,m}+1)(d_{n,m}^2-1)n^3} & (m = 1, 2, \dots, n-1) \end{cases} \quad (5.33)$$

が成り立つ。ここで、 $b_\theta = 1, b_\phi = 0$ とした。(5.32), (5.33) から、コスト関数の勾配の性質は粒子数 $m = \frac{n}{2} - q$, つまり初期状態の電荷 q に依存することがわかる。例えば、電荷 $q = \frac{n}{2} - 2$ の初期状態の時間発展に興味があるとすると、コスト関数の勾配の分散は $\mathbb{V}[\partial_\gamma C_{\text{global}}] = O(n^{-5}), \mathbb{V}[\partial_\gamma C_{\text{local}}] = O(n^{-6})$ にスケールするので、バレンプラトーは起きない。一方、電荷 $q = 0$ の初期状態の時間発展に興味があるとすると、このとき、コスト関数の勾配の分散は $\mathbb{V}[\partial_\gamma C_{\text{global}}] = O(n4^{-n}), \mathbb{V}[\partial_\gamma C_{\text{local}}] = O(n^{-1/2}2^{-n})$ にスケールするので、バレンプラトーが起きる。したがって、本論文で用いた RQD の系のサイズに関するスケーラビリティは、初期状態の電荷 q に依ることがわかる。

このことは、電荷 Q の固有値 q の固有空間の次元 $d_{n,m}$ と合わせて理解することもできる。(5.32), (5.33) より、コスト関数の勾配の分散は、おおよそ $1/\text{poly}(d_{n,m})$ でスケールする。図 5.8 に、 $d_{100,m}$ とコスト関数の勾配の分散との関係を示した。すると、 $d_{n,m}$ が大きくになるにつれて、コスト関数の勾配の分散は小さくなるこ

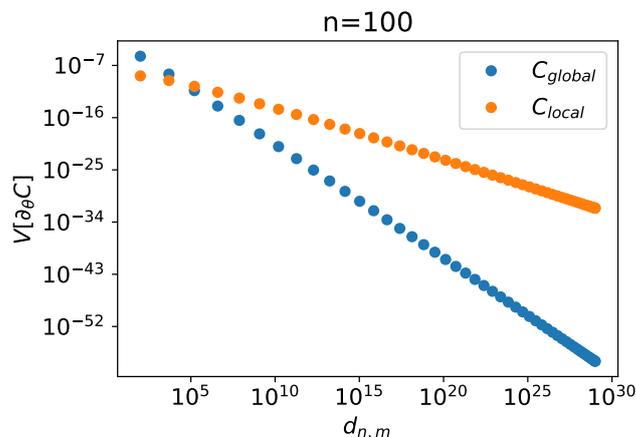


図 5.8: $n = 100$ のとき, (5.32), (5.33) で述べたコスト関数の勾配の分散と $d_{n,m}$ の関係. $d_{n,m}$ が大きくなるにつれて, コスト関数の勾配の分散は小さくなる.

とがわかる. したがって, ユニタリ 2 - デザインとなる粒子数保存アンザッツが作り出す試行状態全体の空間 $\{A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})X_{n,m}|0\rangle^{\otimes n}\}_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}}$ を含む空間 $\mathcal{H}_{n,m}$ の次元 $d_{n,m}$ が大きい程, コスト関数の勾配の分散は小さくなるので, コスト関数の平坦な領域が大きくなり, その最適化が難しくなることが予想される.

ここまで, 粒子数保存アンザッツがユニタリ 2 - デザインとなるほど十分な表現能力を持つ仮定の下で議論してきた. より一般には, 後に示す系 6.8 にチェビシェフの不等式を用いることで, アンザッツが豊かな表現能力を持つほど, コスト関数の平坦な領域が大きくなり, その最適化が難しくなることが予想される.

5.7 議論

本章では, 実際の量子コンピュータ上において, NISQ デバイスの制約を超えた長時間発展シミュレーションを実現した. そのために, RQD という変分量子アルゴリズムを用いた. 物理系としては, 格子シュウィンガーモデルを用いた. NISQ デバイスの雑音の下でも RQD が機能するように主に以下の 2 点を工夫した. 第 1 に, 格子シュウィンガーモデルの電荷 Q の保存を保つように, 時間発展演算子を粒子数保存アンザッツに近似をした. 第 2 に, FISC のコスト関数の最小化のためのオプティマイザーには, 雑音と統計誤差に対して剛健な逐次最小化アルゴリズムを用いた. こうして, サイズの小さな系に対して, RQD が Trotter 分解による長時間発展シミュレーションに比べて有用であることを実機を用いて実証した.

RQD による時間発展シミュレーションを NISQ デバイス上でさらに精度良く行うためには, 更なる改善が必要である. 第 1 に, Trotter 分解の精度の改善である. 本論文では, (5.1) のように 1 次のオーダーでの Trotter 分解を考えたが, より高次の Trotter 分解 [7, 78] を考えることもできる. 第 2 に, 時間発展演算子を近似するアンザッツに関する改善である. 本論文では, 電荷の保存則を実現するアンザッツを用いたが, 系の対称性に関する情報をさらに盛り込んだアンザッツを用いることが望まれる. こうして, NISQ デバイスの雑

音の影響を抑えるだけでなく、後述するようにバレンプラトーの影響を緩和することができる。第3に、コスト関数の最適化の改善である。本論文では、統計誤差や単純な雑音なモデルに対して剛健な逐次最小化アルゴリズムを用いた。それでもなお、雑音と統計誤差によって、時間発展演算子の近似の誤差が大きくなることを観測した。したがって、より優れた最適化が必要である。第4に、ハードウェアレベルでの量子ゲートの精度の改善である。例えば、マイクロ波パルス制御 [79] によって、より高精度な量子ゲートの実装が期待される。

本章では、さらに、後の 6.4 で示す結果を用いて、NISQ デバイスの雑音がないという仮定のもと、本論文で用いた RQD の系のサイズに関するスケーラビリティについて解析した。時間発展演算子の近似に用いる FISC のコスト関数 C_{global} , C_{local} がバレンプラトーであるか否かは系の初期状態の電荷 q に依存し、電荷 q の固有空間の次元が大きくなるほどにその最適化が難しくなることを導いた。ただし、この主張は、粒子数保存アンザッツがユニタリ 2 - デザインとなる程に深いという仮定のもとで導き出された。より一般には、粒子数保存アンザッツの表現能力が豊かであるほど、コスト関数の最適化が難しくなることが導かれた。

RQD の系のサイズに関するスケーラビリティを改善する方法は、アンザッツの表現能力を抑えることである。例えば、粒子数保存アンザッツの層数を小さくすることでアンザッツの表現能力を抑えることはできる [39]。しかしながら、このように単にアンザッツの表現能力を抑えるだけでは、目的の状態を完全に表現できるとは限らない。一方、電荷 Q の保存則だけでなく、更なる系の対称性を考慮したアンザッツを設計することで、物理系の状態を表現するだけの表現能力を保ちつつアンザッツの表現能力を抑えることができよう。こうして、バレンプラトーの影響を緩和することができる。

第6章

変分量子アルゴリズムのコスト関数の勾配の性質

6.1 はじめに

4.3 で述べたように、変分量子アルゴリズムには、バレンプラトーと呼ばれる問題が起こりうるのであった。バレンプラトーは、次のように定義された。

定義 4.2 Γ -値確率変数 γ は一様分布に従うとする。 n 量子ビットの変分量子アルゴリズムのコスト関数を $C: \Gamma \ni \gamma \mapsto C(\gamma) \in \mathbb{R}$ とし、コスト関数 C は C^1 級とする。このとき、 $C(\gamma)$ がパラメータ γ_j に関してバレンプラトーであるとは、パラメータ γ_j に関するコスト関数の1階微分の $\partial_{\gamma_j} C(\gamma)$ の期待値が0で、分散がある $b > 1$ を用いて $O(b^{-n})$ でスケールすること。つまり、

$$\mathbb{E}_{\gamma} \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right] = 0, \quad \mathbb{V}_{\gamma} \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma_j} \right] = O(b^{-n}) \quad (6.1)$$

となることをいう。

したがって、変分量子アルゴリズムのコスト関数がバレンプラトーであるか否かを議論するには、コスト関数の勾配の期待値や2次モーメントを評価すれば良い。

本章では、コスト関数が、

$$C(\gamma) = \text{Tr} [OU(\gamma)\rho U(\gamma)^\dagger] \quad (6.2)$$

と表せる変分量子アルゴリズムについて考える。ここで、 ρ は密度演算子、 O はエルミート演算子、 $U(\gamma)$ はアンザッツとした。一般に、コスト関数の性質は ρ , O , アンザッツ $U(\gamma)$ の構造に依存するが、ここでは特にアンザッツの構造に注目して考える。例えば、Random parametrized quantum circuit (RPQC) や Hamiltonian Variational Ansatz (HVA) と呼ばれる構造を持つアンザッツを用いた変分量子アルゴリズムのコスト関数の勾配の性質については、すでに知られている [25, 38, 39]。そこで、本論文では、アンザッツの構造に依存しな

いコスト関数の勾配の普遍的な性質を導いた。さらに、新たに導かれた普遍的な性質をもとに、粒子数保存アンザッツを用いたコスト関数の性質を導いた。

本章の構成は以下の通りである。6.2では、変分量子アルゴリズムのコスト関数の勾配の満たす普遍的な性質を述べる。6.3では、6.2で導いた普遍的な性質が、従来の研究で知られていた RPQC を用いたコスト関数に関する性質を再現することを確認する。6.4では、6.2で導いた普遍的な性質をもとに導かれた、粒子数保存アンザッツを用いたコスト関数の解析的な性質を述べる。6.5では、粒子数保存アンザッツを用いた変分量子アルゴリズムに関する種々の数値計算の結果を示し、6.4で述べた解析的な結果と絡めて数値計算の結果を議論する。6.6では、本章で得られた結果について議論する。

6.2 主結果

6.2.1 問題設定

\mathcal{H} を d 次元複素内積空間とし、 $\Gamma \subset \mathbb{R}^{N_p}$ とする。ここでは、コスト関数 $C: \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ として、

$$C(\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{N_p})) = \text{Tr} \left[OU(\gamma) \rho U(\gamma)^\dagger \right] \quad (6.3)$$

を考える。ここで、 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ は密度演算子、 $O \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ はエルミートとし、 $U: \Gamma \rightarrow \mathcal{U}(d)$ はアンザッツとした。このとき、 $\gamma := \gamma_i$ に関する勾配 $\partial_\gamma C(\gamma)$ について考えていく。そのために、アンザッツ $U(\gamma)$ を $U(\gamma) = U_L(\gamma_L) U_M(\gamma_M) U_R(\gamma_R)$ のように、3つのユニタリ $U_R(\gamma_R)$, $U_M(\gamma_M)$, $U_L(\gamma_L)$ に分解することを考える。ここで、 $\gamma_R, \gamma_M, \gamma_L$ は同じ添字のパラメータを持たないように分解を行った。また、 γ_M は γ に依存するが、 $U_R(\gamma_R)$ と $U_L(\gamma_L)$ は γ に依存しないように分解を行った。このとき、コスト関数 $C(\gamma)$ は、

$$C(\gamma) = \text{Tr} \left[U_L(\gamma_L)^\dagger O U_L(\gamma_L) U_M(\gamma_M) U_R(\gamma_R) \rho U_R(\gamma_R)^\dagger U_M(\gamma_M)^\dagger \right] \quad (6.4)$$

と表せるから、 γ に関する勾配は、

$$\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} = \text{Tr} \left[U_L(\gamma_L)^\dagger O U_L(\gamma_L) U_{M,\gamma}(\gamma_M) U_R(\gamma_R) \rho U_R(\gamma_R)^\dagger U_M(\gamma_M)^\dagger \right] \quad (6.5)$$

$$+ \text{Tr} \left[U_L(\gamma_L)^\dagger O U_L(\gamma_L) U_M(\gamma_M) U_R(\gamma_R) \rho U_R(\gamma_R)^\dagger U_{M,\gamma}(\gamma_M)^\dagger \right] \quad (6.6)$$

と表せる。ここで、

$$U_{M,\gamma}(\gamma_M) := \frac{\partial U_M(\gamma_M)}{\partial \gamma} \quad (6.7)$$

とした。以後、見やすさのため、 $U_M(\gamma_M)$, $U_M(\gamma_M)^\dagger$ などを U_M , U_M^\dagger と表す。

バレンプラトールに関する議論をするには、コスト関数の勾配 $\partial_\gamma C(\gamma = (\gamma_R, \gamma_M, \gamma_L))$ の期待値や2次モーメントを評価する必要がある。そこで、 $\gamma_R, \gamma_M, \gamma_L$ を、それぞれ分布 ν_R, ν_M, ν_L に従う確率変数として、コスト関数の勾配の期待値や2次モーメントを評価していけばよい。

複素内積空間 \mathcal{H} は、必ずしも n 量子ビット $(\mathbb{C}^2)^{\otimes n}$ である必要はなく、その部分空間でも良い。なぜなら、アンザツの作用が影響する空間は必ずしも n 量子ビット全体とは限らないからである。実際、6.4 で述べる粒子数保存アンザツは、 n 量子ビットの部分空間にだけ影響を及ぼす。

6.2.2 結果

確率変数 $U_R(\gamma_R)$, $U_L(\gamma_L)$ がユニタリ 2 - デザインとなる程に十分な表現能力を持つとき、コスト関数の勾配 $\partial_\gamma C(\gamma)$ の期待値と分散は、次の定理 6.1 のように計算できる。証明は付録 H.2 に述べた。

定理 6.1 (6.4) で定義されたコスト関数 $C(\gamma)$ を考える。このとき、確率変数 $U_R(\gamma_R)$, $U_L(\gamma_L)$ がユニタリ 2 - デザインであるならば、コスト関数の勾配の期待値は、

$$\mathbb{E}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = 0 \quad (6.8)$$

となり、分散は、

$$\mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \frac{2d\Delta_d^{(2)}(\rho)\Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \int \nu_M(d\gamma_M) \left(\text{Tr} [U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger] - \frac{|\text{Tr} [U_{M,\gamma} U_M^\dagger]|^2}{d} \right) \quad (6.9)$$

となる。ここで、 $X \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して、

$$\Delta_d^{(2)}(X) := \text{Tr} [X^2] - \frac{\text{Tr} [X]^2}{d} \quad (6.10)$$

とした。

次に、確率変数 $U_R(\gamma_R)$, $U_L(\gamma_L)$ がユニタリ 2 - デザインであるという仮定を外し、より一般にコスト関数の勾配に関する性質を考える。そこで、 $U_R(\gamma_R)$, $U_L(\gamma_L)$ の分布とハール分布との差を表現するような線型演算子 $\mathcal{A}_{U_R(\gamma_R), \nu_R}^{(t)} : \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes t}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes t})$, $\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(t)} : \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes t}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes t})$ を

$$\mathcal{A}_{U_R(\gamma_R), \nu_R}^{(t)}(\cdot) := \int_{U(d)} \mu_H(dV) V^{\otimes t}(\cdot)(V^\dagger)^{\otimes t} - \int \nu_R(d\gamma_R) (U_R(\gamma_R))^{\otimes t}(\cdot)(U_R(\gamma_R)^\dagger)^{\otimes t} \quad (6.11)$$

$$\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(t)}(\cdot) := \int_{U(d)} \mu_H(dV) (V^\dagger)^{\otimes t}(\cdot)V^{\otimes t} - \int \nu_L(d\gamma_L) (U_L(\gamma_L)^\dagger)^{\otimes t}(\cdot)(U_L(\gamma_L))^{\otimes t} \quad (6.12)$$

と定義する。すると、コスト関数の勾配 $\partial_\gamma C(\gamma)$ の期待値と 2 次モーメントは、次の命題 6.2 のように計算できる。証明は付録 H.3 に述べた。

命題 6.2 (6.4) で定義されたコスト関数 $C(\gamma)$ を考える。このとき、コスト関数の勾配の期待値は、

$$\mathbb{E}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \int \nu_M(d\gamma_M) \frac{\partial}{\partial \gamma} \text{Tr} \left[\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(1)}(O) U_M \mathcal{A}_{U_R(\gamma_R), \nu_R}^{(1)}(\rho) U_M^\dagger \right] \quad (6.13)$$

であり、勾配の2次モーメントは、

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] - v_\gamma(\rho, O) &= -\frac{2\Delta_d^{(2)}(\rho)}{d^2-1} \int \nu_M(d\gamma_M) \operatorname{Tr} \left[\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(2)}(O^{\otimes 2}) G J_1 \right] \\ &\quad - \frac{2\Delta_d^{(2)}(O)}{d^2-1} \int \nu_M(d\gamma_M) \operatorname{Tr} \left[\mathcal{A}_{U_R(\gamma_R), \nu_R}^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) G J_2 \right] \\ &\quad + \int \nu_M(d\gamma_M) \operatorname{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_{U_R(\gamma_R), \nu_R}^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right] \end{aligned} \quad (6.14)$$

である。ここで、

$$v_\gamma(\rho, O) := \frac{2d\Delta_d^{(2)}(\rho)\Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \int \nu_M(d\gamma_M) \left(\operatorname{Tr} [U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger] - \frac{|\operatorname{Tr} [U_{M,\gamma} U_M^\dagger]|^2}{d} \right) \quad (6.15)$$

とし、線型演算子 $\mathcal{J}_1: \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes 2}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes 2})$, $J_1: \mathcal{H}^{\otimes 2} \rightarrow \mathcal{H}^{\otimes 2}$, $J_2: \mathcal{H}^{\otimes 2} \rightarrow \mathcal{H}^{\otimes 2}$ を、

$$\mathcal{J}_1(\cdot) := (U_M^\dagger)^{\otimes 2}(\cdot)U_{M,\gamma}^{\otimes 2} + (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2}(\cdot)U_M^{\otimes 2} + 2(U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger)(\cdot)(U_{M,\gamma} \otimes U_M) \quad (6.16)$$

$$J_1 := (U_M \otimes U_{M,\gamma})(U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) - (U_{M,\gamma} \otimes U_M)(U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \quad (6.17)$$

$$J_2 := (U_{M,\gamma}^\dagger \otimes U_M^\dagger)(U_{M,\gamma} \otimes U_M) - (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger)(U_{M,\gamma} \otimes U_M) \quad (6.18)$$

とした。また、 \mathcal{H} の正規直交基底 $\{|i\rangle\}_{i=1}^d$ に対して、 $G \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes 2})$ を、

$$G|i\rangle \otimes |j\rangle = |j\rangle \otimes |i\rangle \quad (6.19)$$

で定義した。

命題 6.2 において、確率変数 $U_R(\gamma_R)$, $U_L(\gamma_L)$ がユニタリ 2 - デザインであるとする、 $\mathcal{A}_{U_R(\gamma_R), \nu_R}^{(1)}$, $\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(1)}$, $\mathcal{A}_{U_R(\gamma_R), \nu_R}^{(2)}$, $\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(2)}$ が零写像になるから、

$$\mathbb{E}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = 0, \quad \mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] = v_\gamma(\rho, O) \quad (6.20)$$

を得る。これは、確率変数 $U_R(\gamma_R)$, $U_L(\gamma_L)$ がユニタリ 2 - デザインであるとした場合に導かれた定理 6.1 の結果と一致している。

命題 6.2 を用いて、コスト関数の勾配の2次モーメントをアンザッツの表現力によって評価することができる。4.1.2 で述べたように、アンザッツ $U_R(\gamma_R)$, $U_L(\gamma_L)$ の表現力は、 $\epsilon_R^{(t)} := \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma_R), \nu_R}^{(t)}(\rho^{\otimes t}) \right\|_2$, $\epsilon_L^{(t)} := \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(t)}(O^{\otimes t}) \right\|_2$ や $\epsilon_R^{\diamond(t)} := \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma_R), \nu_R}^{(t)} \right\|_\diamond$, $\epsilon_L^{\diamond(t)} := \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(t)} \right\|_\diamond$ と定義された。このとき、次の定理 6.3 が成立する。証明は付録 H.4 に述べた。

定理 6.3 (6.4) で定義されたコスト関数 $C(\gamma)$ を考える。このとき、コスト関数の勾配の2次モーメントを、アンザッツの表現力を用いて、

$$\left| \mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] - v_\gamma(\rho, O) \right| \leq 2\epsilon_R^{(2)}\epsilon_L^{(2)} \int \nu_M(d\gamma_M) \left(\|U_{M,\gamma}\|_2^2 + \sqrt{d} \|U_{M,\gamma}^\dagger U_{M,\gamma}\|_2 \right)$$

$$+ \frac{2\epsilon_L^{(2)} \Delta_d^{(2)}(\rho)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \|J_1\|_2 + \frac{2\epsilon_R^{(2)} \Delta_d^{(2)}(O)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \|J_2\|_2 \quad (6.21)$$

$$\left| \mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] - v_\gamma(\rho, O) \right| \leq 4\epsilon_R^{(2)} \epsilon_L^{(2)} \|O\|_1^2 \int \nu_M(d\gamma_M) \|U_{M,\gamma}\|_\infty^2 \\ + \frac{2\epsilon_L^{(2)} \Delta_d^{(2)}(\rho) \|O\|_1^2}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \|J_1\|_\infty + \frac{2\epsilon_R^{(2)} \Delta_d^{(2)}(O)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \|J_2\|_\infty \quad (6.22)$$

と評価できる.

ν を確率変数 γ の一様分布とする. すると, (6.21) に, チェビシエフの不等式を用いることで, 任意の $\delta > 0$ に対して,

$$\nu \left(\left| \frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right| \geq \delta \right) \leq \frac{1}{\delta^2} \left(v_\gamma(\rho, O) + a_1 \epsilon_R^{(2)} \epsilon_L^{(2)} + a_2 \epsilon_L^{(2)} + a_3 \epsilon_R^{(2)} \right) \quad (6.23)$$

を得る. ここで,

$$a_1 := 2 \int \nu_M(d\gamma_M) \left(\|U_{M,\gamma}\|_2^2 + \sqrt{d} \|U_{M,\gamma}^\dagger U_{M,\gamma}\|_2 \right) \geq 0 \quad (6.24)$$

$$a_2 := \frac{2\Delta_d^{(2)}(\rho)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \|J_1\|_2 \geq 0 \quad (6.25)$$

$$a_3 := \frac{2\Delta_d^{(2)}(O)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \|J_2\|_2 \geq 0 \quad (6.26)$$

とした. (6.23) は, アンザッツの表現力 $\epsilon_R^{(2)}, \epsilon_L^{(2)}$ が小さくなると, コスト関数の勾配の大きさが δ 以上の領域の面積が小さくなることを示している. 言い換えれば, コスト関数の勾配の大きさが δ 未満の平坦な領域の面積が大きくなりうることを示している. したがって, アンザッツの表現能力の豊かさが, 変分量子アルゴリズムのコスト関数の最適化を難しくする要因だと言える. これは, (6.21) にチェビシエフの不等式を作用させて得られた帰結であるが, (6.22) にチェビシエフの不等式を作用させても同様の主張を得る.

6.3 Random parametrized quantum circuit を用いたコスト関数の性質

定理 6.1, 命題 6.2, 定理 6.3 で得られたコスト関数の勾配に関する解析的な性質は, あらゆるアンザッツに対して成立する. そこで, RPQC という特定のクラスのアンザッツに対して先の定理を適用し, 変分量子アルゴリズムのコスト関数に関する解析的な性質を導く. そして, すでによく知られている RPQC を用いたコスト関数の性質 [25, 39] を再現することを確かめる.

6.3.1 問題設定

(4.2) で定義した, n 量子ビットに作用するアンザッツとして $U_{\text{RPQC}}: [0, 2\pi)^{N_p} \rightarrow \mathcal{U}(2^n)$

$$U_{\text{RPQC}}(\gamma) = \prod_{j=1}^{N_p} U_j(\gamma_j) W_j \quad (6.27)$$

を考える. ここで, W_j はパラメータを持たない量子ゲートとし, $U_j(\gamma_j)$ は $V_j^2 = I$ を満たすエルミート V_j を用いて, $U_j(\gamma_j) := \exp[-i\gamma_j V_j]$ とした. このとき, コスト関数

$$C_{\text{RPQC}}(\gamma) = \text{Tr}[O U_{\text{RPQC}}(\gamma) \rho U_{\text{RPQC}}(\gamma)^\dagger] \quad (6.28)$$

のパラメータ $\gamma := \gamma_j$ に関する勾配の解析的な性質を考える. そこで, 確率変数 $\gamma_R := (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{j-1})$ は $[0, 2\pi)^{j-1}$ 上の一様分布 ν_R , 確率変数 γ_j は $[0, 2\pi)$ 上の一様分布, 確率変数 $\gamma_L := (\gamma_{j+1}, \gamma_{j+2}, \dots, \gamma_{N_p})$ は $[0, 2\pi)^{N_p-j}$ 上の一様分布 ν_L に従うとする. すると, $U_R(\gamma_R) := W_j \prod_{j'=1}^{j-1} U_{j'}(\gamma_{j'}) W_{j'}$, $U_L(\gamma_L) := \prod_{j'=j+1}^{N_p} U_{j'}(\gamma_{j'}) W_{j'}$ は, $\mathcal{U}(2^n)$ -値確率変数である.

6.3.2 結果

アンザッツ $U_R(\gamma_R)$, $U_L(\gamma_L)$ がユニタリ 2 - デザインである程に十分な表現能力を持つとすると, 定理 6.1 から, コスト関数の勾配の性質について系 6.4 が導かれる. 証明は付録 H.5 に述べた. 系 6.4 は, [25, 39] の結果を再現している.

系 6.4 (6.28) で定義されたコスト関数 $C_{\text{RPQC}}(\gamma)$ を考える. $U_R(\gamma_R)$, $U_L(\gamma_L)$ がユニタリ 2 - デザインであるならば,

$$\mathbb{E}_\gamma \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = 0, \quad \mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \frac{2^{n+1} \Delta_{2^n}^{(2)}(\rho) \Delta_{2^n}^{(2)}(O) \Delta_{2^n}^{(2)}(V_j)}{(4^n - 1)^2} \quad (6.29)$$

が成立する.

命題 6.2, 定理 6.3 を用いることで, 系 6.5 で述べるように, コスト関数の勾配の性質をアンザッツの表現力 $\epsilon_R^{(2)} := \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma_R), \nu_R}^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_2$, $\epsilon_L^{(2)} := \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2$ や $\epsilon_R^{\diamond(2)} := \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma_R), \nu_R}^{(2)} \right\|_\diamond$, $\epsilon_L^{\diamond(2)} := \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(2)} \right\|_\diamond$ と関係付けることができる. 証明は付録 H.6 に述べた.

系 6.5 (6.28) で定義されたコスト関数 $C_{\text{RPQC}}(\gamma)$ を考える. コスト関数の勾配の期待値は,

$$\mathbb{E}_\gamma \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = 0 \quad (6.30)$$

であり, 分散とアンザッツの表現力に関して,

$$\left| \mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] - v_\gamma(\rho, O) \right| \leq 4\epsilon_R^{(2)} \epsilon_L^{(2)} + \frac{\sqrt{2^{n+3} \Delta_{2^n}^{(2)}(V_j)}}{4^n - 1} \left(\epsilon_R^{(2)} \Delta_{2^n}^{(2)}(O) + \epsilon_L^{(2)} \Delta_{2^n}^{(2)}(\rho) \right) \quad (6.31)$$

$$\left| \nabla_{\gamma} \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] - v_{\gamma}(\rho, O) \right| \leq 4 \left(\frac{\epsilon_R^{(2)} \epsilon_L^{(2)}}{\epsilon_R \epsilon_L} \|O\|_1^2 + \frac{\epsilon_L^{(2)} \Delta_{2^n}^{(2)}(\rho) \|O\|_1^2 + \epsilon_R^{(2)} \Delta_{2^n}^{(2)}(O)}{4^n - 1} \right) \quad (6.32)$$

が成り立つ。ここで、

$$v_{\gamma}(\rho, O) := \frac{2^{n+1} \Delta_{2^n}^{(2)}(\rho) \Delta_{2^n}^{(2)}(O) \Delta_{2^n}^{(2)}(V_j)}{(4^n - 1)^2} \quad (6.33)$$

とした。

(6.32) は, (6.22) の系として即座に得られる。一方で, (6.31) は, $U_j(\gamma_j)$ の具体的な構造を用いることで, (6.21) より強い不等式を導いた。系 6.5 は [39] の結果を再現しており, 特に (6.31) は [39] の結果より強い不等式となっている。

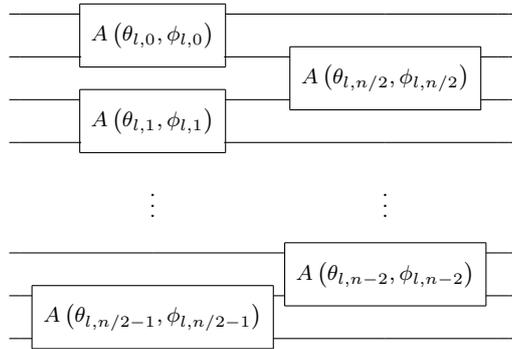
6.4 粒子数保存アンザッツを用いたコスト関数の性質

6.4.1 問題設定

n 量子ビット \mathcal{H} に作用する L 層の粒子数保存アンザッツ $A_{n,L}: [0, 2\pi)^{2(n-1)L} \rightarrow \mathcal{U}(2^n)$ は,

$$A_{n,L}(\boldsymbol{\theta} = (\theta_{l,i})_{l,i}, \boldsymbol{\phi} = (\phi_{l,i})_{l,i}) = \prod_{l=0}^{L-1} \tilde{A}_n((\theta_{l,i})_{i=0}^{n-2}, (\phi_{l,i})_{i=0}^{n-2}) \quad (6.34)$$

によって定義された。ここで, $\tilde{A}_n((\theta_{l,i})_{i=0}^{n-2}, (\phi_{l,i})_{i=0}^{n-2})$ は, 粒子数保存アンザッツ $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ の第 l 層に対応し, $n-1$ 個の A ゲートを用いて



のように分解される。ここでは, 粒子数保存アンザッツを用いた変分量子アルゴリズムのコスト関数

$$C(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \text{Tr} \left[O A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})^\dagger \rho A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) \right] \quad (6.35)$$

を考える。ここで, ρ は m 粒子数の n 量子ビットの量子状態とした。粒子数保存アンザッツ $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ は A ゲートから成るが, そのうちの 1 つの A ゲート $A(\theta_{l,i}, \phi_{l,i})$ に注目し, $\gamma \in \{\boldsymbol{\theta} := \theta_{l,i}, \boldsymbol{\phi} := \phi_{l,i}\}$ に関するコスト関数の勾配を考える。そのために, 図 6.1 のように, $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ を $U_R(\gamma_R), U_M(\gamma_M) := A(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) \otimes I_{\mathcal{H}_A}, U_L(\gamma_L)$ と 3 つの部分に分解して考える。ここで, $I_{\mathcal{H}_A}$ は, A ゲート $A(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ が作用しない量子ビットに作用する恒等演算子とした。

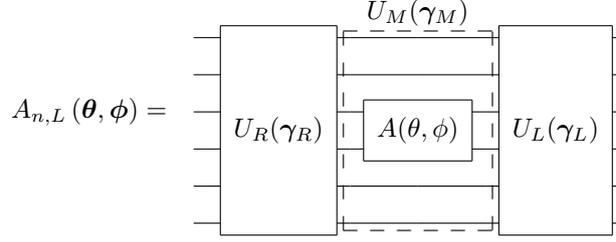


図 6.1: 粒子数保存アンザッツ $A_{n,L}(\theta, \phi)$ の $U_R(\gamma_R)$, $U_M(\gamma_M)$, $U_L(\gamma_M)$ への分解.

A ゲートは粒子数を保存するので, A ゲートのみから成る $U_R(\gamma_R)$, $U_M(\gamma_M)$, $U_L(\gamma_M)$ もまた粒子数を保存する. よって, 入力状態 ρ の粒子数が m である, つまり $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_{n,m})$ ならば, $\mathcal{H}_{n,m}$ に作用する成分 $U_R^{(m)}(\gamma_R) := P_{n,m}U_R(\gamma_R)P_{n,m}^\dagger$, $U_M^{(m)}(\gamma_M) := P_{n,m}U_M(\gamma_M)P_{n,m}^\dagger$, $U_L^{(m)}(\gamma_L) := P_{n,m}U_L(\gamma_L)P_{n,m}^\dagger$ だけ考えれば良い. ここで, 演算子 $P_{n,m}: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_{n,m}$ を

$$P_{n,m} = \sum_{\{(i_0, i_1, \dots, i_{n-1}) | i_k \in \{0,1\}, \sum_{k=0}^{n-1} i_k = m\}} |i_0, i_1, \dots, i_{n-1}\rangle \langle i_0, i_1, \dots, i_{n-1}|. \quad (6.36)$$

とした. したがって, コスト関数 (6.35) の $\mathcal{H}_{n,m}$ に作用する成分

$$C(\theta, \phi) = \text{Tr} \left[O^{(m)} U_L^{(m)}(\gamma_L) U_M^{(m)}(\gamma_M) U_R^{(m)}(\gamma_R) \rho^{(m)} U_R^{(m)}(\gamma_R)^\dagger U_M^{(m)}(\gamma_M)^\dagger U_L^{(m)}(\gamma_L)^\dagger \right] \quad (6.37)$$

だけ考えれば良い*1. ここで, $\rho^{(m)} := P_{n,m}\rho P_{n,m}^\dagger$, $O^{(m)} := P_{n,m}OP_{n,m}^\dagger$ とした.

6.4.2 結果

アンザッツ $U_R^{(m)}$, $U_L^{(m)}$ がユニタリ 2- デザインである程に十分な表現能力を持つとすると. 定理 6.1 から, コスト関数の勾配の性質について系 6.6 が導かれる. 証明は付録 H.8 に述べた.

系 6.6 (6.35) で定義された粒子数保存アンザッツを用いた変分量子アルゴリズムのコスト関数 $C(\theta, \phi)$ を考える. ρ を粒子数 m を持つ n 量子ビットの量子状態とする. また, $U_R^{(m)}$, $U_L^{(m)}$ がユニタリ 2- デザインであり, θ, ϕ がそれぞれ独立に $[0, 2\pi)$ 上の一様分布に従うとする. このとき, コスト関数の $\gamma \in \{\theta, \phi\}$ に関する勾配の期待値は,

$$\mathbb{E}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C(\theta, \phi)}{\partial \gamma} \right] = 0 \quad (6.38)$$

となり, 分散は,

$$\mathbb{V}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C(\theta, \phi)}{\partial \gamma} \right] = \begin{cases} 0 & (m = 0, n) \\ \frac{4b_\gamma d_{n,m} d_{n-2,m-1}}{(d_{n,m}^2 - 1)^2} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(\rho^{(m)}) \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(O^{(m)}) & (m = 1, 2, \dots, n-1) \end{cases} \quad (6.39)$$

*1 より形式的な導出は, 付録 H.7 を参照.

となる. ここで, b_γ は,

$$b_\gamma = \begin{cases} 1 & (\gamma = \theta) \\ \frac{1}{2} & (\gamma = \phi) \end{cases} \quad (6.40)$$

とし, $d_{n,m}$ は $\mathcal{H}_{n,m}$ の次元 ${}_n C_m$ とした.

系 6.6 は, 変分量子アルゴリズムの初期状態 ρ の粒子数 m に応じて, コスト関数の勾配の性質が異なることを意味している. 特に, 粒子数が 0 の量子状態は $(|0\rangle\langle 0|)^{\otimes n}$ に限る. したがって, 入力状態 ρ の粒子数が 0 のとき, 粒子数 0 の出力状態 $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})^\dagger \rho A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ は $\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}$ に依らない量子状態 $(|0\rangle\langle 0|)^{\otimes n}$ となる. ゆえに, コスト関数 $C(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ が $\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}$ に依らない定数となり, コスト関数の勾配の分散が 0 になる. 同様に, 粒子数が n の量子状態は $(|1\rangle\langle 1|)^{\otimes n}$ に限るので, 入力状態 ρ の粒子数が n の場合も, コスト関数の勾配の分散が 0 になる.

(5.25) のような, 粒子数保存アンザッツを用いた FISC のコスト関数について考える. 粒子数保存アンザッツを用いた FISC の 2 種類のコスト関数は,

$$C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \text{Tr} \left[X_{n,m} O_{\text{global}} X_{n,m} A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})^\dagger \rho A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) \right] \quad (6.41)$$

$$C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) = \text{Tr} \left[X_{n,m} O_{\text{local}} X_{n,m} A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})^\dagger \rho A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}) \right] \quad (6.42)$$

と定義できる. 系 6.6 で, 物理量 O として, $X_{n,m} O_{\text{global}} X_{n,m}^\dagger$, $X_{n,m} O_{\text{local}} X_{n,m}^\dagger$ をとると, 粒子数保存アンザッツを用いた FISC のコスト関数の勾配に関する系 6.7 を得る. 証明は付録 H.9 に述べた.

系 6.7 (6.41), (6.42) で定義された粒子数保存アンザッツを用いた FISC のコスト関数 $C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$, $C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ を考える. ρ を粒子数 $m = 1, 2, \dots, n-1$ を持つ n 量子ビットの純粋状態とする. また, $U_R^{(m)}$ と $U_L^{(m)}$ がユニタリ 2- デザインであり, θ, ϕ がそれぞれ独立に $[0, 2\pi)$ 上の一様分布に従うとする. このとき, コスト関数の $\gamma \in \{\theta, \phi\}$ に関する勾配の期待値は,

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} \left[\frac{\partial C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})}{\partial \gamma} \right] = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} \left[\frac{\partial C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})}{\partial \gamma} \right] = 0 \quad (6.43)$$

となり, 分散は,

$$\mathbb{V}_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} \left[\frac{\partial C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})}{\partial \gamma} \right] = \frac{4b_\gamma d_{n-2, m-1}}{d_{n,m} (d_{n,m} + 1)^2} \quad (6.44)$$

$$\mathbb{V}_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} \left[\frac{\partial C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})}{\partial \gamma} \right] = \frac{16b_\gamma d_{n-2, m-1}^2 m(n-m)}{(d_{n,m} + 1)(d_{n,m}^2 - 1)n^3} \quad (6.45)$$

となる.

例えば, $m = 2$ のとき, $\mathbb{V}[\partial_\gamma C_{\text{global}}] = O(n^{-5})$, $\mathbb{V}[\partial_\gamma C_{\text{local}}] = O(n^{-6})$ のようにスケールする. 一方で, $m = n/2$ のとき, $\mathbb{V}[\partial_\gamma C_{\text{global}}] = O(n4^{-n})$, $\mathbb{V}[\partial_\gamma C_{\text{local}}] = O(n^{-1/2}2^{-n})$ のようにスケールする*2. つまり, $U_R^{(m)}$, $U_L^{(m)}$ がユニタリ 2- デザインであるならば, C_{global} と C_{local} ともに, 初期状態 ρ の粒子数 m が 2 のと

*2 ここで, $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{2^{2n}}{\sqrt{n} 2^n C_n} = \sqrt{\pi}$ を用いた [80].

きはバレンプラトーではない。一方、初期状態 ρ の粒子数 m が $n/2$ のときはバレンプラトーである。このように、粒子数保存アンザッツを用いた変分量子アルゴリズムのコスト関数がバレンプラトーを持つか否かは、初期状態の粒子数 m に依ることがわかる。

命題 6.2, 定理 6.3 を用いることで, 系 6.5 で述べたように, コスト関数の勾配の性質をアンザッツの表現力と関係づけることができる。 ν_R, ν_L を確率変数 γ_R, γ_L の分布とする。このとき, 4.1.2 に基づき, アンザッツ $U_R^{(m)}(\gamma_R), U_L^{(m)}(\gamma_L)$ の表現力を定義する。そのために, $\mathcal{A}_{U^{(m)}(\gamma_R), \nu_R}^{(t)} : \mathcal{L}(\mathcal{H}_{n,m}^{\otimes t}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_{n,m}^{\otimes t})$, $\mathcal{A}_{U^{(m)}(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(t)} : \mathcal{L}(\mathcal{H}_{n,m}^{\otimes t}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_{n,m}^{\otimes t})$ を,

$$\mathcal{A}_{U^{(m)}(\gamma_R), \nu_R}^{(t)}(\cdot) := \int_{\mathcal{U}(d_{n,m})} \mu_{\mathbb{H}}(dV) V^{\otimes t}(\cdot) (V^\dagger)^{\otimes t} - \int \nu_R(d\gamma_R) \left(U_R^{(m)}(\gamma_R) \right)^{\otimes t}(\cdot) \left(U_R^{(m)}(\gamma_R)^\dagger \right)^{\otimes t} \quad (6.46)$$

$$\mathcal{A}_{U^{(m)}(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(t)}(\cdot) := \int_{\mathcal{U}(d_{n,m})} \mu_{\mathbb{H}}(dV) (V^\dagger)^{\otimes t}(\cdot) V^{\otimes t} - \int \nu_L(d\gamma_L) \left(U_L^{(m)}(\gamma_L)^\dagger \right)^{\otimes t}(\cdot) \left(U_L^{(m)}(\gamma_L) \right)^{\otimes t} \quad (6.47)$$

で定義する。ここで, シャッテン 2- ノルムを用いて, $U_R^{(m)}(\gamma_R), U_L^{(m)}(\gamma_L)$ の表現力 $\epsilon_R^{(t)}, \epsilon_L^{(t)}$ を,

$$\epsilon_R^{(t)} := \left\| \mathcal{A}_{U^{(m)}(\gamma_R), \nu_R}^{(t)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes t} \right) \right\|_2, \quad \epsilon_L^{(t)} := \left\| \mathcal{A}_{U^{(m)}(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(t)} \left((O^{(m)})^{\otimes t} \right) \right\|_2 \quad (6.48)$$

と定義する。さらに, ダイヤモンドノルムを用いて, $U_R^{(m)}(\gamma_R), U_L^{(m)}(\gamma_L)$ の表現力 $\epsilon_R^{\diamond(t)}, \epsilon_L^{\diamond(t)}$ を,

$$\epsilon_R^{\diamond(t)} := \left\| \mathcal{A}_{U^{(m)}(\gamma_R), \nu_R}^{(t)} \right\|_{\diamond}, \quad \epsilon_L^{\diamond(t)} := \left\| \mathcal{A}_{U^{(m)}(\gamma_L)^\dagger, \nu_L}^{(t)} \right\|_{\diamond} \quad (6.49)$$

と定義する。このとき, アンザッツの表現力とコスト関数の勾配の性質について, 次の系 6.8 が成立する。証明は付録 H.10 に述べた。

系 6.8 (6.35) で定義された粒子数保存アンザッツを用いた変分量子アルゴリズムのコスト関数 $C(\theta, \phi)$ を考える。 ρ を粒子数 $m = 1, 2, \dots, n-1$ を持つ n 量子ビットの量子状態とする。 θ, ϕ がそれぞれ独立に $[0, 2\pi)$ 上の一様分布に従うとする。このとき, コスト関数の $\gamma \in \{\theta, \phi\}$ に関する勾配の期待値は,

$$\mathbb{E}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C(\theta, \phi)}{\partial \gamma} \right] = 0 \quad (6.50)$$

となり, 分散とアンザッツの表現力に関して,

$$\begin{aligned} & \left| \mathbb{V}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C(\theta, \phi)}{\partial \gamma} \right] - v_\gamma(\rho^{(m)}, O^{(m)}) \right| \\ & \leq 2b_\gamma \left(2\epsilon_R^{(2)}\epsilon_L^{(2)} + \frac{d_{n-2,m-1}}{d_{n,m}^2 - 1} \sqrt{4 + \frac{2n(n-1)}{m(n-m)}} \left(\epsilon_R^{(2)} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(O^{(m)}) + \epsilon_L^{(2)} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(\rho^{(m)}) \right) \right) \end{aligned} \quad (6.51)$$

$$\begin{aligned} & \left| \mathbb{V}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C(\theta, \phi)}{\partial \gamma} \right] - v_\gamma(\rho^{(m)}, O^{(m)}) \right| \\ & \leq 4b_\gamma \left(\epsilon_R^{(2)\diamond} \epsilon_L^{(2)\diamond} \|O^{(m)}\|_1^2 + \frac{\epsilon_R^{\diamond(2)} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(O^{(m)}) + \epsilon_L^{\diamond(2)} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(\rho^{(m)}) \|O^{(m)}\|_1^2}{d_{n,m}^2 - 1} \right) \end{aligned} \quad (6.52)$$

が成り立つ。ただし、 $v_\gamma(\rho^{(m)}, O^{(m)})$ は、 $U_R^{(m)}, U_L^{(m)}$ がユニタリ 2- デザインであると仮定した場合のコスト関数の勾配の分散で、

$$v_\gamma(\rho^{(m)}, O^{(m)}) = \frac{4b_\gamma d_{n,m} d_{n-2,m-1}}{(d_{n,m}^2 - 1)^2} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(\rho^{(m)}) \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(O^{(m)}) \quad (6.53)$$

である。

系 6.8 の (6.52) は、(6.22) の系として即座に得られる。一方で、(6.51) は、粒子数保存アンザッツの具体的な構造を用いることで、(6.21) より強い不等式を導いた。

6.5 数値計算

6.5.1 粒子数保存アンザッツの表現力と層数の関係

(6.48) で定義した粒子数保存アンザッツの表現力が、その層数とどのような関係にあるかを数値計算によって調べる。ここでは、(6.48) において、 $U_R(\gamma_R)$ として $A_{n,L}(\theta, \phi)^\dagger$ を、 $U_L(\gamma_L)$ として $A_{n,L}(\theta, \phi)$ を考え、アンザッツの表現力

$$\epsilon_R^{(2)}(\rho^{(m)}) = \left\| \mathcal{A}_{A_{n,L}^{(m)}(\gamma)^\dagger, \nu_R}^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2, \quad \epsilon_L^{(2)}(O^{(m)}) = \left\| \mathcal{A}_{A_{n,L}^{(m)}(\gamma), \nu_L}^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \quad (6.54)$$

を数値計算する。見やすさのため、 $A_{n,L}(\theta, \phi)$ を $A_{n,L}(\gamma)$ と書き、 $A_{n,L}^{(m)}(\gamma) := P_{n,m} A_{n,L}(\gamma) P_{n,m}^\dagger$ とした。(4.8) で述べたように、アンザッツの表現力は、

$$\left\{ \epsilon_R^{(2)}(\rho^{(m)}) \right\}^2 = \mathcal{F}_{A_{n,L}^{(m)}(\gamma)^\dagger, \nu_R}^{(2)}(\rho^{(m)}) - \mathcal{F}_H^{(2)}(\rho^{(m)}) \quad (6.55)$$

$$\left\{ \epsilon_L^{(2)}(O^{(m)}) \right\}^2 = \mathcal{F}_{A_{n,L}^{(m)}(\gamma), \nu_L}^{(2)}(O^{(m)}) - \mathcal{F}_H^{(2)}(O^{(m)}) \quad (6.56)$$

と、一般化フレームポテンシャルという量と関係づけられる。ここで、一般化フレームポテンシャルは、

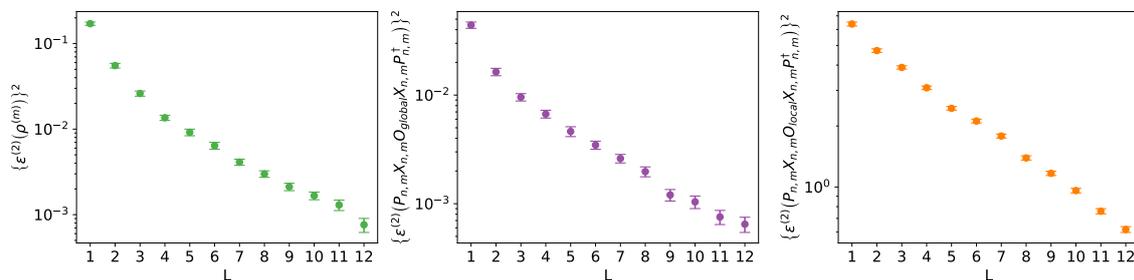
$$\mathcal{F}_{A_{n,L}^{(m)}(\gamma)^\dagger, \nu_R}^{(2)}(\rho^{(m)}) = \int \nu_R(d\gamma) \int \nu_R(d\gamma') \text{Tr} \left[\rho^{(m)} A_{n,L}^{(m)}(\gamma') A_{n,L}^{(m)}(\gamma)^\dagger \rho^{(m)\dagger} A_{n,L}^{(m)}(\gamma) A_{n,L}^{(m)}(\gamma')^\dagger \right]^2 \quad (6.57)$$

$$\mathcal{F}_{A_{n,L}^{(m)}(\gamma), \nu_L}^{(2)}(O^{(m)}) = \int \nu_L(d\gamma) \int \nu_L(d\gamma') \text{Tr} \left[O^{(m)} A_{n,L}^{(m)}(\gamma')^\dagger A_{n,L}^{(m)}(\gamma) O^{(m)\dagger} A_{n,L}^{(m)}(\gamma)^\dagger A_{n,L}^{(m)}(\gamma') \right]^2 \quad (6.58)$$

で定義された。また、 $X^{(m)} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_{n,m})$ に対して、 $\mathcal{F}_H^{(2)}(X^{(m)})$ は、公式 B.3 より、

$$\mathcal{F}_H^{(2)}(X^{(m)}) = \int_{\mathcal{U}(d_{n,m})} \mu_H(dV) \text{Tr} \left[X^{(m)} V X^{(m)\dagger} V^\dagger \right]^2 \quad (6.59)$$

$$= \frac{2 \text{Tr} [X^{(m)}]^2 \text{Tr} [(X^{(m)})^2]}{d_{n,m}^2 - 1} - \frac{\text{Tr} [(X^{(m)})^2]^2 + \text{Tr} [X^{(m)}]^4}{d_{n,m} (d_{n,m}^2 - 1)} \quad (6.60)$$



(a) $\rho^{(2)}$ に対するアンザッツの表現力の 2 乗 $\{\epsilon_R^{(2)}(\rho^{(2)})\}^2$ とアンザッツの層数の関係。ここで、 ρ として $X_{10,2}(|0\rangle\langle 0|)^{\otimes 10}X_{10,2}$ をとった。
 (b) $O^{(2)}$ に対するアンザッツの表現力の 2 乗 $\{\epsilon_L^{(2)}(O^{(2)})\}^2$ とアンザッツの層数の関係。ここで、 O として $X_{10,2}O_{\text{global}}X_{10,2}$ をとった。
 (c) $O^{(2)}$ に対するアンザッツの表現力の 2 乗 $\{\epsilon_L^{(2)}(O^{(2)})\}^2$ とアンザッツの層数の関係。ここで、 O として $X_{10,2}O_{\text{local}}X_{10,2}$ をとった。

図 6.2: 粒子数保存アンザッツの表現力と層数の関係。層数が大きくなるにつれて、アンザッツの表現力は 0 に漸近していく、つまりアンザッツの表現能力は大きくなる。

と正確に計算できる。したがって、アンザッツの表現力の 2 乗 $\{\epsilon_R^{(2)}(\rho^{(m)})\}^2$, $\{\epsilon_L^{(2)}(O^{(m)})\}^2$ を数値計算によって推定するには、一般化フレームポテンシャル $\mathcal{F}_{A_{n,L}^{(m)}(\gamma)^\dagger, \nu_R}^{(2)}(\rho^{(m)})$, $\mathcal{F}_{A_{n,L}^{(m)}(\gamma), \nu_L}^{(2)}(O^{(m)})$ をモンテカルロ積分によって推定すれば良い。

ここでは、量子ビット数 $n = 10$, 粒子数 $m = 2$ の場合に、アンザッツの層数 L を変化させ、アンザッツの表現力の 2 乗

$$\begin{aligned} \text{(a)} & \left\{ \epsilon_R^{(2)}(\rho^{(2)}) \right\}^2 \text{ with } \rho = X_{10,2}(|0\rangle\langle 0|)^{\otimes 10}X_{10,2} \\ \text{(b)} & \left\{ \epsilon_L^{(2)}(O^{(2)}) \right\}^2 \text{ with } O = X_{10,2}O_{\text{global}}X_{10,2} \\ \text{(c)} & \left\{ \epsilon_L^{(2)}(O^{(2)}) \right\}^2 \text{ with } O = X_{10,2}O_{\text{local}}X_{10,2} \end{aligned}$$

を数値計算によって推定した。ここで、 $X_{10,2} = (X \otimes I)^{\otimes 5}$ とした。また、 ν_R, ν_L は一様分布として、一般化フレームポテンシャルの推定のためのモンテカルロ積分におけるサンプル数は 1000 とした。これら 3 種類の数値計算の結果を図 6.2 に示した。

図 6.2 によれば、粒子数保存アンザッツの層数が大きくなるにつれて、アンザッツの表現力は 0 に漸近していく、つまりアンザッツの表現能力は大きくなる。この結果は、次のように理解できる。アンザッツの層数を増やすと、アンザッツの持つパラメータの数も増えるので、アンザッツより多くのユニタリ演算子を表現できることが期待される。したがって、アンザッツの層数を増やすことで、アンザッツの作り出す分布はハール分布に近づいていくことが期待される。アンザッツの表現力は、アンザッツの作り出す分布とハール分布の差として定義されたので、アンザッツの層数を増やすことで、アンザッツの表現力は 0 に漸近していくことが期待される。

6.5.2 コスト関数の勾配の分散と粒子数保存アンザッツの層数の関係

コスト関数の勾配の分散と粒子数保存アンザッツの層数が、どのような関係にあるかを数値計算によって調べる。また、系 6.7 や系 6.8 で導いた解析的な結果が、数値計算の結果と矛盾しないことを確かめる。

ここでは、(6.41), (6.42) で定義したコスト関数 $C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$, $C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ の $\gamma = \theta_{\lfloor L/2 \rfloor, 0}$ に関する勾配の分散 $\nabla_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} [\partial_\gamma C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})]$, $\nabla_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} [\partial_\gamma C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})]$ の、粒子数保存アンザッツ $A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ の層数 L に対する依存性を評価する。500 サンプルの一樣乱数 $(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ に対する $\partial_\gamma C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$, $\partial_\gamma C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})$ の分散を数値計算することで、これらのコスト関数の勾配の分散を推定する。図 6.3 に、

- (a) 初期状態 ρ の粒子数 $m = 2$ のときの $\nabla_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} [\partial_\gamma C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})]$ の推定値のアンザッツの層数 L 依存性
- (b) 初期状態 ρ の粒子数 $m = n/2$ のときの $\nabla_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} [\partial_\gamma C_{\text{global}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})]$ の推定値のアンザッツの層数 L 依存性
- (c) 初期状態 ρ の粒子数 $m = 2$ のときの $\nabla_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} [\partial_\gamma C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})]$ の推定値のアンザッツの層数 L 依存性
- (d) 初期状態 ρ の粒子数 $m = n/2$ のときの $\nabla_{\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}} [\partial_\gamma C_{\text{local}}(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi})]$ の推定値のアンザッツの層数 L 依存性

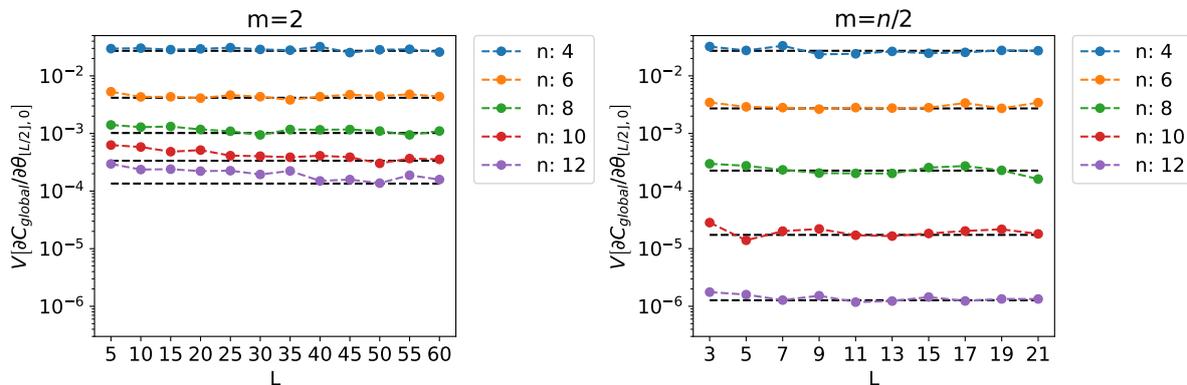
を示した。ここで、初期状態 ρ は純粋状態で、 $\mathcal{H}_{n,m}$ の計算基底の等しい重ね合わせとした。例えば、 $n = 4, m = 2$ であれば、 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|0011\rangle + |0101\rangle + |0110\rangle + |1001\rangle + |1010\rangle + |1100\rangle)$ として、初期状態は $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ である。

図 6.3 によれば、コスト関数の勾配の分散は、粒子数保存アンザッツの層数が大きくなるにつれて、 $U_R^{(m)}$ と $U_L^{(m)}$ がユニタリ 2 - デザインであると仮定した場合のコスト関数の勾配の分散 $v_\gamma(\rho^{(m)}, O^{(m)})$ に漸近していく。いま、 $v_\gamma(\rho^{(m)}, O^{(m)})$ は、系 6.7 で導いた (6.44), (6.45) である。この結果は、次のように理解できる。図 6.2 が示すように、粒子数保存アンザッツの層数が大きくなるにつれて、アンザッツの表現力は 0 に漸近していく。すると、系 6.8 の (6.51) の右辺の $\epsilon_R^{(2)}, \epsilon_L^{(2)}$ が 0 に漸近していき、コスト関数の勾配の分散は、系 6.7 で導いた $v_\gamma(\rho^{(m)}, O^{(m)})$ に漸近していく。したがって、系 6.7 や系 6.8 で導いた解析的な結果が、数値計算の結果と矛盾しないことが確かめられた。

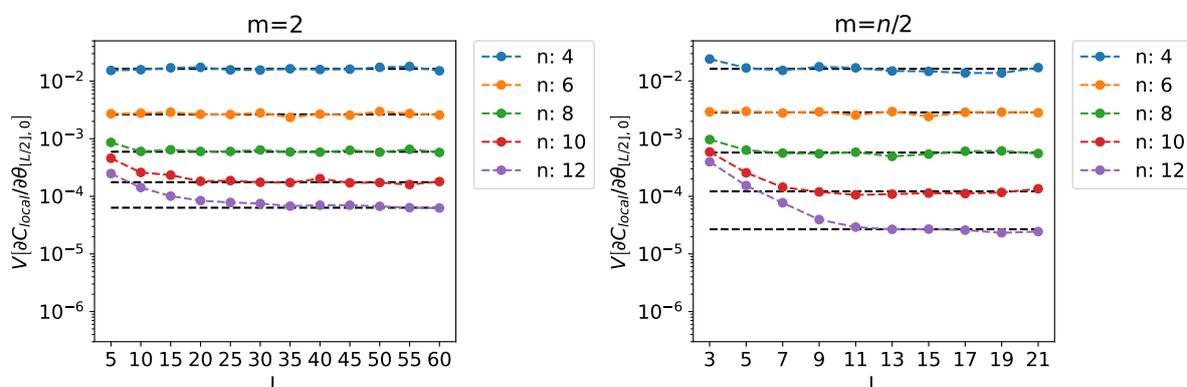
6.5.3 コスト関数の性質と最適化の収束性の関係

コスト関数の性質が、その最適化の収束性にどう影響するかを議論する。

FISC では、(6.41) と (6.42) で定義したように 2 種類のコスト関数 C_{global} と C_{local} が定義できた。そこで、粒子数保存アンザッツを用いた FISC を例にとり、同じタスクに対して C_{global} と C_{local} のどちらの方がより真の解に近い収束値を得られるのかを数値計算によって調べた。考えるべき FISC のタスクは、



(a) 初期状態 ρ の粒子数 $m = 2$ のとき、 C_{global} の勾配の分散とアンザッツの層数 L の関係。 (b) 初期状態 ρ の粒子数 $m = n/2$ のとき、 C_{global} の勾配の分散とアンザッツの層数 L の関係。



(c) 初期状態 ρ の粒子数 $m = 2$ のとき、 C_{local} の勾配の分散とアンザッツの層数 L の関係。 (d) 初期状態 ρ の粒子数 $m = n/2$ のとき、 C_{local} の勾配の分散とアンザッツの層数 L の関係。

図 6.3: コスト関数 $C_{\text{global}}(\theta, \phi)$, $C_{\text{local}}(\theta, \phi)$ の勾配の分散と粒子数保存アンザッツの層数 L との関係。黒い点線は、 $U_R^{(m)}$, $U_L^{(m)}$ がユニタリ 2 - デザインであると仮定した場合のコスト関数の勾配の分散 $v_\gamma(\rho^{(m)}, O^{(m)})$ である。アンザッツの層数が大きくなるにつれて、コスト関数の勾配は $v_\gamma(\rho^{(m)}, O^{(m)})$ に漸近していく。

$X_{8,4} = (X \otimes I)^{\otimes 4}$ として、

$$X_{8,4} |0\rangle^{\otimes 8} = A_{8,4}(\theta, \phi) X_{8,4} |0\rangle^{\otimes 8} \quad (6.61)$$

を満たす (θ, ϕ) を探索することとした*3。つまり、2 種類のコスト関数

$$C_{\text{global}}(\theta, \phi) = \text{Tr} \left[X_{8,4} O_{\text{global}} X_{8,4} A_{8,4}(\theta, \phi)^\dagger X_{8,4} (|0\rangle\langle 0|)^{\otimes 8} X_{8,4} A_{8,4}(\theta, \phi) \right] \quad (6.62)$$

$$C_{\text{local}}(\theta, \phi) = \text{Tr} \left[X_{8,4} O_{\text{local}} X_{8,4} A_{8,4}(\theta, \phi)^\dagger X_{8,4} (|0\rangle\langle 0|)^{\otimes 8} X_{8,4} A_{8,4}(\theta, \phi) \right] \quad (6.63)$$

を最適化した。オプティマイザーには、5.4.3 で述べた逐次最小化アルゴリズムを用いて、1 量子回路あたりの測定回数は 8192 とした。コスト関数 $C_{\text{global}}(\theta, \phi)$, $C_{\text{local}}(\theta, \phi)$ の初期パラメータを一様ランダムに選び、

*3 (6.61) の解 $(\theta = (\theta_{l,i})_{l,i}, \phi = (\phi_{l,i})_{l,i})$ は存在する。実際、全ての l, i に対して $\theta_{l,i} = \pi/2$ ならば、(6.61) の等号は成立する。

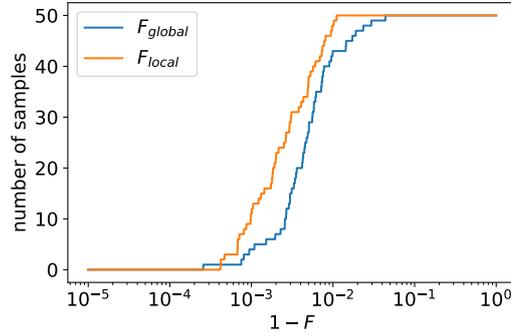


図 6.4: (6.62), (6.63) で定義されたコスト関数 $C_{\text{global}}, C_{\text{local}}$ の最適化問題における, $1 - F_{\text{global}}, 1 - F_{\text{local}}$ の累積分布.

500 イテレーション後にそれぞれ最適解 $(\hat{\theta}_{\text{global}}, \hat{\phi}_{\text{global}}), (\hat{\theta}_{\text{local}}, \hat{\phi}_{\text{local}})$ を得た. そして, 最適解と真の解との近さを定量化するために, 忠実度

$$F_{\text{global}} = F(X_{8,4} | 0 \rangle^{\otimes 8}, A_{8,4}(\hat{\theta}_{\text{global}}, \hat{\phi}_{\text{global}}) X_{8,4} | 0 \rangle^{\otimes 8}) \quad (6.64)$$

$$F_{\text{local}} = F(X_{8,4} | 0 \rangle^{\otimes 8}, A_{8,4}(\hat{\theta}_{\text{local}}, \hat{\phi}_{\text{local}}) X_{8,4} | 0 \rangle^{\otimes 8}) \quad (6.65)$$

をそれぞれ求めた. 50 種類の初期パラメータに対して計算した $1 - F_{\text{global}}$ と $1 - F_{\text{local}}$ の累積分布を図 6.4 に示した.

図 6.4 によれば, C_{global} に比べて C_{local} の方が, 最適化の収束値がコスト関数の最小値に近くなりやすいことがわかる. この理由の 1 つとして, C_{global} に比べて C_{local} の方が, コスト関数の平坦な領域が小さいことが挙げられる. 実際, 系 6.6 において, $n = 8, m = 4$ とすると, $\mathbb{V}[\partial_{\gamma} C_{\text{global}}] \sim 2.3b_{\gamma} \times 10^{-4}$, $\mathbb{V}[\partial_{\gamma} C_{\text{local}}] \sim 5.9b_{\gamma} \times 10^{-4}$ であるから, チェビシエフの不等式 (A.15) より, C_{global} に比べて C_{local} の方が平坦な領域が小さいことがわかる.

6.6 議論

本章の定理 6.1, 命題 6.2, 定理 6.3 では, アンザッツを用いた変分量子アルゴリズムに対して普遍的に成立するコスト関数の解析的な性質を導いた. 本章の結果は, 既に従来の研究で知られていた, ある特定のクラスのアンザッツに対してのみ成立するコスト関数の解析的な性質が, アンザッツの構造に依らず成立することを示している.

定理 6.3 では, アンザッツの表現力という抽象的な量とコスト関数の勾配の大きさを関係づけた. しかし, 実用的には, アンザッツの層数やアンザッツに用いる量子ゲートの数といった具体的な量とコスト関数の勾配の大きさを関係づけたい. そうすることで, 具体的にどういったアンザッツを用いた変分量子アルゴリズムであれば, バレンプラトーを引き起こすことなく, 効率よくコスト関数の最適化を実行することができるかをより詳細に理解することができる.

また、定理 6.3 より、アンザッツの表現能力の豊かさがバレンプラトーを引き起こす要因であることを導いた。すなわち、表現能力を抑えたアンザッツを設計することで、バレンプラトーの影響を緩和することができる。実際、図 6.2 が示すように、アンザッツの層数を減らすことでアンザッツの表現能力を抑えることはできる。しかし、単にアンザッツの表現能力を抑えるだけでは、解きたい問題の解を表現できるかわからない。したがって、解きたい問題の解を表現するだけの表現能力は保ちつつ表現能力を抑えたアンザッツを設計する必要があることと言える。

系 6.7 では、粒子数保存アンザッツを用いた FISC という同じ問題を解くにあたり、コスト関数の定義によってその勾配の性質のスケーリングが異なることを見た。そして、6.5.3 では、数値計算によって、その違いがコスト関数の最適化の収束性に影響することをみた。これは、コスト関数をうまく定義することで、最適化の収束性を向上させることができることを示唆している。

本章での解析は、NISQ デバイスの雑音の影響がないという仮定の下で行ったことに注意しなければならない。全く同様の主張が、雑音の下で成立するか否かは明らかではない。というのも、定理 6.1 では、アンザッツがユニタリ 2 - デザインであるとしたが、雑音の下ではアンザッツの作用はもはやユニタリではないからである。加えて、定理 6.3 で用いたアンザッツの表現力は、雑音の下では適切に定義されないからである。したがって、雑音下における変分量子アルゴリズムのコスト関数の性質は、別の手法により詳細に調べていく必要がある。

第7章

結論

変分量子アルゴリズムは、NISQ デバイスを用いた代表的なアルゴリズムの一つである。変分量子アルゴリズムはその汎用さ故に、量子化学、組合せ最適化問題、物理系シミュレーション、機械学習といったさまざまな分野への応用が期待されている。

そこで、第5章では、変分量子アルゴリズムによる物理系シミュレーションを考えた。量子コンピュータを用いれば、古典コンピュータ上で表現できない程サイズの大きな系の状態を表現できる。しかし、NISQ デバイスの制約上、単純な手法による長時間発展シミュレーションは難しい。本論文では、RQD と呼ばれる変分量子アルゴリズムに注目し、格子シュウィンガーモデルの長時間発展シミュレーションの実現を試みた。雑音や統計誤差に剛健な逐次最小化アルゴリズムを用いてコスト関数の最小化を行うことで、時間発展演算子を電荷保存則を満たすような粒子数保存アンザッツに近似した。こうして、サイズの小さな系に対して、NISQ デバイスの制約を超えた長時間発展シミュレーションを実機上で実現した。一方で、古典コンピュータ上でシミュレーションできない程サイズの大きな系のシミュレーションが、RQD によって必ずしも可能になるとは限らないことを導いた。これは、系の初期状態の電荷によっては、RQD に用いるコスト関数がバレンプラトーを示し、その最適化を効率的に行うことができなくなるからである。

このように、ここ数年、変分量子アルゴリズムのコスト関数の勾配消失問題、バレンプラトーに関する議論が活発になってきた。そこで、第6章では、バレンプラトーが起こる原因を理解するため、NISQ デバイスの雑音の影響がないという仮定のもと、コスト関数の解析的な性質について調べた。アンザッツの表現能力が豊かになるほど、変分量子アルゴリズムのコスト関数の平坦な領域が増大していくことを示した。この結果は、アンザッツの構造の詳細によらず成立する一般的な結果であることを強調しておく。したがって、変分量子アルゴリズムのコスト関数を効率よく最適化するためには、解きたい問題の解を表現するだけの表現能力は保ちつつ表現能力を抑えたアンザッツを設計する必要があることが分かった。

変分量子アルゴリズムは、従来のコンピュータでは解けなかった複雑な問題を解く可能性を秘めている。しかしながら、その実現のためにはバレンプラトーと呼ばれる勾配消失問題を解決していかなければならない。そのためには、バレンプラトーが起こる理由を理解する必要がある。本論文では、雑音の影響がないという仮定

のもとでバレンプラトーが起こる理由の一つを明らかにした。しかし、実際の変分量子アルゴリズムでは、雑音の影響は無視できない。今後は、[27]のように、雑音の影響がコスト関数にどう影響するかを理解していく必要がある。そして、コスト関数への雑音の影響の理解や本論文で得たバレンプラトーが起こる理由の理解が、例えば

- 解きたい問題に適した表現能力を抑えたアンザッツの具体的な設計
- 雑音に対して剛健なオプティマイザーの開発
- 雑音やバレンプラトーの影響を緩和するようなコスト関数の設計

といった研究に繋がっていくであろう。ひいては、変分量子アルゴリズムによって、従来のコンピュータでは解けなかった問題を解く日が来ることを期待したい。

謝辞

本論文の審査に加え、本研究の遂行を暖かく見守って下さった、田中純一教授、澤田龍准教授、寺師弘二准教授に感謝致します。飯山悠太郎助教、永野廉人特任研究員には、本研究に関する議論に付き合っ頂き、多くの助言を戴きました。感謝申し上げます。また、計算機環境をはじめ、何不自由無く研究を行う環境を作って下さった先生方、スタッフの方々にお礼申し上げます。

本研究で使用した IBM Quantum サービスに感謝申し上げます。本論文は、著者の見解を示すものであり、IBM 社 や IBM Quantum チームの方針や立場を反映するものではありません。

最後に、学生生活を支えて下さった家族に心から感謝致します。

参考文献

- [1] P. W. Shor, *Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer*, *SIAM Journal on Computing* **26** (Oct, 1997) 1484–1509.
- [2] P. W. Shor, *Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory*, *Physical review A* **52** (1995) R2493.
- [3] 内閣府, ムーンショット目標6 2050年までに、経済・産業・安全保障を飛躍的に発展させる誤り耐性型汎用量子コンピュータを実現, 2020. <https://www8.cao.go.jp/cstp/moonshot/sub6.html>.
- [4] IBM Quantum, <https://quantum-computing.ibm.com/>, 2021.
- [5] J. Preskill, *Quantum computing in the nisq era and beyond*, *Quantum* **2** (Aug, 2018) 79.
- [6] R. P. Feynman, *Simulating physics with computers*, *International Journal of Theoretical Physics* **21** (1982) 467–488.
- [7] A. N. Michael and L. C. Isaac, *Quantum computation and quantum information*. American Association of Physics Teachers, 2010.
- [8] H. F. Trotter, *On the product of semi-groups of operators*, *Proceedings of the American Mathematical Society* **10** (1959) 545–551.
- [9] M. Suzuki, *Generalized trotter's formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems*, *Communications in Mathematical Physics* **51** (1976) 183–190.
- [10] S. Lloyd, *Universal quantum simulators*, *Science* **273** (1996) 1073–1078, <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.273.5278.1073>.
- [11] M. Otten, C. L. Cortes, and S. K. Gray, *Noise-resilient quantum dynamics using symmetry-preserving ansatzes*, arXiv:1910.06284 [quant-ph].
- [12] M. Cerezo, A. Arrasmith, R. Babbush, S. C. Benjamin, S. Endo, K. Fujii, J. R. McClean, K. Mitarai, X. Yuan, L. Cincio, and et al., *Variational quantum algorithms*, *Nature Reviews Physics* **3** (Aug, 2021) 625–644.
- [13] A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.-Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O'Brien, *A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor*, *Nature*

- Communications* **5** (2014) 4213.
- [14] A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, M. Takita, M. Brink, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, *Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets*, *Nature* **549** (Sep, 2017) 242–246.
- [15] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, *A quantum approximate optimization algorithm*, arXiv:1411.4028 [quant-ph].
- [16] K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa, and K. Fujii, *Quantum circuit learning*, *Physical Review A* **98** (Sep, 2018) .
- [17] E. Farhi and H. Neven, *Classification with quantum neural networks on near term processors*, arXiv:1802.06002 [quant-ph].
- [18] C. Cirstoiu, Z. Holmes, J. Iosue, L. Cincio, P. J. Coles, and A. Sornborger, *Variational fast forwarding for quantum simulation beyond the coherence time*, *npj Quantum Information* **6** (Sep, 2020) .
- [19] B. Commeau, M. Cerezo, Z. Holmes, L. Cincio, P. J. Coles, and A. Sornborger, *Variational hamiltonian diagonalization for dynamical quantum simulation*, arXiv:2009.02559 [quant-ph].
- [20] N. F. Berthussen, T. V. Trevisan, T. Iadecola, and P. P. Orth, *Quantum dynamics simulations beyond the coherence time on nisq hardware by variational trotter compression*, arXiv:2112.12654 [quant-ph].
- [21] S. McArdle, T. Jones, S. Endo, Y. Li, S. C. Benjamin, and X. Yuan, *Variational ansatz-based quantum simulation of imaginary time evolution*, *npj Quantum Information* **5** (Sep, 2019) .
- [22] S. Khatri, R. LaRose, A. Poremba, L. Cincio, A. T. Sornborger, and P. J. Coles, *Quantum-assisted quantum compiling*, *Quantum* **3** (May, 2019) 140.
- [23] K. Sharma, S. Khatri, M. Cerezo, and P. J. Coles, *Noise resilience of variational quantum compiling*, *New Journal of Physics* **22** (Apr, 2020) 043006.
- [24] T. Jones and S. C. Benjamin, *Quantum compilation and circuit optimisation via energy dissipation*, arXiv:1811.03147 [quant-ph].
- [25] J. R. McClean, S. Boixo, V. N. Smelyanskiy, R. Babbush, and H. Neven, *Barren plateaus in quantum neural network training landscapes*, *Nature Communications* **9** (Nov, 2018) .
- [26] M. Cerezo, A. Sone, T. Volkoff, L. Cincio, and P. J. Coles, *Cost function dependent barren plateaus in shallow parametrized quantum circuits*, *Nature Communications* **12** (Mar, 2021) .
- [27] S. Wang, E. Fontana, M. Cerezo, K. Sharma, A. Sone, L. Cincio, and P. J. Coles, *Noise-induced barren plateaus in variational quantum algorithms*, arXiv:2007.14384 [quant-ph].
- [28] C. O. Marrero, M. Kieferová, and N. Wiebe, *Entanglement induced barren plateaus*,

- arXiv:2010.15968 [quant-ph].
- [29] S. Thanasilp, S. Wang, N. A. Nghiem, P. J. Coles, and M. Cerezo, *Subtleties in the trainability of quantum machine learning models*, arXiv:2110.14753 [quant-ph].
- [30] Z. Holmes, A. Arrasmith, B. Yan, P. J. Coles, A. Albrecht, and A. T. Sornborger, *Barren plateaus preclude learning scramblers*, *Physical Review Letters* **126** (May, 2021) .
- [31] S. Wang, P. Czarnik, A. Arrasmith, M. Cerezo, L. Cincio, and P. J. Coles, *Can error mitigation improve trainability of noisy variational quantum algorithms?*, arXiv:2109.01051 [quant-ph].
- [32] X. Ge, R.-B. Wu, and H. Rabitz, *The optimization landscape of hybrid quantum-classical algorithms: from quantum control to nisq applications*, arXiv:2201.07448 [quant-ph].
- [33] A. Arrasmith, M. Cerezo, P. Czarnik, L. Cincio, and P. J. Coles, *Effect of barren plateaus on gradient-free optimization*, *Quantum* **5** (Oct, 2021) 558.
- [34] M. Cerezo and P. J. Coles, *Higher order derivatives of quantum neural networks with barren plateaus*, *Quantum Science and Technology* **6** (Jun, 2021) 035006.
- [35] J. Kogut and L. Susskind, *Hamiltonian formulation of wilson's lattice gauge theories*, *Phys. Rev. D* **11** (Jan, 1975) 395–408.
- [36] B. T. Gard, L. Zhu, G. S. Barron, N. J. Mayhall, S. E. Economou, and E. Barnes, *Efficient symmetry-preserving state preparation circuits for the variational quantum eigensolver algorithm*, *npj Quantum Information* **6** (Jan, 2020) .
- [37] K. M. Nakanishi, K. Fujii, and S. Todo, *Sequential minimal optimization for quantum-classical hybrid algorithms*, *Physical Review Research* **2** (Oct, 2020) .
- [38] M. Larocca, P. Czarnik, K. Sharma, G. Muraleedharan, P. J. Coles, and M. Cerezo, *Diagnosing barren plateaus with tools from quantum optimal control*, arXiv:2105.14377 [quant-ph].
- [39] Z. Holmes, K. Sharma, M. Cerezo, and P. J. Coles, *Connecting ansatz expressibility to gradient magnitudes and barren plateaus*, arXiv:2101.02138 [quant-ph].
- [40] S. Ishizaka, T. Ogawa, and A. Kawachi, *量子情報科学入門*. 共立出版, 2012.
- [41] T. Ogawa, *2021 年度 量子情報数理特論 (量子情報理論)*, 2021.
<http://www.quest.lab.uec.ac.jp/ogawa/qmath2021/>.
- [42] M. S. ANIS, H. Abraham, AduOffei, R. Agarwal, G. Agliardi, M. Aharoni, I. Y. Akhalwaya, G. Aleksandrowicz, T. Alexander, M. Amy, S. Anagolum, E. Arbel, A. Asfaw, A. Athalye, A. Avkhadiev, C. Azaustre, P. Bhole, A. Banerjee, S. Banerjee, W. Bang, A. Bansal, P. Barkoutsos, A. Barnawal, G. Barron, G. S. Barron, L. Bello, Y. Ben-Haim, M. C. Bennett, D. Bevenius, D. Bhatnagar, A. Bhubi, P. Bianchini, L. S. Bishop, C. Blank, S. Bolos, S. Bopardikar, S. Bosch, S. Brandhofer, Brandon, S. Bravyi, N. Bronn, Bryce-Fuller, D. Bucher,

A. Burov, F. Cabrera, P. Calpin, L. Capelluto, J. Carballo, G. Carrascal, A. Carriker, I. Carvalho, A. Chen, C.-F. Chen, E. Chen, J. C. Chen, R. Chen, F. Chevallier, K. Chinda, R. Cholarajan, J. M. Chow, S. Churchill, CisterMoke, C. Claus, C. Clauss, C. Clothier, R. Cocking, R. Cocuzzo, J. Connor, F. Correa, A. J. Cross, A. W. Cross, S. Cross, J. Cruz-Benito, C. Culver, A. D. Córcoles-Gonzales, N. D. S. Dague, T. E. Dandachi, A. N. Dangwal, J. Daniel, M. Daniels, M. Dartiailh, A. R. Davila, F. Debouni, A. Dekusar, A. Deshmukh, M. Deshpande, D. Ding, J. Doi, E. M. Dow, E. Drechsler, E. Dumitrescu, K. Dumon, I. Duran, K. EL-Safty, E. Eastman, G. Eberle, A. Ebrahimi, P. Eendebak, D. Egger, ElePT, Emilio, A. Espiricueta, M. Everitt, D. Facchetti, Farida, P. M. Fernández, S. Ferracin, D. Ferrari, A. H. Ferrera, R. Fouilland, A. Frisch, A. Fuhrer, B. Fuller, M. GEORGE, J. Gacon, B. G. Gago, C. Gambella, J. M. Gambetta, A. Gammanpila, L. Garcia, T. Garg, S. Garion, J. R. Garrison, J. Garrison, T. Gates, L. Gil, A. Gilliam, A. Giridharan, J. Gomez-Mosquera, Gonzalo, S. de la Puente González, J. Gorzinski, I. Gould, D. Greenberg, D. Grinko, W. Guan, D. Guijo, J. A. Gunnels, H. Gupta, N. Gupta, J. M. Günther, M. Haglund, I. Haide, I. Hamamura, O. C. Hamido, F. Harkins, K. Hartman, A. Hasan, V. Havlicek, J. Hellmers, L. Herok, S. Hillmich, H. Horii, C. Howington, S. Hu, W. Hu, J. Huang, R. Huisman, H. Imai, T. Imamichi, K. Ishizaki, Ishwor, R. Iten, T. Itoko, A. Ivrii, A. Javadi, A. Javadi-Abhari, W. Javed, Q. Jianhua, M. Jivrajani, K. Johns, S. Johnstun, Jonathan-Shoemaker, JosDenmark, JoshDumo, J. Judge, T. Kachmann, A. Kale, N. Kanazawa, J. Kane, Kang-Bae, A. Kapila, A. Karazeev, P. Kassebaum, J. Kelso, S. Kelso, V. Khanderao, S. King, Y. Kobayashi, Kovi11Day, A. Kovyshin, R. Krishnakumar, V. Krishnan, K. Krsulich, P. Kumkar, G. Kus, R. LaRose, E. Lacal, R. Lambert, H. Landa, J. Lapeyre, J. Latone, S. Lawrence, C. Lee, G. Li, J. Lishman, D. Liu, P. Liu, L. Madden, Y. Maeng, S. Maheshkar, K. Majmudar, A. Malyshev, M. E. Mandouh, J. Manela, Manjula, J. Marecek, M. Marques, K. Marwaha, D. Maslov, P. Maszota, D. Mathews, A. Matsuo, F. Mazhandu, D. McClure, M. McElaney, C. McGarry, D. McKay, D. McPherson, S. Meesala, D. Meiom, C. Mendell, T. Metcalfe, M. Mevissen, A. Meyer, A. Mezzacapo, R. Midha, D. Miller, Z. Minev, A. Mitchell, N. Moll, A. Montanez, G. Monteiro, M. D. Mooring, R. Morales, N. Moran, D. Morcuende, S. Mostafa, M. Motta, R. Moyard, P. Murali, J. Muggenburg, T. NEMOZ, D. Nadlinger, K. Nakanishi, G. Nannicini, P. Nation, E. Navarro, Y. Naveh, S. W. Neagle, P. Neuweiler, A. Ngoueya, J. Nicander, Nick-Singstock, P. Niroula, H. Norlen, NuoWenLei, L. J. O'Riordan, O. Ogunbayo, P. Ollitrault, T. Onodera, R. Otaolea, S. Oud, D. Padilha, H. Paik, S. Pal, Y. Pang, A. Panigrahi, V. R. Pascuzzi, S. Perriello, E. Peterson, A. Phan, F. Piro, M. Pistoia, C. Piveteau, J. Plewa, P. Pocreau, A. Pozas-Kerstjens, R. Pracht, M. Prokop, V. Prutyaynov, S. Puri,

- D. Puzzuoli, J. Pérez, Quant02, Quintiii, I. R, R. I. Rahman, A. Raja, R. Rajeev, N. Ramagiri, A. Rao, R. Raymond, O. Reardon-Smith, R. M.-C. Redondo, M. Reuter, J. Rice, M. Riedemann, Rietesh, D. Risinger, M. L. Rocca, D. M. Rodríguez, RohithKarur, B. Rosand, M. Rossmannek, M. Ryu, T. SAPV, N. R. C. Sa, A. Saha, A. Ash-Saki, S. Sanand, M. Sandberg, H. Sandesara, R. Sapra, H. Sargsyan, A. Sarkar, N. Sathaye, B. Schmitt, C. Schnabel, Z. Schoenfeld, T. L. Scholten, E. Schoute, M. Schulterbrandt, J. Schwarm, J. Seaward, Sergi, I. F. Sertage, K. Setia, F. Shah, N. Shammah, R. Sharma, Y. Shi, J. Shoemaker, A. Silva, A. Simonetto, D. Singh, D. Singh, P. Singh, P. Singkanipa, Y. Siraichi, Siri, J. Sistos, I. Sitdikov, S. Sivaraajah, M. B. Sletfjerd, J. A. Smolin, M. Soeken, I. O. Sokolov, I. Sokolov, V. P. Soloviev, SooluThomas, Starfish, D. Steenken, M. Stypulkoski, A. Suau, S. Sun, K. J. Sung, M. Suwama, O. Słowik, H. Takahashi, T. Takawale, I. Tavernelli, C. Taylor, P. Taylour, S. Thomas, K. Tian, M. Tillet, M. Tod, M. Tomasik, C. Tornow, E. de la Torre, J. L. S. Toural, K. Trabling, M. Treinish, D. Tenev, TrishaPe, F. Truger, G. Tsilimigkounakis, D. Tulsi, W. Turner, Y. Vaknin, C. R. Valcarce, F. Varchon, A. Vartak, A. C. Vazquez, P. Vijaywargiya, V. Villar, B. Vishnu, D. Vogt-Lee, C. Vuillot, J. Weaver, J. Weidenfeller, R. Wiczorek, J. A. Wildstrom, J. Wilson, E. Winston, WinterSoldier, J. J. Woehr, S. Woerner, R. Woo, C. J. Wood, R. Wood, S. Wood, J. Wootton, M. Wright, L. Xing, J. YU, B. Yang, D. Yeralin, R. Yonekura, D. Yonge-Mallo, R. Yoshida, R. Young, J. Yu, L. Yu, C. Zachow, L. Zdanski, H. Zhang, C. Zoufal, aeddins ibm, alexzhang13, b63, bartek bartlomiej, bcamorrison, brandhsn, charmerDark, deeplokhande, dekel.meirom, dime10, dlasecki, ehchen, fanizzamarco, fs1132429, gadial, galeinston, georgezhou20, georgios ts, gruu, hhorii, hykavitha, itoko, jessica angel7, jezerjojo14, jliu45, jscott2, klinvill, krutik2966, ma5x, michelle4654, msuwama, ntgiwsvp, ordmoj, sagar pahwa, pritamsinha2304, ryancocuzzo, saswati qiskit, septembr, sethmerkel, shaashwat, sternparky, strickroman, tigerjack, tsura crisaldo, vadebayo49, welien, willhbang, wmurphy collabstar, yang.luh, and M. Čepulkovskis, *Qiskit: An open-source framework for quantum computing*, 2021.
- [43] P. Krantz, M. Kjaergaard, F. Yan, T. P. Orlando, S. Gustavsson, and W. D. Oliver, *A quantum engineer's guide to superconducting qubits*, *Applied Physics Reviews* **6** (Jun, 2019) 021318.
- [44] H.-L. Huang, D. Wu, D. Fan, and X. Zhu, *Superconducting quantum computing: A review*, arXiv:2006.10433 [quant-ph].
- [45] S. Sim, P. D. Johnson, and A. Aspuru - Guzik, *Expressibility and entangling capability of parameterized quantum circuits for hybrid quantum - classical algorithms*, *Advanced Quantum Technologies* **2** (Oct, 2019) 1900070.
- [46] K. Nakaji and N. Yamamoto, *Expressibility of the alternating layered ansatz for quantum*

- computation, *Quantum* **5** (Apr, 2021) 434.
- [47] Y. Du, Z. Tu, X. Yuan, and D. Tao, *An efficient measure for the expressivity of variational quantum algorithms*, arXiv:2104.09961 [quant-ph].
- [48] S. Ito, *ルベーク積分入門*. 裳華房, 2017.
- [49] T. Funaki, *確率論*. 朝倉書店, 2004.
- [50] K. Takafumi, S. Taiji, T. Ichiro, and I. Sato, *機械学習のための連続最適化*. 講談社, 2016.
- [51] R. Sweke, F. Wilde, J. Meyer, M. Schuld, P. K. Faehrmann, B. Meynard-Piganeau, and J. Eisert, *Stochastic gradient descent for hybrid quantum-classical optimization*, *Quantum* **4** (Aug, 2020) 314.
- [52] J. A. Nelder and R. Mead, *A Simplex Method for Function Minimization*, *The Computer Journal* **7** (01, 1965) 308–313.
- [53] M. J. D. Powell, *A Direct Search Optimization Method That Models the Objective and Constraint Functions by Linear Interpolation*, pp. 51–67. Springer Netherlands, Dordrecht, 1994.
- [54] J. Spall, *Multivariate stochastic approximation using a simultaneous perturbation gradient approximation*, *IEEE Transactions on Automatic Control* **37** (1992) 332–341.
- [55] P. I. Frazier, *A tutorial on bayesian optimization*, arXiv:1807.02811 [stat.ML].
- [56] M. Ostaszewski, E. Grant, and M. Benedetti, *Structure optimization for parameterized quantum circuits*, *Quantum* **5** (Jan, 2021) 391.
- [57] M. Schuld, V. Bergholm, C. Gogolin, J. Izaac, and N. Killoran, *Evaluating analytic gradients on quantum hardware*, *Physical Review A* **99** (Mar, 2019) .
- [58] D. Wierichs, J. Izaac, C. Wang, and C. Y.-Y. Lin, *General parameter-shift rules for quantum gradients*, arXiv:2107.12390 [quant-ph].
- [59] O. Kyriienko and V. E. Elfving, *Generalized quantum circuit differentiation rules*, arXiv:2108.01218 [quant-ph].
- [60] D. P. Kingma and J. Ba, *Adam: A method for stochastic optimization*, arXiv:1412.6980 [cs.LG].
- [61] P. Jordan and E. Wigner, *Über das paulische äquivalenzverbot*, *Zeitschrift für Physik* **47** (1928) 631–651.
- [62] J. T. Seeley, M. J. Richard, and P. J. Love, *The bravyi-kitaev transformation for quantum computation of electronic structure*, *The Journal of Chemical Physics* **137** (Dec, 2012) 224109.
- [63] S. B. Bravyi and A. Y. Kitaev, *Fermionic quantum computation*, *Annals of Physics* **298** (May, 2002) 210–226.
- [64] A. Pesah, M. Cerezo, S. Wang, T. Volkoff, A. T. Sornborger, and P. J. Coles, *Absence of barren plateaus in quantum convolutional neural networks*, *Physical Review X* **11** (Oct, 2021) .

- [65] K. Zhang, M.-H. Hsieh, L. Liu, and D. Tao, *Toward trainability of quantum neural networks*, arXiv:2011.06258 [quant-ph].
- [66] E. Grant, L. Wossnig, M. Ostaszewski, and M. Benedetti, *An initialization strategy for addressing barren plateaus in parametrized quantum circuits*, *Quantum* **3** (Dec, 2019) 214.
- [67] A. Skolik, J. R. McClean, M. Mohseni, P. van der Smagt, and M. Leib, *Layerwise learning for quantum neural networks*, *Quantum Machine Intelligence* **3** (Jan, 2021) .
- [68] H.-Y. Liu, T.-P. Sun, Y.-C. Wu, Y.-J. Han, and G.-P. Guo, *A parameter initialization method for variational quantum algorithms to mitigate barren plateaus based on transfer learning*, arXiv:2112.10952 [quant-ph].
- [69] A. Wu, G. Li, Y. Ding, and Y. Xie, *Mitigating noise-induced gradient vanishing in variational quantum algorithm training*, arXiv:2111.13209 [quant-ph].
- [70] S. H. Sack, R. A. Medina, A. A. Michailidis, R. Kueng, and M. Serbyn, *Avoiding barren plateaus using classical shadows*, arXiv:2201.08194 [quant-ph].
- [71] T. Volkoff and P. J. Coles, *Large gradients via correlation in random parameterized quantum circuits*, *Quantum Science and Technology* **6** (Jan, 2021) 025008.
- [72] A. Andrew, H. Zoë, M. Cerezo, and P. J. Coles, *Equivalence of quantum barren plateaus to cost concentration and narrow gorges*, arXiv:2104.05868 [quant-ph].
- [73] E. A. Martinez, C. A. Muschik, P. Schindler, D. Nigg, A. Erhard, M. Heyl, P. Hauke, M. Dalmonte, T. Monz, P. Zoller, and et al., *Real-time dynamics of lattice gauge theories with a few-qubit quantum computer*, *Nature* **534** (Jun, 2016) 516–519.
- [74] P. Hauke, D. Marcos, M. Dalmonte, and P. Zoller, *Quantum simulation of a lattice schwinger model in a chain of trapped ions*, *Physical Review X* **3** (Nov, 2013) .
- [75] N. Klco, E. F. Dumitrescu, A. J. McCaskey, T. D. Morris, R. C. Pooser, M. Sanz, E. Solano, P. Lougovski, and M. J. Savage, *Quantum-classical computation of schwinger model dynamics using quantum computers*, *Physical Review A* **98** (Sep, 2018) .
- [76] A. F. Shaw, P. Lougovski, J. R. Stryker, and N. Wiebe, *Quantum algorithms for simulating the lattice schwinger model*, *Quantum* **4** (Aug, 2020) 306.
- [77] M. Honda, E. Itou, Y. Kikuchi, L. Nagano, and T. Okuda, *Digital quantum simulation for screening and confinement in gauge theory with a topological term*, arXiv:2105.03276 [hep-lat].
- [78] A. M. Childs, Y. Su, M. C. Tran, N. Wiebe, and S. Zhu, *Theory of trotter error with commutator scaling*, *Physical Review X* **11** (Feb, 2021) .
- [79] T. Alexander, N. Kanazawa, D. J. Egger, L. Capelluto, C. J. Wood, A. Javadi-Abhari, and D. C McKay, *Qiskit pulse: programming quantum computers through the cloud with pulses*,

- Quantum Science and Technology* **5** (Aug, 2020) 044006.
- [80] Y. L. Luke, ed., vol. 53 of *Mathematics in Science and Engineering*. Elsevier, 1969.
- [81] J. Watrous, *The Theory of Quantum Information*. Cambridge University Press, 2018.
- [82] J. Gleason, *Existence and uniqueness of haar measure*, 2010.
<http://www.math.uchicago.edu/~may/VIGRE/VIGRE2010/REUPapers/Gleason.pdf>.
- [83] F. Hiai and D. Petz, *The semicircle law, free random variables and entropy*. No. 77. American Mathematical Soc., 2000.
- [84] Z. Puchała and J. Miszczyk, *Symbolic integration with respect to the haar measure on the unitary groups*, *Bulletin of the Polish Academy of Sciences Technical Sciences* **65** (Feb, 2017) 21–27.
- [85] A. Ambainis and J. Emerson, *Quantum t -designs: t -wise independence in the quantum world*, arXiv:quant-ph/0701126.
- [86] F. G. S. L. Brandao, A. W. Harrow, and M. Horodecki, *Local random quantum circuits are approximate polynomial-designs*, *Communications in Mathematical Physics* **346** (Aug, 2016) 397–434.
- [87] O. D. Matteo, *A short introduction to unitary 2-designs*,
http://glassnotes.github.io/OliviaDiMatteo_Unitary2Designs.pdf.
- [88] E. Magesan, J. M. Gambetta, and J. Emerson, *Scalable and robust randomized benchmarking of quantum processes*, *Physical Review Letters* **106** (May, 2011) .
- [89] M. Kliesch and I. Roth, *Theory of quantum system certification*, *PRX Quantum* **2** (Jan, 2021) .
- [90] D. Aharonov, A. Kitaev, and N. Nisan, *Quantum circuits with mixed states*, in *Proceedings of the thirtieth annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 20–30. 1998.
- [91] A. Y. Kitaev, A. Shen, M. N. Vyalyi, and M. N. Vyalyi, *Classical and quantum computation*. No. 47. American Mathematical Soc., 2002.

付録 A

測度と確率

A.1 では、確率論を論じるのに必要不可欠な測度という概念について述べる。A.2 では、測度の特別な場合として確率を定義し、確率変数や分布といった概念について述べる。A.3 では、量子状態全体が成す空間の一様分布に対応する概念について述べる。A.4 では、ユニタリ群上の一様分布に対応する概念について述べる。

A.1 測度論

測度とは集合の面積に他ならない。測度が定義されると、自然に積分を定義することができる。以下、測度の定義から、いかにして積分が定義されるかを述べていく。

まず、測度、つまり面積を定義することのできる集合の集まりを定義する。

定義 A.1 (σ -加法族 [48]) 集合 X の部分集合から成る集合族 \mathcal{B} が

- (1) $\phi \in \mathcal{B}$,
- (2) $E \in \mathcal{B}$ ならば $E^c \in \mathcal{B}$,
- (3) $E_n \in \mathcal{B}$ ($n = 1, 2, \dots$) ならば

$$\bigcup_{n=1}^{\infty} E_n \in \mathcal{B} \tag{A.1}$$

を満たすとき、 \mathcal{B} を σ -加法族といい、 (X, \mathcal{B}) を可測空間という。

σ -加法族のなかで、特に確率論においてよく用いられる集合族を定義する。

定義 A.2 (ボレル集合族 [49]) 位相空間 S の開集合系 \mathcal{O} を含む最小の σ -加法族をボレル集合族といい $\mathcal{B}(S)$ と書く。

σ -加法族の集合に対して、測度を定義する。

定義 A.3 (測度 [48]) 空間 X と X の部分集合から成る σ -加法族 \mathcal{B} があって、 $\mu: \mathcal{B} \rightarrow \mathbb{R}_+ \cup \infty$ が

$$(1) \mu(\phi) = 0$$

(2) $E_n \in \mathcal{B}$ ($n = 1, 2, \dots$), $E_j \cap E_k = \phi$ ($j \neq k$) ならば

$$\mu\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} E_n\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mu(E_n) \quad (\text{A.2})$$

を満たすとき, μ を (X, \mathcal{B}) 上の測度といい, (X, \mathcal{B}, μ) を測度空間という.

こうして, 測度を定義することができた. 次に, 積分を定義していく.

積分を定義する上で, 重要な役割を果たす単関数と可測関数を定義する.

定義 A.4 (単関数 [48]) 可測空間 (X, \mathcal{B}) として, $E \in \mathcal{B}$ 上で定義された関数 $f : E \rightarrow \mathbb{R} \cup \pm\infty$ が, 集合 $E = E_1 + E_2 + \dots + E_n$, $\alpha_i \in \mathbb{R}$, $\alpha_j \neq \alpha_k$ ($j \neq k$) を用いて

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i 1_{E_i}(x) \quad (\text{A.3})$$

とかけるとき, f を単関数という. ここで, $1_A(x)$ は,

$$1_A(x) = \begin{cases} 1 & (x \in A) \\ 0 & (x \notin A) \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

とした.

定義 A.5 (可測関数 [48]) 可測空間 (X, \mathcal{B}) として, $E \in \mathcal{B}$ 上で定義された関数 $f : E \rightarrow \mathbb{R} \cup \pm\infty$ が, 任意の実数 a に対して,

$$\{x \in E \mid f(x) < a\} \in \mathcal{B} \quad (\text{A.5})$$

を満たすとき, f を \mathcal{B} -可測関数という.

次の定理で述べるように, 可測関数は単関数を用いて近似することができる.

定理 A.6 ([48]) 可測空間 (X, \mathcal{B}) として, $E \in \mathcal{B}$ 上で定義された \mathcal{B} -可測関数 $f : E \rightarrow \mathbb{R}_+$ に対して, E 上 \mathcal{B} -可測な非負単関数の単調増加列 $\{f_n(x)\}$ で $f(x)$ に E の各点で各点収束するものが存在する.

[証明]

$$f_n(x) = \begin{cases} \frac{k-1}{2^n} & (x \in \{x \in E \mid \frac{k-1}{2^n} \leq f(x) < \frac{k}{2^n}\}, k = 1, 2, 3, \dots, n2^n) \\ n & (x \in \{x \in E \mid f(x) \geq n\}) \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

とすれば良い. ■

さて, 実数値関数に対して, 積分を定義する.

定義 A.7 (実数値関数の積分 [48]) 測度空間 (X, \mathcal{B}, μ) として, $E \in \mathcal{B}$ 上で \mathcal{B} -可測な実数値関数 f に対して, 測度 μ に関する積分を以下のように定義する.

(1) $f(x)$ が非負単関数のとき

$f(x)$ は,

$$f(x) = \sum_{j=0}^n \alpha_j 1_{E_j}(x), \text{ ただし } \begin{cases} E = E_0 + E_1 + \cdots + E_n \\ 0 = \alpha_0 < \alpha_j \ (j = 1, 2, \dots, n) \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

とかける. このとき, 測度 μ に関する f の積分を

$$\int_E \mu(dx) f(x) = \sum_{j=1}^n \alpha_j \mu(E_j) \quad (\text{A.8})$$

と定義する.

(2) $f(x)$ が \mathcal{B} -可測な非負関数のとき

定理 A.6 より, 非負単関数の単調増加列で $f(x)$ に E の各点で各点収束する $\{f_n(x)\}$ が存在する. このとき, 測度 μ に関する f の積分を

$$\int_E \mu(dx) f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_E \mu(dx) f_n(x) \quad (\text{A.9})$$

と定義する.

(3) $f(x)$ が \mathcal{B} -可測な実数値関数のとき

$$f^+(x) = \max\{f(x), 0\}, \quad f^-(x) = \max\{-f(x), 0\} \quad (\text{A.10})$$

とすると,

$$f(x) = f^+(x) - f^-(x), \quad f^+(x) \geq 0, \quad f^-(x) \geq 0 \quad (\text{A.11})$$

とかける. このとき,

$$\int_E \mu(dx) f^+(x), \quad \int_E \mu(dx) f^-(x) \quad (\text{A.12})$$

の少なくとも一方が有限のときに限り, 測度 μ に関する f の積分を

$$\int_E \mu(dx) f(x) = \int_E \mu(dx) f^+(x) - \int_E \mu(dx) f^-(x) \quad (\text{A.13})$$

で定義する.

積分値が有限な関数を可積分という.

定義 A.8 (可積分 [48]) 測度空間 (X, \mathcal{B}, μ) として, $E \in \mathcal{B}$ 上で \mathcal{B} -可測な実数値関数 f が,

$$\int_E \mu(dx) f(x) < \infty \quad (\text{A.14})$$

を満たすとき, f は E 上で μ -可積分という.

実部と虚部が可積分である複素数値関数に対して, 積分を次のように定義する.

定義 A.9 (複素数値関数の積分 [48]) 測度空間 (X, \mathcal{B}, μ) として, $E \in \mathcal{B}$ 上の複素数値関数 f に対して, $\Re f$ と $\Im f$ がともに E 上可積分のときに限り, 測度 μ に関する f の積分を

$$\int_E \mu(dx) f(x) = \int_E \mu(dx) \Re f(x) + i \int_E \mu(dx) \Im f(x) \quad (\text{A.15})$$

で定義する.

こうして, 積分を定義することができた.

A.2 確率論

集合全体の測度が 1 となるような測度を確率測度という.

定義 A.10 (確率測度 [49]) 可測空間 (Ω, \mathcal{F}) として, $P: \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ が

- (1) $P(\Omega) = 1$
- (2) $E_n \in \mathcal{B}$ ($n = 1, 2, \dots$), $E_j \cap E_k = \emptyset$ ($j \neq k$) ならば

$$P\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} E_n\right) = \sum_{i=1}^{\infty} P(E_n) \quad (\text{A.16})$$

を満たすとき, P を (Ω, \mathcal{F}) 上の確率測度といい, (Ω, \mathcal{F}, P) を確率空間という.

確率変数を定義する.

定義 A.11 (確率変数 [49]) 確率空間 (Ω, \mathcal{F}, P) , 可測空間 (S, \mathcal{S}) として, $X: \Omega \rightarrow S$ が可測写像, つまり任意の $A \in \mathcal{S}$ に対して, $X^{-1}(A) \in \mathcal{F}$ であるとき, X を S -値確率変数という.

確率変数の分布を定義する.

定義 A.12 (分布 [49]) S -値確率変数 X の分布とは, 任意の $A \in \mathcal{S}$ に対して,

$$P_X(A) = P(X^{-1}(A)) \quad (\text{A.17})$$

によって定義される (S, \mathcal{S}) 上の確率測度のことをいう.

確率変数の期待値と分散を定義する.

定義 A.13 (期待値 [49]) 確率空間 (Ω, \mathcal{F}, P) として, P -可積分な確率変数 X の期待値 $\mathbb{E}[X]$ を

$$\mathbb{E}[X] = \int_{\Omega} P(d\omega)X(\omega) \quad (\text{A.18})$$

と定義する.

定義 A.14 (分散 [49]) 確率空間 (Ω, \mathcal{F}, P) として, 確率変数 X が $E[X^2] < \infty$ を満たすとき, X の分散 $\mathbb{V}[X]$ を

$$\mathbb{V}[X] = \mathbb{E}[(X - E[X])^2] \quad (\text{A.19})$$

で定義する.

本論文で何度も用いたチェビシエフの不等式を示しておく.

補題 A.15 (チェビシエフの不等式 [49]) (Ω, \mathcal{F}, P) を確率空間, \mathbb{R} 上で定義された非負 $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ -可測関数 ψ とし, $\inf_{x \in A} \psi(x) > 0$ を満たす任意の $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に対して,

$$P(X \in A) := P(\{\omega \in \Omega \mid X(\omega) \in A\}) \leq \frac{E[\psi(X)]}{\inf_{x \in A} \psi(x)}. \quad (\text{A.20})$$

特に, $\psi(x) = |x|^p$ ($p > 0$), $A = \{|x| \geq \epsilon\}$ ($\epsilon > 0$) とすれば,

$$P(|X| \geq \epsilon) \leq \frac{1}{\epsilon^p} E[|X|^p]. \quad (\text{A.21})$$

[証明]

$$\begin{aligned} P(X \in A) &= \int_A P_X(dx) = \frac{1}{\inf_{x \in A} \psi(x)} \int_A P_X(dx) \inf_{x \in A} \psi(x) \\ &\leq \frac{1}{\inf_{x \in A} \psi(x)} \int_A P_X(dx) \psi(x) \\ &\leq \frac{1}{\inf_{x \in A} \psi(x)} \int_{\Omega} P_X(dx) \psi(x) = \frac{E[\psi(X)]}{\inf_{x \in A} \psi(x)}. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

■

A.3 一様球面測度

球面 $CS^{d-1} := \{x \in \mathbb{C}^d \mid \|x\| = 1\}$ 上の一様分布に対応する測度, つまり \mathbb{C}^d 上の量子状態を一様に分布させるような測度を定義する.

定義 A.16 (球面上の一様確率測度) 任意の $B \in \mathcal{B}(CS^{d-1})$ と任意の $U \in \mathcal{U}(d)$ に対して,

$$\eta_S(UB) = \eta_S(B) \quad (\text{A.23})$$

$$\eta_S(CS^{d-1}) = 1 \quad (\text{A.24})$$

を満たす確率測度 $\eta_S : \mathcal{B}(CS^{d-1}) \rightarrow [0, 1]$ を CS^{d-1} 上の一様球面測度 (uniform spherical measure) という.

CS^{d-1} 上の一様球面測度は, 正規分布から構成的に定義することもできる [81].

一様球面測度に関する積分については, 以下に述べるユニタリ不変性が成り立つ.

命題 A.17 任意の $U \in \mathcal{U}(d)$ と任意の可積分関数 $f : CS^{d-1} \rightarrow \mathbb{C}$ に対して,

$$\int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) f(|\psi\rangle) = \int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) f(U|\psi\rangle). \quad (\text{A.25})$$

[証明] (A.23) と積分の定義から示される. ■

A.4 ユニタリ群上のハール測度

一般に, コンパクト群には, ハール測度と呼ばれる, コンパクト群上の一様分布に対応する測度が存在することを述べておく.

定義 A.18 (正則ボレル測度 [82]) (X, \mathcal{B}, μ) を測度空間とする. このとき, 測度 μ が

- 任意のコンパクト集合 $K \subset X$ に対して $\mu(K) < \infty$.
- 任意のボレル集合 $B \in \mathcal{B}$ に対して,

$$\mu(B) = \inf \{ \mu(O) \mid B \subset O, O \text{ は開集合} \}. \quad (\text{A.26})$$

- 任意の開集合 $O \subset X$ に対して,

$$\mu(O) = \sup \{ \mu(K) \mid K \subset O, K \text{ はコンパクト} \}. \quad (\text{A.27})$$

を満たすとき, μ を正則ボレル測度という.

定義 A.19 (左不変ハール測度, 右不変ハール測度, ハール測度 [82]) G を位相群とする. 任意の $g \in G$ と任意の可測集合 B に対して,

$$\mu(gB) = \mu(B) \quad (\text{A.28})$$

を満たす G 上の非自明な正則ボレル測度を左不変ハール測度という. また, 任意の $g \in G$ と任意の可測集合 B に対して,

$$\mu(Bg) = \mu(B) \quad (\text{A.29})$$

を満たす G 上の非自明な正則ボレル測度を右不変ハール測度という。特に、左不変かつ右不変なハール測度を単にハール測度という。

定理 A.20 ([82]) G をコンパクト群とする。 G 上に正の定数倍を除いて一意にハール測度が存在する。

ユニタリ群 $U(d)$ はコンパクトなので、定理 A.20 より、 $U(d)$ 上に $\mu_H(U(d)) = 1$ を満たすハール測度 μ_H が存在する。ここで、 μ_H は確率測度である。

ハール測度に関する積分については、以下に述べる両側不変性が成り立つ。

命題 A.21 任意の $U \in U(d)$ と任意の可積分関数 $f: U(d) \rightarrow \mathbb{C}$ に対して、

$$\int_{U(d)} \mu_H(dV) f(V) = \int_{U(d)} \mu_H(dV) f(UV) = \int_{U(d)} \mu_H(dV) f(VU). \quad (\text{A.30})$$

[証明] 定理 A.20 と積分の定義から示される。 ■

CS^{d-1} 上の一様球面測度とユニタリ群 $U(d)$ 上のハール測度との間には、以下のような関係が成立する。

命題 A.22 (一様球面測度とユニタリ群上のハール測度の関係) η_S を CS^{d-1} 上の一様球面測度、 μ_H を $U(d)$ 上のハール測度とする。このとき、任意の $|\phi\rangle \in CS^{d-1}$ と任意の可積分関数 $f: CS^{d-1} \rightarrow \mathbb{C}$ に対して、

$$\int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) f(|\psi\rangle) = \int_{U(d)} \mu_H(dU) f(U|\phi\rangle). \quad (\text{A.31})$$

[証明] まず、任意の $V \in U(d)$ として、

$$\int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) f(|\psi\rangle) = \int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) f(V|\psi\rangle) \quad (\text{A.32})$$

$$= \int_{U(d)} \mu_H(dU) \int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) f(V|\psi\rangle) \quad (\text{A.33})$$

$$= \int_{U(d)} \mu_H(dU) \int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) f(UV|\psi\rangle) \quad (\text{A.34})$$

$$= \int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) \int_{U(d)} \mu_H(dU) f(UV|\psi\rangle) \quad (\text{A.35})$$

$$= \int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) \int_{U(d)} \mu_H(dU) f(U|\psi\rangle). \quad (\text{A.36})$$

第 1 行目で η_S の定義、第 3 行目で命題 A.21、第 4 行目でフビニの定理、第 5 行目で再び命題 A.21 を用いた。また、命題 A.21 より、任意の $V \in U(d)$ と任意の $|\psi\rangle \in CS^{d-1}$ に対して、

$$\int_{U(d)} \mu_H(dU) f(U|\psi\rangle) = \int_{U(d)} \mu_H(dU) f(UV|\psi\rangle). \quad (\text{A.37})$$

$V \in U(d)$, $|\psi\rangle \in CS^{d-1}$ は任意なので、任意の $|\phi\rangle \in CS^{d-1}$ に対して、

$$\int_{U(d)} \mu_H(dU) f(U|\psi\rangle) = \int_{U(d)} \mu_H(dU) f(U|\phi\rangle). \quad (\text{A.38})$$

以上より,

$$\int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi) f(|\psi\rangle) = \int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi) \int_{\mathcal{U}(d)} \mu_H(dU) f(U|\phi) = \int_{\mathcal{U}(d)} \mu_H(dU) f(U|\phi). \quad (\text{A.39})$$

■

付録 B

ユニタリ群上のハール測度による積分公式

本章では、ユニタリ群上のハール測度に関する積分公式をまとめておく。

まず、命題 A.21 とユニタリ群の性質を用いて、次の定理が導かれる。証明は、[83] が詳しい。

定理 B.1 ([84])

$$\int_{\mathcal{U}(d)} \mu_H(dU) U_{i_1 j_1} U_{i'_1 j'_1}^* = \frac{\delta_{i_1 i'_1} \delta_{j_1 j'_1}}{d} \quad (\text{B.1})$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{U}(d)} \mu_H(dU) U_{i_1 j_1} U_{i_2 j_2} U_{i'_1 j'_1}^* U_{i'_2 j'_2}^* &= \frac{1}{d^2 - 1} (\delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} \delta_{j_1 j'_1} \delta_{j_2 j'_2} + \delta_{i_1 i'_2} \delta_{i_2 i'_1} \delta_{j_1 j'_2} \delta_{j_2 j'_1}) \\ &\quad - \frac{1}{d(d^2 - 1)} (\delta_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} \delta_{j_1 j'_2} \delta_{j_2 j'_1} + \delta_{i_1 i'_2} \delta_{i_2 i'_1} \delta_{j_1 j'_1} \delta_{j_2 j'_2}). \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

定理 B.1 より、次の公式たちが即座に導かれる。

公式 B.2 ([26])

$$\int_{\mathcal{U}(d)} \mu_H(dU) \text{Tr}[UAU^\dagger B] = \frac{\text{Tr}[A] \text{Tr}[B]}{d} \quad (\text{B.3})$$

[証明] 定理 B.1 より導かれる。 ■

公式 B.3 ([26])

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{U}(d)} \mu_H(dU) \text{Tr}[UAU^\dagger BUCU^\dagger D] &= \frac{1}{d^2 - 1} (\text{Tr}[A] \text{Tr}[C] \text{Tr}[BD] + \text{Tr}[AC] \text{Tr}[B] \text{Tr}[D]) \\ &\quad - \frac{1}{d(d^2 - 1)} (\text{Tr}[AC] \text{Tr}[BD] + \text{Tr}[A] \text{Tr}[B] \text{Tr}[C] \text{Tr}[D]). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{U}(d)} \mu_H(dU) \text{Tr}[UAU^\dagger B] \text{Tr}[UCU^\dagger D] &= \frac{1}{d^2 - 1} (\text{Tr}[A] \text{Tr}[B] \text{Tr}[C] \text{Tr}[D] + \text{Tr}[AC] \text{Tr}[BD]) \\ &\quad - \frac{1}{d(d^2 - 1)} (\text{Tr}[AC] \text{Tr}[B] \text{Tr}[D] + \text{Tr}[A] \text{Tr}[C] \text{Tr}[BD]). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

[証明] 定理 B.1 より導かれる. ■

公式 B.4 ([39])

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{U}(d)} \mu_{\mathcal{H}}(dU) \operatorname{Tr} [AU^{\otimes 2}BU^{\dagger \otimes 2}] &= \frac{1}{d^2-1} (\operatorname{Tr} [A] \operatorname{Tr} [B] + \operatorname{Tr} [AG] \operatorname{Tr} [BG]) \\ &\quad - \frac{1}{d(d^2-1)} (\operatorname{Tr} [AG] \operatorname{Tr} [B] + \operatorname{Tr} [A] \operatorname{Tr} [BG]). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

ここで, $U \in \mathcal{U}(d)$ が作用する複素内積空間 \mathcal{H} の正規直交基底 $\{|i\rangle\}_{i=1}^{\dim \mathcal{H}}$ に対して, $G \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes 2})$ を,

$$G|i\rangle \otimes |j\rangle = |j\rangle \otimes |i\rangle \quad (\text{B.7})$$

で定義した.

[証明] 定理 B.1 より導かれる. ■

公式 B.5

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{U}(d)} \mu_{\mathcal{H}}(dU_R) \int_{\mathcal{U}(d)} \mu_{\mathcal{H}}(dU_L) \operatorname{Tr} [U_R \rho U_R^\dagger A U_L^\dagger O U_L B] \operatorname{Tr} [U_R \rho U_R^\dagger C U_L^\dagger O U_L D] \\ = \frac{\Delta_d^{(1)}(\rho) \Delta_d^{(1)}(O)}{(d^2-1)^2} \operatorname{Tr} [BA] \operatorname{Tr} [DC] + \frac{\Delta_d^{(1)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \operatorname{Tr} [BAD C] \\ + \frac{\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(1)}(O)}{(d^2-1)^2} \operatorname{Tr} [ABCD] + \frac{\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \operatorname{Tr} [DA] \operatorname{Tr} [BC]. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

ここで,

$$\Delta_d^{(1)}(X) = \operatorname{Tr} [X]^2 - \frac{\operatorname{Tr} [X^2]}{d}, \quad \Delta_d^{(2)}(X) = \operatorname{Tr} [X^2] - \frac{\operatorname{Tr} [X]^2}{d} \quad (\text{B.9})$$

とした.

[証明] 公式 B.3 より導かれる. ■

$X \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^d)$ がエルミートであれば, $\Delta_d^{(2)}(X) \geq 0$ である. なぜなら, X の固有値 $x_1, x_2, \dots, x_d \in \mathbb{R}$ に対して,

$$0 \leq \frac{1}{2d} \sum_{i,j=1}^d (x_i - x_j)^2 = \sum_{i=1}^d x_i^2 - \frac{1}{d} \left(\sum_{i=1}^d x_i \right)^2 = \Delta_d^{(2)}(X) \quad (\text{B.10})$$

であるからである.

付録 C

デザイン

本章では、ユニタリ t -デザイン (unitary t -design) という概念について述べる。加えて、ユニタリ t -デザインと似た概念として、量子 t -デザイン (quantum t -design) という概念について述べる。

C.1 量子 t -デザイン

量子 t -デザインは、次のように定義される。

定義 C.1 (量子 t -デザイン [85]) η_S を CS^{d-1} 上の一様球面測度とする。分布 η を持つ CS^{d-1} -値確率変数 $|\phi\rangle$ が、

$$\int_{CS^{d-1}} \eta(d|\phi\rangle) (|\phi\rangle\langle\phi|)^{\otimes t} = \int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) (|\psi\rangle\langle\psi|)^{\otimes t} \quad (\text{C.1})$$

を満たすとき、 $|\phi\rangle$ が量子 t -デザインであるという。

(C.1) の部分トレースを取ることで、 η が量子 t -デザインならば、 η が量子 $(t-1)$ -デザインであることがわかる。

量子 t -デザインの意味を考える。 $|\phi\rangle$ が量子 t -デザインとする。このとき、任意の物理量 $O \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^d)$ と $t' = 1, 2, \dots, t$ に対して、

$$\int_{CS^{d-1}} \eta(d|\phi\rangle) \langle\phi|O|\phi\rangle^{t'} = \int_{CS^{d-1}} \eta_S(d|\psi\rangle) \langle\psi|O|\psi\rangle^{t'} \quad (\text{C.2})$$

が成り立つ。(C.2) は、分布 η を持つ確率変数 $|\phi\rangle$ と分布 η_S を持つ確率変数 $|\psi\rangle$ が、任意の物理量の期待値の t 次までのモーメント全てが等しいことを述べている。もし、分布 η を持つ確率変数 $|\phi'\rangle$ 、分布 η_S を持つ確率変数 $|\psi\rangle$ に対して、任意の物理量の期待値の $t+1$ 次までのモーメント全てが等しいとすると、 $|\phi\rangle$ に比べて $|\phi'\rangle$ の方がより $|\psi\rangle$ に類似していると言えるだろう。したがって、量子 t -デザインの t は、確率変数 $|\psi\rangle$ 、つまり CS^{d-1} 上の“一様分布”に従う確率変数との類似度と理解できよう。

C.2 ユニタリ t - デザイン

ユニタリ t - デザインは、次のように定義される。

定義 C.2 (ユニタリ t - デザイン [86]) μ_{H} を $U(d)$ 上のハール測度とする。分布 μ を持つ $U(d)$ -値確率変数 V が、任意の $\rho \in \mathcal{S}((\mathbb{C}^d)^{\otimes t})$ に対して、

$$\int_{U(d)} \mu(dV) V^{\otimes t} \rho (V^\dagger)^{\otimes t} = \int_{U(d)} \mu_{\text{H}}(dU) U^{\otimes t} \rho (U^\dagger)^{\otimes t} \quad (\text{C.3})$$

を満たすとき、 V はユニタリ t - デザインであるという。

(C.3) において、 $\rho = \rho' \otimes I_{\mathbb{C}^d}$ として、部分トレースを取ることで、 V がユニタリ t - デザインならば、ユニタリ $(t-1)$ - デザインであることがわかる。また、任意の $A \in \mathcal{L}((\mathbb{C}^d)^{\otimes t})$ は、非負の実数 c_0, c_1, c_2, c_3 と、ある $\rho_0, \rho_1, \rho_2, \rho_3 \in \mathcal{S}((\mathbb{C}^d)^{\otimes t})$ を用いて、 $A = \sum_{k=0}^3 i^k c_k \rho_k$ で表せることから、 V がユニタリ t - デザインであることは、任意の $A \in \mathcal{L}((\mathbb{C}^d)^{\otimes t})$ に対して、

$$\int_{U(d)} \mu(dU) U^{\otimes t} A (U^\dagger)^{\otimes t} = \int_{U(d)} \mu_{\text{H}}(dV) V^{\otimes t} A (V^\dagger)^{\otimes t} \quad (\text{C.4})$$

であることと言い換えられる。量子 t - デザインで述べたことと同様に、ユニタリ t - デザインの t は、確率変数 V 、つまり $U(d)$ 上の“一様分布”に従う確率変数との類似度と理解できよう。

ユニタリ 2 - デザインの例について述べる。パウリ群 $\mathcal{P}_n := \left\{ e^{i\theta} \bigotimes_{j=0}^{n-1} \sigma_j \mid \theta \in \{0, 1, 2, 3\}, \sigma_j \in \{I, X, Y, Z\} \right\}$ として、クリフォード群 $\mathcal{C}_n := \{U \in U(2^n) \mid U \mathcal{P}_n U^\dagger = \mathcal{P}_n\}$ とする。クリフォード群上の一様分布に従う $U(2^n)$ -値確率変数は、ユニタリ 2 - デザインである [87]。すなわち、クリフォード群 $\mathcal{C}_n = \{C_1, C_2, \dots, C_{|\mathcal{C}_n}|\}$ とすると、任意の $\rho \in \mathcal{S}(\mathbb{C}^{2^n} \otimes \mathbb{C}^{2^n})$ に対して、

$$\frac{1}{|\mathcal{C}_n|} \sum_{i=1}^{|\mathcal{C}_n|} C_i^{\otimes 2} \rho (C_i^\dagger)^{\otimes 2} = \int_{U(2^n)} \mu_{\text{H}}(dU) U^{\otimes 2} \rho (U^\dagger)^{\otimes 2} \quad (\text{C.5})$$

が成り立つ。(C.5) は、Randomized benchmarking という、実験的に量子ビットへのエラーを推定するプロトコルを実現する上で重要な役割を果たす [88]。

付録 D

演算子ノルム

$\mathcal{H}, \mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ は、有限次元の複素内積空間とする。

D.1 シャッテンノルム p - ノルム

線型演算子 $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ に対して、ノルムを定義する。

定義 D.1 (シャッテン p - ノルム [81]) $p \in [1, \infty]$ として、 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して、シャッテン p - ノルムを、

$$\|A\|_p := \begin{cases} \left[\operatorname{Tr} \sqrt{A^\dagger A}^p \right]^{\frac{1}{p}} & (p < \infty) \\ \sup_{x \in \mathcal{H}, \|x\| \leq 1} \|Ax\| & (p = \infty) \end{cases} \quad (\text{D.1})$$

で定義する。

特に、 $\|A\|_\infty$ は、 $\sqrt{A^\dagger A}$ の最大固有値に等しい [40]。

本論文で用いたシャッテン p - ノルムに関する重要な性質を以下にまとめておく。

命題 D.2 ([81]) $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ とする。

- (1) $1 \leq p \leq q \leq \infty$ ならば、 $\|A\|_p \geq \|A\|_q$.
- (2) $p \in [1, \infty]$ とし、 $U, V \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ をユニタリとすると、 $\|A\|_p = \|UAV^\dagger\|_p$.
- (3) $\|A\|_p = \|A^\top\|_p = \|A^\dagger\|_p = \|A^*\|_p$.
- (4) $p, q \in [1, \infty]$ が、 $1/p + 1/q = 1$ を満たすならば、 $|\operatorname{Tr} [B^\dagger A]| \leq \|A\|_p \|B\|_q$.
- (5) $\|AB\|_p \leq \|A\|_p \|B\|_p$.

D.2 ダイヤモンドノルム

D.1 では、線型演算子 $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ についてノルムを定義した。ここでは、線型演算子 $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ に対して、ノルムを定義する。

まず, $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ に対するトレースノルムとのアナロジーで, 線型演算子 $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ に対してノルムを定義する.

定義 D.3 ((1 → 1) - ノルム [89]) 線型演算子 $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ に対して, (1 → 1)-ノルムを

$$\|\mathcal{E}\|_{1 \rightarrow 1} := \sup_{\|A\|_1 \leq 1} \|\mathcal{E}(A)\|_1 \quad (\text{D.2})$$

で定義する.

ここで, 2つの量子的な操作, つまり CPTP 写像 $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ の差を定量化することを考えよう. この差は, 注目している系と相互作用していない n 準位系 \mathbb{C}^n に依らないで欲しい. つまり, \mathcal{E}_1 と \mathcal{E}_2 との差は, $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)}$ と $\mathcal{E}_2 \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)}$ との差は等しくあって欲しい. しかしながら, 必ずしも $\|\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2\|_{1 \rightarrow 1}$ と $\|\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)} - \mathcal{E}_2 \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)}\|_{1 \rightarrow 1}$ は等しくない [90, 91]. そこで, \mathcal{E}_1 と \mathcal{E}_2 との差が, $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)}$ と $\mathcal{E}_2 \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)}$ との差に等しくなるようなノルムを定義する.

定義 D.4 (ダイヤモンドノルム [89, 90]) 線型演算子 $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ に対して, ダイヤモンドノルムを,

$$\|\mathcal{E}\|_{\diamond} := \sup_{n \in \mathbb{N}} \|\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)}\|_{1 \rightarrow 1} \quad (\text{D.3})$$

で定義する.

ここで, $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ として, 定義 D.1 より, 任意の 0 でない $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$ に対して,

$$\|\mathcal{E}\|_{\diamond} \geq \|\mathcal{E}\|_{1 \rightarrow 1} = \sup_{\|B\|_1 \leq 1} \|\mathcal{E}(B)\|_1 \geq \frac{\|\mathcal{E}(A)\|_1}{\|A\|_1} \quad (\text{D.4})$$

が成立する. よって, 任意の $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1)$ に対して,

$$\|\mathcal{E}\|_{\diamond} \|A\|_1 \geq \|\mathcal{E}(A)\|_1 \quad (\text{D.5})$$

が成立する.

ダイヤモンドノルムについて, 以下の重要な定理が成立する.

定理 D.5 ([81]) 線型演算子 $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ とする. このとき, $n \geq \dim \mathcal{H}_1$ ならば,

$$\|\mathcal{E}\|_{\diamond} = \|\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)}\|_{1 \rightarrow 1}. \quad (\text{D.6})$$

定理 D.5 より, 任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して,

$$\|\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)}\|_{\diamond} = \|\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)} \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^{\dim \mathcal{H}_1})}\|_{1 \rightarrow 1} = \|\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^{n \dim \mathcal{H}_1})}\|_{1 \rightarrow 1} = \|\mathcal{E}\|_{\diamond} \quad (\text{D.7})$$

が成り立つ. よって, 2つの CPTP 写像 $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2: \mathcal{L}(\mathcal{H}_1) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ に対して,

$$\|\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2\|_{\diamond} = \|\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)} - \mathcal{E}_2 \otimes \mathcal{I}_{\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)}\|_{\diamond} \quad (\text{D.8})$$

が成り立ち, 望んでいた性質をダイヤモンドノルムが満たしてくれることがわかった.

付録 E

第 3 章の補足

E.1 (3.24) の導出

\mathcal{H} を $d = 2^n$ 次元複素内積空間とする。まず、パウリ基底に関する補題を示す。

補題 E.1 $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ の基底としてパウリ基底 $\left\{ M_{\alpha} := (\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}) = \bigotimes_{i=0}^{n-1} \sigma_{\alpha_i} \right\}_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n}$ を考える。このとき、

$$\sum_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n} M_{\alpha} M_{\beta} M_{\alpha}^{\dagger} = \begin{cases} d^2 I & (\beta = \mathbf{0}) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (\text{E.1})$$

が成り立つ。

[証明] $\beta = \mathbf{0}$ のときは明らか。 $\beta \neq \mathbf{0}$ とすると、 $\beta_i \neq 0$ なる i が存在し、

$$\sum_{\alpha_i=0}^3 \sigma_{\alpha_i} \sigma_{\beta_i} \sigma_{\alpha_i}^{\dagger} = 0$$

であるから、

$$\sum_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n} M_{\alpha} M_{\beta} M_{\alpha}^{\dagger} = \left(\sum_{\alpha_0=0}^3 \sigma_{\alpha_0} \sigma_{\beta_0} \sigma_{\alpha_0}^{\dagger} \right) \otimes \cdots \otimes \left(\sum_{\alpha_i=0}^3 \sigma_{\alpha_i} \sigma_{\beta_i} \sigma_{\alpha_i}^{\dagger} \right) \otimes \cdots \otimes \left(\sum_{\alpha_{n-1}=0}^3 \sigma_{\alpha_{n-1}} \sigma_{\beta_{n-1}} \sigma_{\alpha_{n-1}}^{\dagger} \right) = 0$$

が成り立つ。 ■

さて、(3.24) を示そう。 $A \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^d)$ は、 $(c_{\alpha})_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n}$ を用いて、

$$A = \sum_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n} c_{\alpha} M_{\alpha} \quad (\text{E.2})$$

と展開できる。すると、

$$\text{Tr}[A] = \sum_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n} c_{\alpha} \text{Tr}[M_{\alpha}] = c_0 d \quad (\text{E.3})$$

が成り立つ。一方、補題 E.1 より、

$$\sum_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n} M_\alpha A M_\alpha^\dagger = \sum_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n} \sum_{\beta \in \{0,1,2,3\}^n} c_\beta M_\alpha M_\beta M_\alpha^\dagger = c_0 d^2 I \quad (\text{E.4})$$

が成り立つ。ゆえに、

$$\sum_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n} M_\alpha A M_\alpha^\dagger = d \operatorname{Tr}[A] I \quad (\text{E.5})$$

が成り立つ。したがって、

$$\mathcal{D}_p(A) = \frac{(1-p) \operatorname{Tr}[A]}{d} I + pA \quad (\text{E.6})$$

$$= \frac{1-p}{d^2} \left(\sum_{\alpha \in \{0,1,2,3\}^n} M_\alpha A M_\alpha^\dagger \right) + p M_0 A M_0^\dagger \quad (\text{E.7})$$

$$= \left(p + \frac{1-p}{d^2} \right) M_0 A M_0^\dagger + \frac{1-p}{d^2} \sum_{\alpha \neq 0} M_\alpha A M_\alpha^\dagger \quad (\text{E.8})$$

が成り立つ。したがって、分極解消チャンネルの演算要素は、

$$\left\{ \sqrt{p + \frac{1-p}{d^2}} M_0 \right\} \cup \left\{ \frac{\sqrt{1-p}}{d} M_\alpha \right\}_{\alpha \neq 0} \quad (\text{E.9})$$

となる。

E.2 (3.26) の導出

$$\mathcal{N}(A) = \mathcal{D}_{N_g} \circ \mathcal{U}_{N_g} \circ \cdots \circ \mathcal{D}_1 \circ \mathcal{U}_1(A) \quad (\text{E.10})$$

$$= \mathcal{D}_{N_g} \circ \mathcal{U}_{N_g} \circ \cdots \circ \mathcal{U}_2 \circ \mathcal{D}_1 \left(U_1 A U_1^\dagger \right) \quad (\text{E.11})$$

$$= \mathcal{D}_{N_g} \circ \mathcal{U}_{N_g} \circ \cdots \circ \mathcal{D}_2 \circ \mathcal{U}_2 \left(p_1 U_1 A U_1^\dagger + \frac{\operatorname{Tr}[A](1-p_1)}{2^n} I_{\mathcal{H}} \right) \quad (\text{E.12})$$

$$= \mathcal{D}_{N_g} \circ \mathcal{U}_{N_g} \circ \cdots \circ \mathcal{D}_3 \circ \mathcal{U}_3 \left(p_1 p_2 U_2 U_1 A U_1^\dagger U_2^\dagger + \frac{\operatorname{Tr}[A](1-p_1 p_2)}{2^n} I_{\mathcal{H}} \right) \quad (\text{E.13})$$

$$\vdots \quad (\text{E.14})$$

$$= p_1 p_2 \cdots p_{N_g} \left(\bigcirc_{j=1}^{N_g} \mathcal{U}_j(A) \right) + \frac{\operatorname{Tr}[A](1-p_1 p_2 \cdots p_{N_g})}{2^n} I_{\mathcal{H}} \quad (\text{E.15})$$

$$= p U A U^\dagger + \frac{\operatorname{Tr}[U A U^\dagger](1-p)}{2^n} I_{\mathcal{H}} = \mathcal{D}_p \circ \mathcal{U}(A). \quad (\text{E.16})$$

ここで、 $\mathcal{U}: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \ni A \mapsto U A U^\dagger \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, $p := p_{N_g} \cdots p_2 p_1$ とした。

付録 F

第 4 章の補足

F.1 (4.8) の導出

$X \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して,

$$\left\{ \epsilon_{U(\gamma), \nu}^{(t)}(X) \right\}^2 = \left\| \mathcal{A}_{U(\gamma), \nu}^{(t)}(X^{\otimes t}) \right\|_2^2 \quad (\text{F.1})$$

$$\begin{aligned} &= \text{Tr} \left[\left(\int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dV) V^{\otimes t} (X^\dagger)^{\otimes t} (V^\dagger)^{\otimes t} - \int_{\Gamma} \nu(d\gamma) U(\gamma)^{\otimes t} (X^\dagger)^{\otimes t} (U(\gamma)^\dagger)^{\otimes t} \right) \right. \\ &\quad \left. \left(\int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dW) W^{\otimes t} X^{\otimes t} (W^\dagger)^{\otimes t} - \int_{\Gamma} \nu(d\gamma') U(\gamma')^{\otimes t} X^{\otimes t} (U(\gamma')^\dagger)^{\otimes t} \right) \right] \quad (\text{F.2}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dV) \int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dW) \text{Tr} [V X^\dagger V^\dagger W X W^\dagger]^t \\ &\quad + \int_{\Gamma} \nu(d\gamma) \int_{\Gamma} \nu(d\gamma') \text{Tr} [U(\gamma) X^\dagger U(\gamma)^\dagger U(\gamma') X U(\gamma')^\dagger]^t \\ &\quad - \int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dV) \int_{\Gamma} \nu(d\gamma') \text{Tr} [U(\gamma') X U(\gamma')^\dagger V X^\dagger V^\dagger]^t \\ &\quad - \int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dW) \int_{\Gamma} \nu(d\gamma) \text{Tr} [U(\gamma) X^\dagger U(\gamma)^\dagger W X W^\dagger]^t \quad (\text{F.3}) \end{aligned}$$

$$= \int_{\Gamma} \nu(d\gamma) \int_{\Gamma} \nu(d\gamma') \text{Tr} [X U(\gamma')^\dagger U(\gamma) X^\dagger U(\gamma)^\dagger U(\gamma')]^t - \int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dW) \text{Tr} [X W^\dagger X^\dagger W]^t \quad (\text{F.4})$$

$$= \mathcal{F}_{U(\gamma), \nu}^{(t)}(X) - \mathcal{F}_{\text{H}}^{(t)}(X). \quad (\text{F.5})$$

より, (4.8) を得る. ここで, 3 行目から 4 行目において命題 A.21 を用いた.

特に, 純粋状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ として, $X = |\psi\rangle \langle \psi|$ のとき, 等号成立は,

$$\left\| \mathcal{A}_{U(\gamma), \nu}^{(t)}(|\psi\rangle \langle \psi|)^{\otimes t} \right\|_2^2 = 0 \quad (\text{F.6})$$

$$\iff \int_{\mathcal{U}(2^n)} \mu_{\text{H}}(dV) V^{\otimes t} (|\psi\rangle \langle \psi|)^{\otimes t} (V^\dagger)^{\otimes t} = \int_{\Gamma} \nu(d\gamma) U(\gamma)^{\otimes t} (|\psi\rangle \langle \psi|)^{\otimes t} (U(\gamma)^\dagger)^{\otimes t} \quad (\text{F.7})$$

$$\iff \int_{CS^{2^n-1}} \eta_S(d|\phi\rangle) (|\phi\rangle\langle\phi|)^{\otimes t} = \int_{\Gamma} \nu(d\gamma) (U(\gamma)|\psi\rangle\langle\psi|U(\gamma)^\dagger)^{\otimes t} \quad (\text{F.8})$$

$$\iff U(\gamma)|\psi\rangle \text{ が量子 } t\text{-デザインを成す.} \quad (\text{F.9})$$

ここで、2 行目から 3 行目において命題 A.22 を用いた。

F.2 定理 4.1 の証明

第 t イテレーションにおけるコスト関数の値 $C(\gamma^{(t)})$ において、 γ_j 以外のパラメータを固定した関数を $C_j^{(t)}(\gamma_j)$ とした。同様に、第 t イテレーションにおける雑音のモデル \mathcal{N} の下で計算したコスト関数の値 $\tilde{C}(\gamma^{(t)})$ において、 γ_j 以外のパラメータを固定した関数を $\tilde{C}_j^{(t)}(\gamma_j)$ とする。各イテレーション t におけるパラメータ更新は $\gamma_j^{(t+1)} \leftarrow \arg \min_{\gamma_j} C_j^{(t)}(\gamma_j)$ であるから、すべての t と j に対して、

$$\arg \min_{\gamma_j} C_j^{(t)}(\gamma_j) = \arg \min_{\gamma_j} \tilde{C}_j^{(t)}(\gamma_j) \quad (\text{F.10})$$

であることを示せばよい。

雑音のない場合、初期状態 ρ にアンザッツ $U(\gamma)$ を作用させたのちに得られる終状態は $U(\gamma)\rho U(\gamma)^\dagger$ である。一方で、雑音のモデル \mathcal{N} の下での終状態は、命題 3.10 より、

$$\mathcal{N}(\rho) = \mathcal{D}_{p_G} \circ \mathcal{U}_g \circ \cdots \circ \mathcal{U}_2 \circ \mathcal{D}_{p_1} \circ \mathcal{U}_1(\rho) = pU(\gamma)\rho U(\gamma)^\dagger + \frac{1-p}{2^n}I \quad (\text{F.11})$$

で表せる。ここで、 $p = p_1 p_2 \cdots p_g \in (0, 1]$ とし、 n は量子ビットの数とした。したがって、雑音のない場合のコスト関数 $C(\gamma)$ と雑音のある場合のコスト関数 $\tilde{C}(\gamma)$ は、

$$\tilde{C}(\gamma) = \text{Tr}[O\mathcal{N}(\rho)] = p \text{Tr}[U(\gamma)\rho U(\gamma)^\dagger O] + \frac{1-p}{2^n} \text{Tr}[O] = pC(\gamma) + \frac{1-p}{2^n} \text{Tr}[O] \quad (\text{F.12})$$

と関係づけられる。したがって、すべての t と j に対して、

$$\tilde{C}_j^{(t)}(\gamma_j) = pC_j^{(t)}(\gamma_j) + \frac{1-p}{2^n} \text{Tr}[O] \quad (\text{F.13})$$

が成り立つ。 $p > 0$ であるから、(F.10) が成立することが示された。

付録 G

第 5 章の補足

G.1 (5.17) の導出

スピン系の言葉で書いたシュウィンガーモデルのハミルトニアン

$$H_{\text{spin}} = \frac{1}{4a} \sum_{j=0}^{n-2} (X_j X_{j+1} + Y_j Y_{j+1}) + \frac{g^2 a}{2} \sum_{j=0}^{n-2} \left(\sum_{k=0}^j \frac{Z_k + (-1)^k}{2} \right)^2 + \frac{m}{2} \sum_{j=0}^{n-1} (-1)^j Z_j \quad (\text{G.1})$$

の第 2 項を書き換えていく。まず,

$$\frac{g^2 a}{2} \sum_{j=0}^{n-2} \left(\sum_{k=0}^j \frac{Z_k + (-1)^k}{2} \right)^2 = \frac{g^2 a}{8} \sum_{j=0}^{n-2} \sum_{k=0}^j \sum_{l=0}^j (Z_k + (-1)^k) (Z_l + (-1)^l) \quad (\text{G.2})$$

$$= \frac{g^2 a}{8} \sum_{j=0}^{n-2} \sum_{k=0}^j \sum_{l=0}^j Z_k Z_l + (-1)^k Z_l + (-1)^l Z_k + (-1)^{k+l} \quad (\text{G.3})$$

$$= \frac{g^2 a}{4} \sum_{j=0}^{n-2} \sum_{k=0}^j \sum_{l=k+1}^j Z_k Z_l + \frac{g^2 a}{4} \sum_{j=0}^{n-2} \sum_{k=0}^j (j+1 \bmod 2) Z_k + C \quad (\text{G.4})$$

である。ここで、恒等演算子に比例する項を C とした。さらに,

$$\sum_{j=0}^{n-2} \sum_{k=0}^j \sum_{l=k+1}^j Z_k Z_l = (Z_0 Z_1) + \begin{pmatrix} Z_0 Z_1 + Z_0 Z_2 \\ + Z_1 Z_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} Z_0 Z_1 + Z_0 Z_2 + Z_0 Z_3 \\ + Z_1 Z_2 + Z_1 Z_3 \\ + Z_2 Z_3 \end{pmatrix} + \cdots + \begin{pmatrix} Z_0 Z_1 + \cdots + Z_0 Z_{n-2} \\ \vdots \\ + Z_{n-3} Z_{n-2} \end{pmatrix} \quad (\text{G.5})$$

$$= \sum_{j=0}^{n-3} \sum_{k=j+1}^{n-2} (n-k-1) Z_j Z_k \quad (\text{G.6})$$

であることと,

$$\sum_{j=0}^{n-2} \sum_{k=0}^j (j+1 \bmod 2) Z_k = \sum_{k=0}^{n-2} \sum_{j=k}^{n-2} (j+1 \bmod 2) Z_k \quad (\text{G.7})$$

$$= \sum_{k=0}^{n-2} \left(\sum_{j=0}^{n-2} (j+1 \bmod 2) - \sum_{j=0}^{k-1} (j+1 \bmod 2) \right) Z_k \quad (\text{G.8})$$

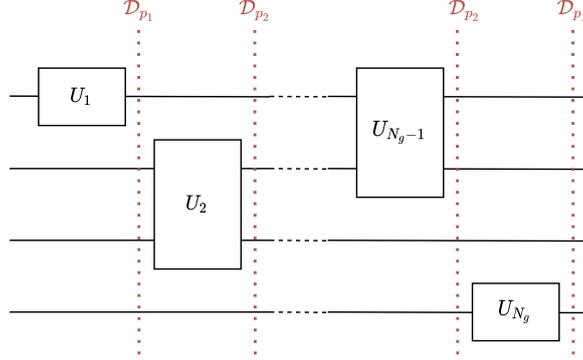


図 G.1: 5.5.1 で用いた雑音のモデル. 1 量子ビットゲートが作用する度に分極解消チャンネル \mathcal{D}_{p_1} , 2 量子ビットゲートが作用する度に分極解消チャンネル \mathcal{D}_{p_2} が作用する雑音のモデルとなっている.

$$= \sum_{k=0}^{n-1} \left(\binom{n}{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} - \binom{k+1}{\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor} \right) Z_k \quad (\text{G.9})$$

であることから,

$$\frac{g^2 a}{2} \sum_{j=0}^{n-2} \left(\sum_{k=0}^j \frac{Z_k + (-1)^k}{2} \right)^2 = \frac{g^2 a}{4} \sum_{j=0}^{n-3} \sum_{k=j+1}^{n-2} (n-k-1) Z_j Z_k + \frac{g^2 a}{4} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\binom{n}{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} - \binom{k+1}{\lfloor \frac{k+1}{2} \rfloor} \right) Z_k + C \quad (\text{G.10})$$

を得る. したがって,

$$\begin{aligned} H_Z &:= \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j^Z Z_j \quad \text{with} \quad \alpha_j^Z := \frac{m(-1)^j}{2} + \frac{g^2 a}{4} \left(\binom{n}{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} - \binom{j+1}{\lfloor \frac{j+1}{2} \rfloor} \right) \\ H_{XY} &:= \sum_{j=0}^{n-2} \alpha_j^{XY} (X_j X_{j+1} + Y_j Y_{j+1}) \quad \text{with} \quad \alpha_j^{XY} := \frac{1}{4a} \\ H_{ZZ} &:= \sum_{j=0}^{n-3} \sum_{k=j+1}^{n-2} \alpha_{jk}^{ZZ} Z_j Z_k \quad \text{with} \quad \alpha_{jk}^{ZZ} := \frac{g^2 a}{4} (n-k-1) \end{aligned} \quad (\text{G.11})$$

を用いて, H_{spin} を

$$\overline{H}_{\text{spin}} = H_Z + H_{XY} + H_{ZZ} \quad (\text{G.12})$$

と表せる. ここで, 恒等演算子に比例する項 C を書くことを省いた.

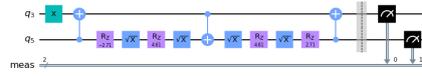
G.2 5.5.1 で用いた雑音のモデル

まず, `ibm_lagos` の量子ビット 0, 1, 2, 3 のトポロジー (図 3.4) の下で, 計算したい量子ゲート U を基本ゲート \sqrt{X} , X , R_Z , CNOT ゲートに $U = U_{N_g} \cdots U_2 U_1$ と分解する. そして, U_i が 1 量子ビットゲート (\sqrt{X} , X , R_Z) であるならば, U_i が作用したのちに 4 量子ビット全体に作用する分極解消チャンネル \mathcal{D}_{p_1} を, U_i が

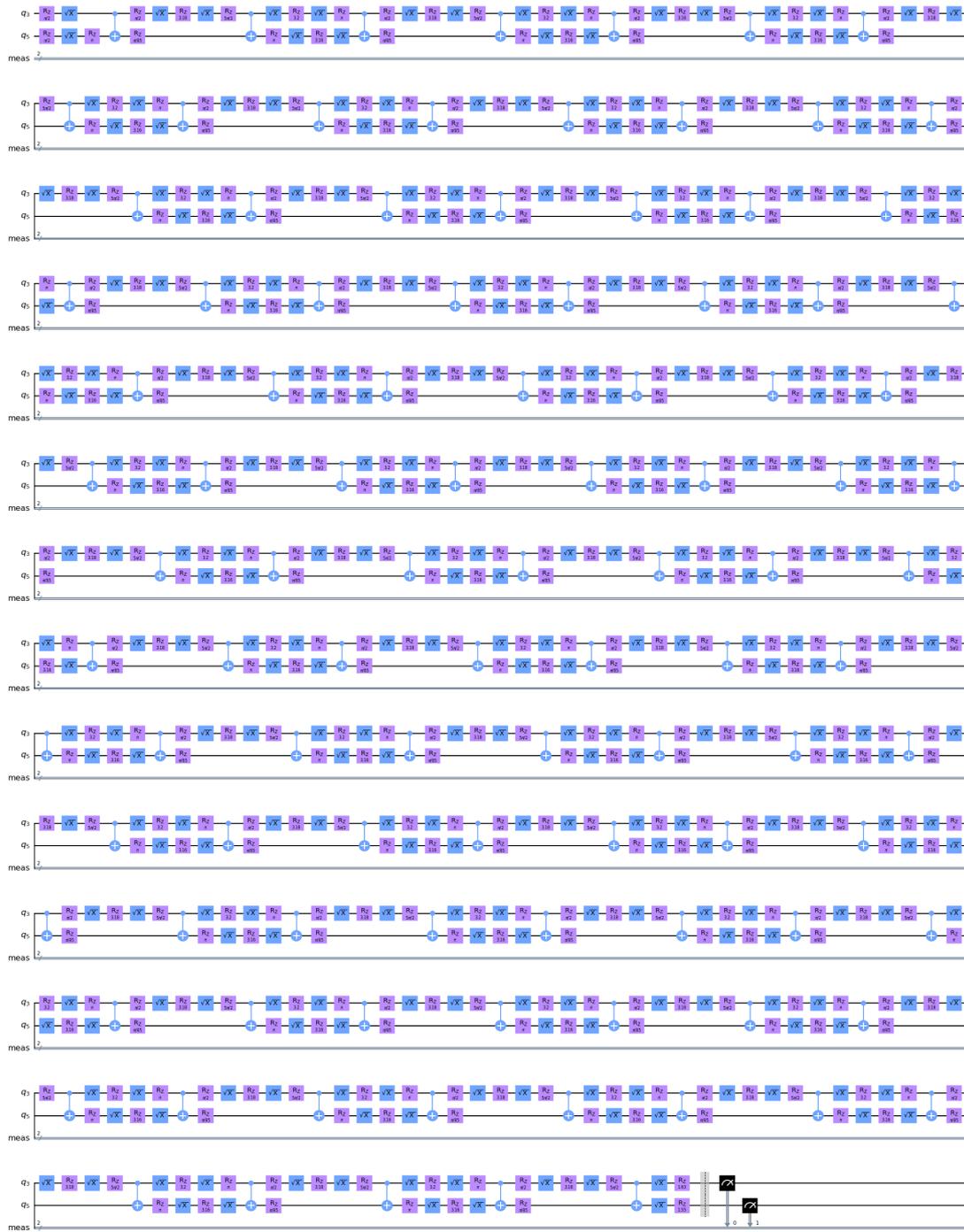
2 量子ビットゲート (CNOT ゲート) であるならば, U_i が作用したのちに 4 量子ビット全体に作用する分極解消チャンネル D_{p_2} を作用させる雑音のモデルを考えた. 分極解消チャンネルのパラメータは, $p_1 = 0.99985$, $p_2 = 0.9985$ とした. 図 G.1 に, 雑音のモデルを示した.

G.3 2 サイト格子シュウィンガーモデルの時間発展シミュレーションに用いた量子回路

図 5.7 に, `ibm_lagos` を用いた 2 サイト格子シュウィンガーモデルの時間発展シミュレーションの結果を示した. 図 3.4 に, `ibm_lagos` の量子ビットのトポロジーを示した. 本実験では, 量子ビット 3, 5 を用いた. また, 図 5.7 (a) において, 時刻 0.6π の系のシミュレーションを行うのに用いた量子回路を図 G.2 に示した. `ibm_lagos` 上では, あらゆる量子ゲートは基本ゲート \sqrt{X} , X , R_Z , CNOT ゲートに分解される.



(a) RQD により近似された時間発展演算子の量子回路。



(b) トロッター分解された時間発展演算子の量子回路。

図 G.2: 図 5.7b における時刻 0.6π の系のシミュレーションを行うのに用いた量子回路。

付録 H

第 6 章の補足

H.1 準備

複素内積空間 \mathcal{H} の正規直交基底 $\{|i\rangle\}_{i=1}^{d:=\dim \mathcal{H}}$ とする.

補題 H.1 線型演算子 $G \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes 2})$ を, $\mathcal{H}^{\otimes 2}$ の正規直交基底 $\{|i\rangle \otimes |j\rangle\}_{i,j=1}^d$ に対して,

$$G|i\rangle \otimes |j\rangle = |j\rangle \otimes |i\rangle \quad (\text{H.1})$$

と作用する線型演算子と定義する. G は以下の性質を満たす.

- (1) $G^2 = I_{\mathcal{H}^{\otimes 2}}, G = G^\dagger$.
- (2) $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して, $\text{Tr}[A^{\otimes 2}G] = \text{Tr}[A^2]$.
- (3) $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して, $G(A \otimes B)G = B \otimes A$.

[証明] (1) $G^2 = I_{\mathcal{H}^{\otimes 2}}$ は明らか. また, 全ての i, j, k, l に対して,

$$(\langle k| \otimes \langle l|)G(|i\rangle \otimes |j\rangle) = (\langle k| \otimes \langle l|)(|j\rangle \otimes |i\rangle) = \delta_{kj}\delta_{il} \quad (\text{H.2})$$

$$(\langle k| \otimes \langle l|)G^\dagger(|i\rangle \otimes |j\rangle) = (\langle l| \otimes \langle k|)(|i\rangle \otimes |j\rangle) = \delta_{kj}\delta_{il} \quad (\text{H.3})$$

であるから, $G = G^\dagger$.

(2) $A = \sum_{i,j=1}^d a_{ij} |i\rangle \langle j|$ として,

$$\text{Tr}[A^{\otimes 2}G] = \text{Tr} \left[\sum_{i,j,k,l=1}^d a_{ij}a_{kl}G(|i\rangle \langle j| \otimes |k\rangle \langle l|) \right] \quad (\text{H.4})$$

$$= \text{Tr} \left[\sum_{i,j,k,l=1}^d a_{ij}a_{kl} |k\rangle \langle j| \otimes |i\rangle \langle l| \right] \quad (\text{H.5})$$

$$= \sum_{i,j,k,l=1}^d a_{ij}a_{kl}\delta_{kj}\delta_{il} = \sum_{i,j=1}^d a_{ij}a_{ji} = \text{Tr}[A^2] \quad (\text{H.6})$$

を得る.

(3) $A = \sum_{i,j=1}^d a_{ij} |i\rangle \langle j|$, $B = \sum_{k,l=1}^d b_{kl} |k\rangle \langle l|$ として,

$$G(A \otimes B)G = \sum_{i,j,k,l=1}^d a_{ij} b_{kl} G(|i\rangle \langle j| \otimes |k\rangle \langle l|)G = \sum_{i,j,k,l=1}^d a_{ij} b_{kl} (|k\rangle \langle l| \otimes |i\rangle \langle j|) = B \otimes A \quad (\text{H.7})$$

を得る. ■

補題 H.2 $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ とする. このとき, $0 \leq A, 0 \leq B \leq I_{\mathcal{H}}$ ならば, $0 \leq \text{Tr}[AB] \leq \text{Tr}[A]$ である.

[証明] まず, 第 1 不等号を示す. A, B は正オペレータなので, スペクトル分解可能で, A の固有値 $0 \leq a_i$, B の固有値 $0 \leq b_i \leq 1$ に対応して, \mathcal{H} の正規直交基底 $\{|i\rangle\}_{i=1}^d$, $\{|\tilde{i}\rangle\}_{i=1}^d$ がそれぞれ存在し,

$$A = \sum a_i |i\rangle \langle i|, \quad B = \sum b_i |\tilde{i}\rangle \langle \tilde{i}|. \quad (\text{H.8})$$

A, B の固有値は非負なので,

$$\text{Tr}[AB] = \sum_i \sum_j a_i b_j |\langle i|\tilde{j}\rangle|^2 \geq 0. \quad (\text{H.9})$$

次に, 第 2 不等号を示す. $0 \leq I_{\mathcal{H}} - B \leq I_{\mathcal{H}}$ であるから, 第 1 不等号で示した結果より,

$$\text{Tr}[A(I_{\mathcal{H}} - B)] \geq 0 \iff \text{Tr}[A] \geq \text{Tr}[AB]. \quad (\text{H.10})$$
■

補題 H.3 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ とする. このとき, $0 \leq A \leq I_{\mathcal{H}}$ ならば, $0 \leq A^{\otimes 2} \leq I_{\mathcal{H}^{\otimes 2}}$.

[証明] A は正オペレータなので, スペクトル分解定理より, A の固有値 $0 \leq a_i \leq 1$ に対応して, \mathcal{H} の正規直交基底 $\{|i\rangle\}_{i=1}^d$ が存在し,

$$A = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}} a_i |i\rangle \langle i|. \quad (\text{H.11})$$

このとき, 任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}^{\otimes 2}$ は,

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle \quad (\text{H.12})$$

で表されるので,

$$\langle \psi | A^{\otimes 2} | \psi \rangle = \sum_{i,j} |\psi_{ij}|^2 a_i a_j \begin{cases} \geq 0 \\ \leq \langle \psi | \psi \rangle \end{cases}, \quad (\text{H.13})$$

つまり, $0 \leq A^{\otimes 2} \leq I_{\mathcal{H}^{\otimes 2}}$. ■

補題 H.4 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes 2}), B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ とする. $0 \leq A, 0 \leq B \leq I_{\mathcal{H}}$ ならば, $0 \leq \text{Tr}[AB^{\otimes 2}] \leq \text{Tr}[A]$.

[証明] 補題 H.2, 補題 H.3 より示せる. ■

補題 H.5 $p \in [1, \infty]$ として, $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ とする. このとき, $\|A^{\otimes 2}\|_p = \|A\|_p^2$.

[証明] $A^\dagger A$ は, 正オペレータゆえスペクトル分解可能で, $A^\dagger A$ の固有値 $0 \leq a_i$ に対応して, \mathcal{H} の正規直交基底 $\{|i\rangle\}_{i=1}^d$ が存在し,

$$A^\dagger A = \sum_i a_i |i\rangle \langle i|. \quad (\text{H.14})$$

よって, $p \in [1, \infty)$ ならば,

$$\|A^{\otimes 2}\|_p = \left[\text{Tr} \sqrt{\sum_{i,j} a_i a_j |i\rangle \langle i| \otimes |j\rangle \langle j|}^p \right]^{\frac{1}{p}} = \left[\sum_i \sqrt{a_i^p} \sum_j \sqrt{a_j^p} \right]^{\frac{1}{p}} = \left[\sum_i \sqrt{a_i^p} \right]^{\frac{1}{p}} \left[\sum_j \sqrt{a_j^p} \right]^{\frac{1}{p}} = \|A\|_p^2. \quad (\text{H.15})$$

$A^\dagger A$ の最大固有値の 2 乗は $(A^\dagger A)^{\otimes 2}$ の最大固有値に等しいので, これは $p = \infty$ でも成立. ■

H.2 定理 6.1 の証明

見やすさのため, $U_R(\gamma_R), U_M(\gamma_M), U_L(\gamma_L), U_{M,\gamma}(\gamma_M)$ をそれぞれ $U_R, U_M, U_L, U_{M,\gamma}$ と書く.

H.2.1 (6.8) の導出

(6.4) より,

$$\mathbb{E}_{\gamma_R, \gamma_L} \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \int \nu_R(d\gamma_R) \int \nu_L(d\gamma_L) \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right] + \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_{M,\gamma}^\dagger \right]. \quad (\text{H.16})$$

さらに, $U(d)$ -値確率変数 U_R, U_L がユニタリ 1- デザインであるので,

$$\mathbb{E}_{\gamma_R, \gamma_L} \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \int \mu_H(dU_R) \int \mu_H(dU_L) \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right] + \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_{M,\gamma}^\dagger \right]. \quad (\text{H.17})$$

ここに, 公式 B.2 を用いれば,

$$\mathbb{E}_{\gamma_R, \gamma_L} \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \frac{\text{Tr}[\rho] \text{Tr}[O]}{d^2} \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger + U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right] \quad (\text{H.18})$$

$$= \frac{\text{Tr}[\rho] \text{Tr}[O]}{d^2} \text{Tr} \left[\frac{\partial}{\partial \gamma} (U_M U_M^\dagger) \right] \quad (\text{H.19})$$

$$= \frac{\text{Tr}[\rho] \text{Tr}[O]}{d^2} \text{Tr} \left[\frac{\partial}{\partial \gamma} I_{\mathcal{H}} \right] = 0. \quad (\text{H.20})$$

ゆえに,

$$\mathbb{E}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \mathbb{E}_{\gamma_R, \gamma_M, \gamma_L} \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = 0 \quad (\text{H.21})$$

を得る.

H.2.2 (6.9) の導出

(6.8) より,

$$\mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] \quad (\text{H.22})$$

なので, 勾配の 2 次モーメントを考えれば良い. 勾配の 2 乗は, (6.5) より,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 &= \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right]^2 + \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_{M,\gamma}^\dagger \right]^2 \\ &\quad + 2 \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_{M,\gamma}^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (\text{H.23})$$

よって,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\gamma_R, \gamma_L} \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] &= \int \nu_R(d\gamma_R) \int \nu_L(d\gamma_L) \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right]^2 + \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_{M,\gamma}^\dagger \right]^2 \\ &\quad + 2 \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_{M,\gamma}^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (\text{H.24})$$

さらに, $U(d)$ -値確率変数 U_R と U_L がユニタリ 2-デザインであるので,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\gamma_R, \gamma_L} \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] &= \int \mu_H(dU_R) \int \mu_H(dU_L) \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right]^2 + \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_{M,\gamma}^\dagger \right]^2 \\ &\quad + 2 \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_{M,\gamma}^\dagger \right]. \end{aligned} \quad (\text{H.25})$$

この積分を各項についてそれぞれ計算する. まず, (H.25) の第 1 項の積分は, 公式 B.5 より,

$$\begin{aligned} ((\text{H.25}) \text{ の第 1 項}) &= \frac{\Delta_d^{(1)}(\rho) \Delta_d^{(1)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger \right]^2 + \frac{\Delta_d^{(1)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[\left(U_{M,\gamma} U_M^\dagger \right)^2 \right] \\ &\quad + \frac{\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(1)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[\left(U_M^\dagger U_{M,\gamma} \right)^2 \right] + \frac{\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger \right]^2 \end{aligned} \quad (\text{H.26})$$

次に, (H.25) の第 2 項の積分は, (H.26) で, $U_{M,\gamma} \leftrightarrow U_M$ と置き換えればよく,

$$\begin{aligned} ((\text{H.25}) \text{ の第 2 項}) &= \frac{\Delta_d^{(1)}(\rho) \Delta_d^{(1)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right]^2 + \frac{\Delta_d^{(1)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[\left(U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right)^2 \right] \\ &\quad + \frac{\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(1)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[\left(U_{M,\gamma}^\dagger U_M \right)^2 \right] + \frac{\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right]^2 \end{aligned} \quad (\text{H.27})$$

最後に, (H.25) の第 3 項の積分は, 公式 B.5 より,

$$\begin{aligned} ((\text{H.25}) \text{ の第 3 項}) &= \frac{2\Delta_d^{(1)}(\rho) \Delta_d^{(1)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right] + \frac{2\Delta_d^{(1)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right] \\ &\quad + \frac{2\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(1)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[U_M^\dagger U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger U_M \right] + \frac{2\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_M U_M^\dagger \right] \end{aligned} \quad (\text{H.28})$$

ゆえに, (H.26), (H.27), (H.28) より,

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_{\gamma_R, \gamma_L} \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] &= \frac{\Delta_d^{(1)}(\rho) \Delta_d^{(1)}(O)}{(d^2 - 1)^2} \left(\text{Tr} [U_{M, \gamma} U_M^\dagger]^2 + \text{Tr} [U_M U_{M, \gamma}^\dagger]^2 + 2 \text{Tr} [U_{M, \gamma} U_M^\dagger] \text{Tr} [U_M U_{M, \gamma}^\dagger] \right) \\
&\quad + \frac{\Delta_d^{(1)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2 - 1)^2} \text{Tr} \left[(U_{M, \gamma} U_M^\dagger)^2 + (U_M U_{M, \gamma}^\dagger)^2 + 2 U_{M, \gamma} U_M^\dagger U_M U_{M, \gamma}^\dagger \right] \\
&\quad + \frac{\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(1)}(O)}{(d^2 - 1)^2} \text{Tr} \left[(U_M^\dagger U_{M, \gamma})^2 + (U_{M, \gamma}^\dagger U_M)^2 + 2 U_M^\dagger U_{M, \gamma} U_{M, \gamma}^\dagger U_M \right] \\
&\quad + \frac{\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2 - 1)^2} \left(\text{Tr} [U_{M, \gamma} U_M^\dagger]^2 + \text{Tr} [U_M U_{M, \gamma}^\dagger]^2 + 2d \text{Tr} [U_{M, \gamma} U_{M, \gamma}^\dagger] \right)
\end{aligned} \tag{H.29}$$

を得る. さらに,

$$\begin{aligned}
&\text{Tr} [U_{M, \gamma} U_M^\dagger]^2 + \text{Tr} [U_M U_{M, \gamma}^\dagger]^2 + 2 \text{Tr} [U_{M, \gamma} U_M^\dagger] \text{Tr} [U_M U_{M, \gamma}^\dagger] \\
&= \text{Tr} [U_{M, \gamma} U_M^\dagger + U_M U_{M, \gamma}^\dagger]^2 = \text{Tr} \left[\frac{\partial}{\partial \gamma} U_M U_M^\dagger \right]^2 = \text{Tr} \left[\frac{\partial}{\partial \gamma} I_{\mathcal{H}} \right]^2 = 0,
\end{aligned} \tag{H.30}$$

$$\begin{aligned}
&\text{Tr} \left[(U_{M, \gamma} U_M^\dagger)^2 + (U_M U_{M, \gamma}^\dagger)^2 + 2 U_{M, \gamma} U_M^\dagger U_M U_{M, \gamma}^\dagger \right] \\
&= \text{Tr} \left[(U_{M, \gamma} U_M^\dagger + U_M U_{M, \gamma}^\dagger)^2 \right] = \text{Tr} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \gamma} U_M U_M^\dagger \right)^2 \right] = \text{Tr} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \gamma} I_{\mathcal{H}} \right)^2 \right] = 0,
\end{aligned} \tag{H.31}$$

$$\begin{aligned}
&\text{Tr} \left[(U_M^\dagger U_{M, \gamma})^2 + (U_{M, \gamma}^\dagger U_M)^2 + 2 U_M^\dagger U_{M, \gamma} U_{M, \gamma}^\dagger U_M \right] \\
&= \text{Tr} \left[(U_M^\dagger U_{M, \gamma} + U_{M, \gamma}^\dagger U_M)^2 \right] = \text{Tr} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \gamma} U_M U_M^\dagger \right)^2 \right] = \text{Tr} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \gamma} I_{\mathcal{H}} \right)^2 \right] = 0
\end{aligned} \tag{H.32}$$

であるから,

$$\mathbb{E}_{\gamma_R, \gamma_L} \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] = \frac{\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2 - 1)^2} \left(\text{Tr} [U_{M, \gamma} U_M^\dagger]^2 + \text{Tr} [U_M U_{M, \gamma}^\dagger]^2 + 2d \text{Tr} [U_{M, \gamma} U_{M, \gamma}^\dagger] \right) \tag{H.33}$$

$$= \frac{\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2 - 1)^2} \left(-2 \text{Tr} [U_{M, \gamma} U_M^\dagger] \text{Tr} [U_M U_{M, \gamma}^\dagger] + 2d \text{Tr} [U_{M, \gamma} U_{M, \gamma}^\dagger] \right) \tag{H.34}$$

$$= \frac{2d \Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2 - 1)^2} \left(\text{Tr} [U_{M, \gamma} U_{M, \gamma}^\dagger] - \frac{|\text{Tr} [U_{M, \gamma} U_M^\dagger]|^2}{d} \right) \tag{H.35}$$

を得る. ゆえに,

$$\mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] = \mathbb{E}_{\gamma_R, \gamma_M, \gamma_L} \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] \tag{H.36}$$

$$= \frac{2d\Delta_d^{(2)}(\rho)\Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \int \nu_M(d\gamma_M) \left(\text{Tr} [U_{M,\gamma}U_{M,\gamma}^\dagger] - \frac{|\text{Tr} [U_{M,\gamma}U_M^\dagger]|^2}{d} \right) \quad (\text{H.37})$$

を得る.

H.3 命題 6.2 の証明

見やすさのため $\mathcal{A}_{U_R(\gamma_R),\nu_R}^{(t)}(\cdot)$ や $\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^\dagger,\nu_L}^{(t)}(\cdot)$ を $\mathcal{A}_R^{(t)}(\cdot)$ や $\mathcal{A}_L^{(t)}(\cdot)$ と書く.

H.3.1 (6.13) の導出

(6.5) より, 勾配の期待値は,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\gamma_R,\gamma_L} \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] &= \int \nu_R(d\gamma_R) \int \nu_L(d\gamma_L) \text{Tr} [U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger] \\ &\quad + \int \nu_R(d\gamma_R) \int \nu_L(d\gamma_L) \text{Tr} [U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger] \end{aligned} \quad (\text{H.38})$$

と表せる. (H.38) の各項をそれぞれ計算していく. まず, (H.38) の第 1 項は, $\mathcal{A}_R^{(1)}(\rho)$ や $\mathcal{A}_L^{(1)}(O)$ を用いて,

$$\begin{aligned} ((\text{H.38}) \text{ の第 1 項}) &= \int \mu_H(dV) \int \mu_H(dW) \text{Tr} [W^\dagger O W U_{M,\gamma} V \rho V^\dagger U_M^\dagger] \\ &\quad - \int \mu_H(dV) \text{Tr} [\mathcal{A}_L^{(1)}(O) U_{M,\gamma} V \rho V^\dagger U_M^\dagger] \\ &\quad - \int \mu_H(dW) \text{Tr} [W^\dagger O W U_{M,\gamma} \mathcal{A}_R^{(1)}(\rho) U_M^\dagger] \\ &\quad + \text{Tr} [\mathcal{A}_L^{(1)}(O) U_{M,\gamma} \mathcal{A}_R^{(1)}(\rho) U_M^\dagger] \end{aligned} \quad (\text{H.39})$$

と表せる. 公式 B.2 を用いて, (H.39) をハール測度に関して積分すると,

$$\begin{aligned} ((\text{H.38}) \text{ の第 1 項}) &= \frac{\text{Tr} [O] \text{Tr} [U_{M,\gamma} U_M^\dagger]}{d^2} \\ &\quad - \frac{\text{Tr} [\mathcal{A}_L^{(1)}(O) U_{M,\gamma} U_M^\dagger]}{d} \\ &\quad - \frac{\text{Tr} [O] \text{Tr} [\mathcal{A}_R^{(1)}(\rho) U_M^\dagger U_{M,\gamma}]}{d} \\ &\quad + \text{Tr} [\mathcal{A}_L^{(1)}(O) U_{M,\gamma} \mathcal{A}_R^{(1)}(\rho) U_M^\dagger] \end{aligned} \quad (\text{H.40})$$

を得る. (H.38) の第 2 項については, (H.40) で, $U_{M,\gamma} \leftrightarrow U_M$ と置き換えればよく,

$$\begin{aligned} ((\text{H.38}) \text{ の第 2 項}) &= \frac{\text{Tr} [O] \text{Tr} [U_M U_{M,\gamma}^\dagger]}{d^2} \\ &\quad - \frac{\text{Tr} [\mathcal{A}_L^{(1)}(O) U_M U_{M,\gamma}^\dagger]}{d} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\text{Tr}[O] \text{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(1)}(\rho) U_{M,\gamma}^\dagger U_M \right]}{d} \\
& + \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(1)}(O) U_M \mathcal{A}_R^{(1)}(\rho) U_{M,\gamma}^\dagger \right]
\end{aligned} \tag{H.41}$$

を得る。したがって, (H.40), (H.41) より,

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] &= \int \nu_M(d\gamma_M) \frac{\text{Tr}[O] \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger + U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right]}{d^2} \\
& - \int \nu_M(d\gamma_M) \frac{\text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(1)}(O) \left(U_{M,\gamma} U_M^\dagger + U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right) \right]}{d} \\
& - \int \nu_M(d\gamma_M) \frac{\text{Tr}[O] \text{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(1)}(\rho) \left(U_M^\dagger U_{M,\gamma} + U_{M,\gamma}^\dagger U_M \right) \right]}{d} \\
& + \int \nu_M(d\gamma_M) \frac{\partial}{\partial \gamma} \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(1)}(O) U_M \mathcal{A}_R^{(1)}(\rho) U_M^\dagger \right]
\end{aligned} \tag{H.42}$$

$$= \int \nu_M(d\gamma_M) \frac{\partial}{\partial \gamma} \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(1)}(O) U_M \mathcal{A}_R^{(1)}(\rho) U_M^\dagger \right] \tag{H.43}$$

を得る。ここで,

$$U_{M,\gamma} U_M^\dagger + U_M U_{M,\gamma}^\dagger = \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(U_M U_M^\dagger \right) = \frac{\partial}{\partial \gamma} I_{\mathcal{H}} = 0 \tag{H.44}$$

$$U_M^\dagger U_{M,\gamma} + U_{M,\gamma}^\dagger U_M = \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(U_M^\dagger U_M \right) = \frac{\partial}{\partial \gamma} I_{\mathcal{H}} = 0 \tag{H.45}$$

を用いた。

H.3.2 (6.14) の導出

(6.5) より, コスト関数の勾配の 2 次モーメントは,

$$\begin{aligned}
& \mathbb{E}_{\gamma_R, \gamma_L} \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] \\
&= \int \nu_R(d\gamma_R) \int \nu_L(d\gamma_L) \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right]^2 \\
& + \int \nu_R(d\gamma_R) \int \nu_L(d\gamma_L) \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_{M,\gamma}^\dagger \right]^2 \\
& + 2 \int \nu_R(d\gamma_R) \int \nu_L(d\gamma_L) \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_{M,\gamma} U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_{M,\gamma}^\dagger \right]
\end{aligned} \tag{H.46}$$

と表せる。(H.46) の各項をそれぞれ計算していく。まず, (H.46) の第 1 項は, $\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2})$ や $\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2})$ を用いて,

$$\begin{aligned}
((\text{H.46}) \text{ の第 1 項}) &= \int \mu_{\mathcal{H}}(dV) \int \mu_{\mathcal{H}}(dW) \text{Tr} \left[(W^\dagger)^{\otimes 2} O^{\otimes 2} W^{\otimes 2} U_{M,\gamma}^{\otimes 2} V^{\otimes 2} \rho^{\otimes 2} (V^\dagger)^{\otimes 2} (U_M^\dagger)^{\otimes 2} \right] \\
& - \int \mu_{\mathcal{H}}(dV) \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_{M,\gamma}^{\otimes 2} V^{\otimes 2} \rho^{\otimes 2} (V^\dagger)^{\otimes 2} (U_M^\dagger)^{\otimes 2} \right] \\
& - \int \mu_{\mathcal{H}}(dW) \text{Tr} \left[(W^\dagger)^{\otimes 2} O^{\otimes 2} W^{\otimes 2} U_{M,\gamma}^{\otimes 2} \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) (U_M^\dagger)^{\otimes 2} \right]
\end{aligned}$$

$$+ \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)} (O^{\otimes 2}) U_{M,\gamma}^{\otimes 2} \mathcal{A}_R^{(2)} (\rho^{\otimes 2}) (U_M^\dagger)^{\otimes 2} \right] \quad (\text{H.47})$$

と表せる. 公式 B.4 を用いて, (H.47) の第 2 項と第 3 項をハール測度に関して積分すると,

$$\begin{aligned} ((\text{H.46}) \text{ の第 1 項}) &= \int \mu_{\mathcal{H}}(dV) \int \mu_{\mathcal{H}}(dW) \text{Tr} \left[(W^\dagger)^{\otimes 2} O^{\otimes 2} W^{\otimes 2} U_{M,\gamma}^{\otimes 2} V^{\otimes 2} \rho^{\otimes 2} (V^\dagger)^{\otimes 2} (U_M^\dagger)^{\otimes 2} \right] \\ &\quad - \frac{1}{d^2 - 1} \text{Tr} \left[(U_M^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)} (O^{\otimes 2}) U_{M,\gamma}^{\otimes 2} \left(\Delta_d^{(1)}(\rho) + G\Delta_d^{(2)}(\rho) \right) \right] \\ &\quad - \frac{1}{d^2 - 1} \text{Tr} \left[U_{M,\gamma}^{\otimes 2} \mathcal{A}_R^{(2)} (\rho^{\otimes 2}) (U_M^\dagger)^{\otimes 2} \left(\Delta_d^{(1)}(O) + G\Delta_d^{(2)}(O) \right) \right] \\ &\quad + \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)} (O^{\otimes 2}) U_{M,\gamma}^{\otimes 2} \mathcal{A}_R^{(2)} (\rho^{\otimes 2}) (U_M^\dagger)^{\otimes 2} \right] \end{aligned} \quad (\text{H.48})$$

を得る. ここで, \mathcal{H} の正規直交基底 $\{|i\rangle\}_{i=1}^d$ に対して, $G \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^{\otimes 2})$ を,

$$G|i\rangle \otimes |j\rangle = |j\rangle \otimes |i\rangle \quad (\text{H.49})$$

で定義し, 補題 H.1(2) を用いた. (H.46) の第 2 項は, (H.48) で, $U_{M,\gamma} \leftrightarrow U_M$ と置き換えればよく,

$$\begin{aligned} ((\text{H.46}) \text{ の第 2 項}) &= \int \mu_{\mathcal{H}}(dV) \int \mu_{\mathcal{H}}(dW) \text{Tr} \left[(W^\dagger)^{\otimes 2} O^{\otimes 2} W^{\otimes 2} U_M^{\otimes 2} V^{\otimes 2} \rho^{\otimes 2} (V^\dagger)^{\otimes 2} (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \right] \\ &\quad - \frac{1}{d^2 - 1} \text{Tr} \left[(U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)} (O^{\otimes 2}) U_M^{\otimes 2} \left(\Delta_d^{(1)}(\rho) + G\Delta_d^{(2)}(\rho) \right) \right] \\ &\quad - \frac{1}{d^2 - 1} \text{Tr} \left[U_M^{\otimes 2} \mathcal{A}_R^{(2)} (\rho^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \left(\Delta_d^{(1)}(O) + G\Delta_d^{(2)}(O) \right) \right] \\ &\quad + \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)} (O^{\otimes 2}) U_M^{\otimes 2} \mathcal{A}_R^{(2)} (\rho^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \right] \end{aligned} \quad (\text{H.50})$$

を得る. また, (H.46) の第 3 項は, $\mathcal{A}_R^{(2)} (\rho^{\otimes 2})$ や $\mathcal{A}_L^{(2)} (O^{\otimes 2})$ を用いて,

$$\begin{aligned} ((\text{H.46}) \text{ の第 3 項}) &= 2 \int \mu_{\mathcal{H}}(dV) \int \mu_{\mathcal{H}}(dW) \text{Tr} \left[(W^\dagger)^{\otimes 2} O^{\otimes 2} W^{\otimes 2} (U_{M,\gamma} \otimes U_M) V^{\otimes 2} \rho^{\otimes 2} (V^\dagger)^{\otimes 2} (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \right] \\ &\quad - 2 \int \mu_{\mathcal{H}}(dV) \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)} (O^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) V^{\otimes 2} \rho^{\otimes 2} (V^\dagger)^{\otimes 2} (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \right] \\ &\quad - 2 \int \mu_{\mathcal{H}}(dW) \text{Tr} \left[(W^\dagger)^{\otimes 2} O^{\otimes 2} W^{\otimes 2} (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \mathcal{A}_R^{(2)} (\rho^{\otimes 2}) (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \right] \\ &\quad + 2 \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)} (O^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \mathcal{A}_R^{(2)} (\rho^{\otimes 2}) (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \right] \end{aligned} \quad (\text{H.51})$$

と表せる. 公式 B.4 を用いて, (H.51) の第 2 項と第 3 項をハール測度に関して積分すると,

$$\begin{aligned} ((\text{H.46}) \text{ の第 3 項}) &= 2 \int \mu_{\mathcal{H}}(dV) \int \mu_{\mathcal{H}}(dW) \text{Tr} \left[(W^\dagger)^{\otimes 2} O^{\otimes 2} W^{\otimes 2} (U_{M,\gamma} \otimes U_M) V^{\otimes 2} \rho^{\otimes 2} (V^\dagger)^{\otimes 2} (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \right] \\ &\quad - \frac{2}{d^2 - 1} \text{Tr} \left[(U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)} (O^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \left(\Delta_d^{(1)}(\rho) + G\Delta_d^{(2)}(\rho) \right) \right] \\ &\quad - \frac{2}{d^2 - 1} \text{Tr} \left[(U_{M,\gamma} \otimes U_M) \mathcal{A}_R^{(2)} (\rho^{\otimes 2}) (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \left(\Delta_d^{(1)}(O) + G\Delta_d^{(2)}(O) \right) \right] \\ &\quad + 2 \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)} (O^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \mathcal{A}_R^{(2)} (\rho^{\otimes 2}) (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \right] \end{aligned} \quad (\text{H.52})$$

を得る. したがって, (H.48), (H.50), (H.52) より,

$$\mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] - v_\gamma(\rho, O)$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{d^2-1} \int \nu_M(d\gamma_M) \left(\text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \right] \Delta_d^{(1)}(\rho) + \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) G \right] \Delta_d^{(2)}(\rho) \right) \\
&\quad - \frac{1}{d^2-1} \int \nu_M(d\gamma_M) \left(\text{Tr} \left[\mathcal{J}_2 \left(\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right) \right] \Delta_d^{(1)}(O) + \text{Tr} \left[\mathcal{J}_2 \left(\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right) G \right] \Delta_d^{(2)}(O) \right) \\
&\quad + \int \nu_M(d\gamma_M) \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right] \tag{H.53}
\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned}
v_\gamma(\rho, O) &:= \int \mu_H(dV) \int \nu_M(d\gamma_M) \int \mu_H(dW) \text{Tr} \left[(W^\dagger)^{\otimes 2} O^{\otimes 2} W^{\otimes 2} U_{M,\gamma}^{\otimes 2} V^{\otimes 2} \rho^{\otimes 2} (V^\dagger)^{\otimes 2} U_M^{\otimes 2} \right] \\
&\quad + \int \mu_H(dV) \int \nu_M(d\gamma_M) \int \mu_H(dW) \text{Tr} \left[(W^\dagger)^{\otimes 2} O^{\otimes 2} W^{\otimes 2} U_M^{\otimes 2} V^{\otimes 2} \rho^{\otimes 2} (V^\dagger)^{\otimes 2} U_{M,\gamma}^{\otimes 2} \right] \\
&\quad + 2 \int \mu_H(dV) \int \nu_M(d\gamma_M) \int \mu_H(dW) \text{Tr} \left[(W^\dagger)^{\otimes 2} O^{\otimes 2} W^{\otimes 2} (U_{M,\gamma} \otimes U_M) V^{\otimes 2} \rho^{\otimes 2} (V^\dagger)^{\otimes 2} (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \right] \tag{H.54}
\end{aligned}$$

とし、

$$\mathcal{J}_1(\cdot) := (U_M^\dagger)^{\otimes 2}(\cdot) U_{M,\gamma}^{\otimes 2} + (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2}(\cdot) U_M^{\otimes 2} + 2(U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger)(\cdot) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \tag{H.55}$$

$$\mathcal{J}_2(\cdot) := U_{M,\gamma}^{\otimes 2}(\cdot) (U_M^\dagger)^{\otimes 2} + U_M^{\otimes 2}(\cdot) (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} + 2(U_{M,\gamma} \otimes U_M)(\cdot) (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \tag{H.56}$$

とした。 $v_\gamma(\rho, O)$ は、 U_R, U_L がユニタリ 2 - デザインであると仮定した場合のコスト関数の勾配の 2 次モーメントに等しいので、定理 6.1 より、

$$v_\gamma(\rho, O) = \frac{2d\Delta_d^{(2)}(\rho) \Delta_d^{(2)}(O)}{(d^2-1)^2} \int \nu_M(d\gamma_M) \left(\text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger \right] - \frac{\left| \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger \right] \right|^2}{d} \right) \tag{H.57}$$

である。また、

$$\text{Tr} [\mathcal{J}_1(\cdot)] = \text{Tr} [\mathcal{J}_2(\cdot)] = 0 \tag{H.58}$$

である。なぜなら、

$$U_{M,\gamma}^{\otimes 2} (U_M^\dagger)^{\otimes 2} + U_M^{\otimes 2} (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} + 2(U_{M,\gamma} \otimes U_M) (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \tag{H.59}$$

$$= U_{M,\gamma} U_M^\dagger \otimes (U_{M,\gamma} U_M^\dagger + U_M U_{M,\gamma}^\dagger) + (U_M U_{M,\gamma}^\dagger + U_{M,\gamma} U_M^\dagger) \otimes U_M U_{M,\gamma}^\dagger \tag{H.60}$$

$$= U_M U_{M,\gamma}^\dagger \otimes \left(\frac{\partial}{\partial \gamma} (U_M U_M^\dagger) \right) + \left(\frac{\partial}{\partial \gamma} (U_M U_M^\dagger) \right) \otimes U_{M,\gamma} U_M^\dagger \tag{H.61}$$

$$= U_M U_{M,\gamma}^\dagger \otimes \left(\frac{\partial}{\partial \gamma} I_{\mathcal{H}} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial \gamma} I_{\mathcal{H}} \right) \otimes U_{M,\gamma} U_M^\dagger = 0 \tag{H.62}$$

であるが故に、

$$\text{Tr} [\mathcal{J}_1(\cdot)] = \text{Tr} \left[\left(U_{M,\gamma}^{\otimes 2} (U_M^\dagger)^{\otimes 2} + U_M^{\otimes 2} (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} + 2(U_{M,\gamma} \otimes U_M) (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \right) (\cdot) \right] = 0 \tag{H.63}$$

であるからである。 $\text{Tr} [\mathcal{J}_2(\cdot)] = 0$ も同様に示せる。したがって、(H.58) を (H.53) に代入して、

$$\mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] - v_\gamma(\rho, O) = -\frac{\Delta_d^{(2)}(\rho)}{d^2-1} \int \nu_M(d\gamma_M) \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) G \right]$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{\Delta_d^{(2)}(O)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \operatorname{Tr} \left[\mathcal{J}_2 \left(\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right) G \right] \\
& + \int \nu_M(d\gamma_M) \operatorname{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right]
\end{aligned} \tag{H.64}$$

を得る.

さらに, $\operatorname{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) G \right]$ の計算を進める. 補題 H.1(1)(3) より,

$$\begin{aligned}
& \operatorname{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) G \right] \\
= & \operatorname{Tr} \left[(U_M^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_{M,\gamma}^{\otimes 2} G + (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_M^{\otimes 2} G + 2(U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) G \right]
\end{aligned} \tag{H.65}$$

$$= \operatorname{Tr} \left[(U_M^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G^2 U_{M,\gamma}^{\otimes 2} G + (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G^2 U_M^{\otimes 2} G + 2(U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G^2 (U_{M,\gamma} \otimes U_M) G \right] \tag{H.66}$$

$$= \operatorname{Tr} \left[(U_M^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G U_{M,\gamma}^{\otimes 2} + (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G U_M^{\otimes 2} + 2(U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G (U_M \otimes U_{M,\gamma}) \right] \tag{H.67}$$

$$= \operatorname{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G \left(U_{M,\gamma}^{\otimes 2} (U_M^\dagger)^{\otimes 2} + U_M^{\otimes 2} (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} + 2(U_M \otimes U_{M,\gamma}) (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \right) \right] \tag{H.68}$$

$$= 2 \operatorname{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G J_1 \right] \tag{H.69}$$

を得る. 最後の等号で (H.62) を用いて,

$$J_1 := (U_M \otimes U_{M,\gamma}) (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) - (U_{M,\gamma} \otimes U_M) (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \tag{H.70}$$

とした. 同様に, $\operatorname{Tr} \left[\mathcal{J}_2 \left(\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right) G \right]$ は,

$$\operatorname{Tr} \left[\mathcal{J}_2 \left(\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right) G \right] = 2 \operatorname{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) G J_2 \right] \tag{H.71}$$

となる. ここで,

$$J_2 := (U_{M,\gamma}^\dagger \otimes U_M^\dagger) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) - (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \tag{H.72}$$

とした. ゆえに, (H.70), (H.71) を (H.64) に代入して,

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] - v_\gamma(\rho, O) &= - \frac{2\Delta_d^{(2)}(\rho)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \operatorname{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G J_1 \right] \\
& - \frac{2\Delta_d^{(2)}(O)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \operatorname{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) G J_2 \right] \\
& + \int \nu_M(d\gamma_M) \operatorname{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right]
\end{aligned} \tag{H.73}$$

を得る.

H.4 定理 6.3 の証明

H.4.1 (6.21) の導出

命題 6.2 より,

$$\begin{aligned} \left| \mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] - v_\gamma(\rho, O) \right| &\leq \frac{2\Delta_d^{(2)}(\rho)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G J_1 \right] \right| \\ &\quad + \frac{2\Delta_d^{(2)}(O)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) G J_2 \right] \right| \\ &\quad + \int \nu_M(d\gamma_M) \left| \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right] \right|. \end{aligned} \quad (\text{H.74})$$

(H.74) の各項の被積分関数を評価していく. まず, (H.74) の第 1 項, 第 2 項の被積分関数は,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G J_1 \right] \right| \leq \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G \right\|_2 \|J_1\|_2 = \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \|J_1\|_2 \quad (\text{H.75})$$

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) G J_2 \right] \right| \leq \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) G \right\|_2 \|J_2\|_2 = \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_2 \|J_2\|_2 \quad (\text{H.76})$$

と評価できる. ここで, $\|J_1\|_2^2 = \|J_2\|_2^2$ であり,

$$\|J_1\|_2^2 = \text{Tr} \left[(I_{\mathcal{H}} \otimes U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger - U_M U_{M,\gamma}^\dagger \otimes U_{M,\gamma} U_M^\dagger) (I_{\mathcal{H}} \otimes U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger - U_{M,\gamma} U_M^\dagger \otimes U_M U_{M,\gamma}^\dagger) \right] \quad (\text{H.77})$$

$$\begin{aligned} &= \text{Tr} [I_{\mathcal{H}}] \text{Tr} \left[(U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger)^2 \right] + \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger \right]^2 \\ &\quad - \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right] - \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger \right] \end{aligned} \quad (\text{H.78})$$

$$= d \text{Tr} \left[(U_{M,\gamma}^\dagger U_{M,\gamma})^2 \right] + \text{Tr} \left[U_{M,\gamma}^\dagger U_{M,\gamma} \right]^2 - 2\Re \left(\text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right] \right) \quad (\text{H.79})$$

$$= d \left\| U_{M,\gamma}^\dagger U_{M,\gamma} \right\|_2^2 + \|U_{M,\gamma}\|_2^4 - 2\Re \left(\text{Tr} \left[U_{M,\gamma} U_M^\dagger U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_M U_{M,\gamma}^\dagger \right] \right) \quad (\text{H.80})$$

である. (H.74) の第 3 項の被積分関数は,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right] \right| \leq \left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \right\|_2 \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_2 \quad (\text{H.81})$$

と評価できるが, さらに,

$$\left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \right\|_2 \quad (\text{H.82})$$

$$\leq \left\| (U_M^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_{M,\gamma}^{\otimes 2} \right\|_2 + \left\| (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_M^{\otimes 2} \right\|_2 + 2 \left\| (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \right\|_2 \quad (\text{H.83})$$

$$= \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_{M,\gamma}^{\otimes 2} \right\|_2 + \left\| (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 + 2 \left\| (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \right\|_2 \quad (\text{H.84})$$

$$= 2 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \|U_{M,\gamma}\|_2^2 + 2 \left\| (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \right\|_2 \quad (\text{H.85})$$

$$= 2 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \|U_{M,\gamma}\|_2^2 + 2 \sqrt{\text{Tr} \left[(U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger \otimes I_{\mathcal{H}}) \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right)^\dagger (I_{\mathcal{H}} \otimes U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right]} \quad (\text{H.86})$$

$$\leq 2 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \|U_{M,\gamma}\|_2^2 + 2 \sqrt{\left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2})(U_{M,\gamma}U_{M,\gamma}^\dagger \otimes I_{\mathcal{H}}) \right\|_2 \left\| (I_{\mathcal{H}} \otimes U_{M,\gamma}U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2} \quad (\text{H.87})$$

$$\leq 2 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \left(\|U_{M,\gamma}\|_2^2 + \sqrt{\left\| U_{M,\gamma}U_{M,\gamma}^\dagger \otimes I_{\mathcal{H}} \right\|_2 \left\| I_{\mathcal{H}} \otimes U_{M,\gamma}U_{M,\gamma}^\dagger \right\|_2} \right) \quad (\text{H.88})$$

$$= 2 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \left(\|U_{M,\gamma}\|_2^2 + \sqrt{d} \left\| U_{M,\gamma}^\dagger U_{M,\gamma} \right\|_2 \right) \quad (\text{H.89})$$

と評価できるので,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right] \right| \leq 2 \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_2 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \left(\|U_{M,\gamma}\|_2^2 + \sqrt{d} \left\| U_{M,\gamma}^\dagger U_{M,\gamma} \right\|_2 \right) \quad (\text{H.90})$$

を得る. ゆえに, (H.75), (H.76), (H.90) を (H.74) に代入することで,

$$\begin{aligned} \left| \mathbb{E}_\gamma \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] - v_\gamma(\rho, O) \right| &\leq 2\epsilon_R^{(2)} \epsilon_L^{(2)} \int \nu_M(d\gamma_M) \left(\|U_{M,\gamma}\|_2^2 + \sqrt{d} \left\| U_{M,\gamma}^\dagger U_{M,\gamma} \right\|_2 \right) \\ &\quad + \frac{2\epsilon_L^{(2)} \Delta_d^{(2)}(\rho)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \|J_1\|_2 + \frac{2\epsilon_R^{(2)} \Delta_d^{(2)}(O)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \|J_2\|_2 \end{aligned} \quad (\text{H.91})$$

を得る. ここで,

$$\|J_1\|_2 = \|J_2\|_2 = \sqrt{d \left\| U_{M,\gamma}^\dagger U_{M,\gamma} \right\|_2^2 + \|U_{M,\gamma}\|_2^4 - 2\Re \left(\text{Tr} \left[U_{M,\gamma}U_M^\dagger U_{M,\gamma}U_{M,\gamma}^\dagger \right] \text{Tr} \left[U_MU_M^\dagger \right] \right)} \quad (\text{H.92})$$

と計算できる.

H.4.2 (6.22) の導出

(H.74) の各項の被積分関数を評価していく. まず, (H.74) の第 1 項, 第 2 項の被積分関数は,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G J_1 \right] \right| \leq \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G \right\|_1 \|J_1\|_\infty = \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_1 \|J_1\|_\infty \quad (\text{H.93})$$

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) G J_2 \right] \right| \leq \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) G \right\|_1 \|J_2\|_\infty = \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_1 \|J_2\|_\infty \quad (\text{H.94})$$

と評価できる. (H.74) の第 3 項の被積分関数は,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right] \right| \leq \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_1 \left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \right\|_\infty \quad (\text{H.95})$$

と評価できるが, さらに,

$$\left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \right\|_\infty \quad (\text{H.96})$$

$$\leq \left\| (U_M^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_{M,\gamma}^{\otimes 2} \right\|_\infty + \left\| (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_M^{\otimes 2} \right\|_\infty + 2 \left\| (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \right\|_\infty \quad (\text{H.97})$$

$$= \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_{M,\gamma}^{\otimes 2} \right\|_\infty + \left\| (U_{M,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_\infty + 2 \left\| (U_M^\dagger \otimes U_{M,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) (U_{M,\gamma} \otimes U_M) \right\|_\infty \quad (\text{H.98})$$

$$\leq 2 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_{\infty} \left(\|U_{M,\gamma}\|_{\infty}^2 + \|U_M^{\dagger} \otimes U_{M,\gamma}^{\dagger}\|_{\infty} \|U_{M,\gamma} \otimes U_M\|_{\infty} \right) \quad (\text{H.99})$$

$$= 4 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_{\infty} \|U_{M,\gamma}\|_{\infty}^2 \leq 4 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_1 \|U_{M,\gamma}\|_{\infty}^2 \quad (\text{H.100})$$

と評価できるので,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right] \right| \leq 4 \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_1 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_1 \|U_{M,\gamma}\|_{\infty}^2 \quad (\text{H.101})$$

を得る. (H.74) に (H.93), (H.94), (H.101) を代入して, (D.5) を用いると,

$$\begin{aligned} \left| \mathbb{E}_{\gamma} \left[\left(\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right)^2 \right] - v_{\gamma}(\rho, O) \right| &\leq 4 \epsilon_R^{(2)} \epsilon_L^{(2)} \|O\|_1^2 \int \nu_M(d\gamma_M) \|U_{M,\gamma}\|_{\infty}^2 \\ &\quad + \frac{2 \epsilon_L^{(2)} \Delta_d^{(2)}(\rho) \|O\|_1^2}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \|J_1\|_{\infty} + \frac{2 \epsilon_R^{(2)} \Delta_d^{(2)}(O)}{d^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \|J_2\|_{\infty} \end{aligned} \quad (\text{H.102})$$

を得る.

H.5 系 6.4 の証明

定理 6.1 に対して,

$$\text{Tr} \left[U_{j,\gamma} U_{j,\gamma}^{\dagger} \right] - \frac{\left| \text{Tr} \left[U_{j,\gamma} U_j^{\dagger} \right] \right|^2}{2^n} = \text{Tr} \left[V_j^2 \right] - \frac{\text{Tr} \left[V_j \right]^2}{2^n} = \Delta_{2^n}^{(2)}(V_j) \quad (\text{H.103})$$

を用いれば,

$$\mathbb{E}_{\gamma} \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = 0, \quad \mathbb{V}_{\gamma} \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \frac{2^{n+1} \Delta_{2^n}^{(2)}(\rho) \Delta_{2^n}^{(2)}(O) \Delta_{2^n}^{(2)}(V_j)}{(4^n - 1)^2} \quad (\text{H.104})$$

を得る.

H.6 系 6.5 の証明

H.6.1 (6.30) の導出

命題 6.2 より,

$$\mathbb{E}_{\gamma} \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] = \int_0^{2\pi} \frac{d\gamma}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \gamma} \text{Tr} \left[\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^{\dagger}, \nu_L}^{(1)}(O) U_j(\gamma) \mathcal{A}_{U_R(\gamma_R), \nu_R}^{(1)}(\rho) (U_j(\gamma))^{\dagger} \right] \quad (\text{H.105})$$

$$\begin{aligned} &= \text{Tr} \left[\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^{\dagger}, \nu_L}^{(1)}(O) U_j(2\pi) \mathcal{A}_{U_R(\gamma_R), \nu_R}^{(1)}(\rho) (U_j(2\pi))^{\dagger} \right] \\ &\quad - \text{Tr} \left[\mathcal{A}_{U_L(\gamma_L)^{\dagger}, \nu_L}^{(1)}(O) U_j(0) \mathcal{A}_{U_R(\gamma_R), \nu_R}^{(1)}(\rho) (U_j(0))^{\dagger} \right] \end{aligned} \quad (\text{H.106})$$

$$= 0 \quad (\text{H.107})$$

となる. 最後の等号で, $V_j^2 = I$ より $U_j(\gamma) = \cos \gamma I + \sin \gamma V_j$ であることから, $U_j(0) = U_j(2\pi)$ であることを用いた.

H.6.2 (6.31) の導出

命題 6.2 より,

$$\begin{aligned} \left| \mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] - v_\gamma(\rho, O) \right| &\leq \frac{2\Delta_{2^n}^{(2)}(\rho)}{4^n - 1} \int_0^{2\pi} \frac{d\gamma}{2\pi} \left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G J_1 \right] \right| \\ &\quad + \frac{2\Delta_{2^n}^{(2)}(O)}{4^n - 1} \int_0^{2\pi} \frac{d\gamma}{2\pi} \left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) G J_2 \right] \right| \\ &\quad + \int_0^{2\pi} \frac{d\gamma}{2\pi} \left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right) \right] \right| \end{aligned} \quad (\text{H.108})$$

を得る. ここで,

$$\mathcal{J}_1(\cdot) := (U_j^\dagger)^{\otimes 2}(\cdot)U_{j,\gamma}^{\otimes 2} + (U_{j,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2}(\cdot)U_j^{\otimes 2} + 2(U_j^\dagger \otimes U_{j,\gamma}^\dagger)(\cdot)(U_{j,\gamma} \otimes U_j) \quad (\text{H.109})$$

$$J_1 := (U_j \otimes U_{j,\gamma})(U_j^\dagger \otimes U_{j,\gamma}^\dagger) - (U_{j,\gamma} \otimes U_j)(U_j^\dagger \otimes U_{j,\gamma}^\dagger) = I \otimes I - V_j \otimes V_j \quad (\text{H.110})$$

$$J_2 := (U_{j,\gamma}^\dagger \otimes U_j^\dagger)(U_{j,\gamma} \otimes U_j) - (U_j^\dagger \otimes U_{j,\gamma}^\dagger)(U_{j,\gamma} \otimes U_j) = I \otimes I - V_j \otimes V_j \quad (\text{H.111})$$

とした. (H.108) の各項の被積分関数を評価していく. 第 1 項と第 2 項は, 定理 6.3 の証明と同様に評価する. 第 3 項は, $U_j(\gamma)$ の具体的な表式を用いることで, 定理 6.3 より強い評価を与える.

まず, (H.108) の第 1 項, 第 2 項の被積分関数は, (H.75), (H.76) 同様に,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) G J_1 \right] \right| \leq \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \|J_1\|_2 = \sqrt{2^{n+1}\Delta_{2^n}^{(2)}(V_j)} \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \quad (\text{H.112})$$

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) G J_2 \right] \right| \leq \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_2 \|J_2\|_2 = \sqrt{2^{n+1}\Delta_{2^n}^{(2)}(V_j)} \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_2 \quad (\text{H.113})$$

と評価できる. 最後の等号で,

$$\|J_1\|_2 = \|J_2\|_2 = \sqrt{\text{Tr}[(I \otimes I - V_j \otimes V_j)^2]} = \sqrt{2^{2n+1} - 2\text{Tr}[V_j]^2} = \sqrt{2^{n+1}\Delta_{2^n}^{(2)}(V_j)} \quad (\text{H.114})$$

を用いた. (H.108) の第 3 項の被積分関数は,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right] \right| \leq \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_2 \left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \right\|_2 \quad (\text{H.115})$$

と評価できるが, さらに, $\left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \right\|_2$ は,

$$\begin{aligned} \left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \right\|_2 &\leq \left\| (U_j^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_{j,\gamma}^{\otimes 2} \right\|_2 + \left\| (U_{j,\gamma}^\dagger)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) U_j^{\otimes 2} \right\|_2 \\ &\quad + 2 \left\| (U_j^\dagger \otimes U_{j,\gamma}^\dagger) \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) (U_{j,\gamma} \otimes U_j) \right\|_2 \end{aligned} \quad (\text{H.116})$$

$$= 4 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \quad (\text{H.117})$$

と評価できるので,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right) \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right] \right| \leq 4 \left\| \mathcal{A}_L^{(2)}(O^{\otimes 2}) \right\|_2 \left\| \mathcal{A}_R^{(2)}(\rho^{\otimes 2}) \right\|_2 \quad (\text{H.118})$$

を得る. ゆえに, (H.112), (H.113), (H.118) を (H.108) に代入することで,

$$\left| \mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] - v_\gamma(\rho, O) \right| \leq 4\epsilon_R^{(2)} \epsilon_L^{(2)} + \frac{\sqrt{2^{n+3} \Delta_{2^n}^{(2)}(V_j)}}{4^n - 1} \left(\epsilon_R^{(2)} \Delta_{2^n}^{(2)}(O) + \epsilon_L^{(2)} \Delta_{2^n}^{(2)}(\rho) \right) \quad (\text{H.119})$$

を得る.

H.6.3 (6.32) の導出

定理 6.3 に対して,

$$\|U_{j,\gamma}\|_\infty = \|V_j\|_\infty = 1, \quad \|J_1\|_\infty = \|J_2\|_\infty = \|I \otimes I - V_j \otimes V_j\|_\infty \leq 2 \quad (\text{H.120})$$

を用いれば,

$$\left| \mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C_{\text{RPQC}}(\gamma)}{\partial \gamma} \right] - v_\gamma(\rho, O) \right| \leq 4 \left(\epsilon_R^{(2)} \epsilon_L^{(2)} \|O\|_1^2 + \frac{\epsilon_L^{(2)} \Delta_{2^n}^{(2)}(\rho) \|O\|_1^2 + \epsilon_R^{(2)} \Delta_{2^n}^{(2)}(O)}{4^n - 1} \right) \quad (\text{H.121})$$

を得る.

H.7 (6.37) の導出

U_R, U_L, U_M は粒子数を保存するので, $\mathcal{H} = \bigoplus_{m=0}^n \mathcal{H}_{n,m}$ に対して, ブロック対角化可能, つまり

$$U_R = \bigoplus_{m=0}^n U_R^{(m)}, \quad U_M = \bigoplus_{m=0}^n U_M^{(m)}, \quad U_L = \bigoplus_{m=0}^n U_L^{(m)} \quad (\text{H.122})$$

である. また, ρ の粒子数が m であるとき,

$$\rho = 0 \oplus 0 \oplus \dots \oplus \rho^{(m)} \oplus \dots \oplus 0 = \rho^{(m)} \oplus 0 \quad (\text{H.123})$$

である. したがって, コスト関数は,

$$C(\boldsymbol{\theta}, \phi) = \text{Tr} \left[A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \phi)^\dagger \rho A_{n,L}(\boldsymbol{\theta}, \phi) O \right] \quad (\text{H.124})$$

$$= \text{Tr} \left[U_L^\dagger O U_L U_M U_R \rho U_R^\dagger U_M^\dagger \right] \quad (\text{H.125})$$

$$= \text{Tr} \left[(U_L^{(m)\dagger} \oplus 0) O (U_L^{(m)} \oplus 0) (\rho \oplus 0) (U_R^{(m)\dagger} \oplus 0) (U_M^{(m)\dagger} \oplus 0) \right] \quad (\text{H.126})$$

$$= \text{Tr} \left[(U_L^{(m)\dagger} O^{(m)} U_L^{(m)} \oplus 0) (U_M^{(m)} \oplus 0) (U_R^{(m)} \oplus 0) (\rho \oplus 0) (U_R^{(m)\dagger} \oplus 0) (U_M^{(m)\dagger} \oplus 0) \right] \quad (\text{H.127})$$

$$= \text{Tr} \left[U_L^{(m)\dagger} O^{(m)} U_L^{(m)} U_M^{(m)} U_R^{(m)} \rho^{(m)} U_R^{(m)\dagger} U_M^{(m)\dagger} \right] \quad (\text{H.128})$$

を得る. ここで,

$$(U_L^{(m)\dagger} \oplus 0) O (U_L^{(m)} \oplus 0) = \begin{pmatrix} U_L^{(m)\dagger} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} O^{(m)} & \dots \\ \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_L^{(m)} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = U_L^{(m)\dagger} O^{(m)} U_L^{(m)} \oplus 0 \quad (\text{H.129})$$

を用いた.

H.8 系 6.6 の証明

いま, $U_M(\theta, \phi)$ は,

$$U_M(\theta, \phi) = A(\theta, \phi) \otimes I_{\mathcal{H}_{\bar{A}}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sin \theta & e^{i\phi} \cos \theta & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes I_{\mathcal{H}_{\bar{A}}} \quad (\text{H.130})$$

である. ここで, $I_{\mathcal{H}_{\bar{A}}}$ は, A ゲートが作用していない量子ビットに作用する恒等演算子とした. よって,

$$U_{M,\theta} = \frac{\partial U_M(\gamma_M)}{\partial \theta} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -e^{i\phi} \sin \theta & 0 \\ 0 & -e^{-i\phi} \sin \theta & -\cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes I_{\mathcal{H}_{\bar{A}}}, \quad (\text{H.131})$$

$$U_{M,\phi} = \frac{\partial U_M(\gamma_M)}{\partial \phi} = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\phi} \cos \theta & 0 \\ 0 & -e^{-i\phi} \cos \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes I_{\mathcal{H}_{\bar{A}}} \quad (\text{H.132})$$

である.

まず, $m = 0, n$ の場合だけ考える. 粒子数が 0 の量子状態は $(|0\rangle\langle 0|)^{\otimes n}$ に限る. したがって, 入力状態 ρ の粒子数 m が 0 のとき, 粒子数 0 の出力状態 $A_{n,L}(\theta, \phi)^\dagger \rho A_{n,L}(\theta, \phi)$ は θ, ϕ に依らない量子状態 $(|0\rangle\langle 0|)^{\otimes n}$ となる. ゆえに, コスト関数 $C(\theta, \phi)$ が θ, ϕ に依らない定数となる. 同様に, 粒子数が n の量子状態は $(|1\rangle\langle 1|)^{\otimes n}$ に限るので, 入力状態 ρ の粒子数 m が n の場合も, コスト関数 $C(\theta, \phi)$ は θ, ϕ に依らない定数になる. したがって, $\partial_\gamma C(\theta, \phi) = 0$ となり, (6.38), (6.39) が従う. 以下では, $m = 1, 2, \dots, n-1$ の場合を示す.

H.8.1 (6.38) の導出

まず, $\gamma = \theta$ の場合を考える. 定理 6.1 より,

$$\mathbb{E}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right] = \int_{[0, 2\pi)} \frac{d\theta}{2\pi} \int_{[0, 2\pi)} \frac{d\phi}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \theta} \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(1)}(O^{(m)}) U_M(\theta, \phi) \mathcal{A}_R^{(1)}(\rho^{(m)}) U_M(\theta, \phi)^\dagger \right] \quad (\text{H.133})$$

$$= \int_{[0, 2\pi)} \frac{d\phi}{2\pi} \left(\text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(1)}(O^{(m)}) U_M(2\pi, \phi) \mathcal{A}_R^{(1)}(\rho^{(m)}) U_M(2\pi, \phi)^\dagger \right] \right. \\ \left. - \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(1)}(O^{(m)}) U_M(0, \phi) \mathcal{A}_R^{(1)}(\rho^{(m)}) U_M(0, \phi)^\dagger \right] \right) \quad (\text{H.134})$$

$$= 0 \quad (\text{H.135})$$

を得る. ここで, $U_M(2\pi, \phi) = U_M(0, \phi)$ であることを用いた. $\gamma = \phi$ の場合も同様に, $U_M(\theta, 2\pi) = U_M(\theta, 0)$ であることから,

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\theta}, \phi} \left[\frac{\partial C(\boldsymbol{\theta}, \phi)}{\partial \phi} \right] = 0 \quad (\text{H.136})$$

を得る.

H.8.2 (6.39) の導出

定理 6.1 より,

$$\mathbb{V}_{\boldsymbol{\theta}, \phi} \left[\frac{\partial C(\boldsymbol{\theta}, \phi)}{\partial \gamma} \right] = \frac{2d_{n,m} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(\rho^{(m)}) \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(O^{(m)})}{(d_{n,m}^2 - 1)^2} \int \nu_M(d\gamma_M) \left(\text{Tr} \left[U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right] - \frac{|\text{Tr} \left[U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right]|^2}{d_{n,m}} \right) \quad (\text{H.137})$$

である. ここで, (H.130), (H.131), (H.132) より,

$$\text{Tr} \left[U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right] = \text{Tr} \left[U_M^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right] = 0 \quad (\text{H.138})$$

であり, また,

$$a_\gamma(\gamma_M) := \begin{cases} 1 & (\gamma = \theta) \\ \cos^2 \theta & (\gamma = \phi) \end{cases} \quad (\text{H.139})$$

とすると,

$$U_{M,\gamma} U_{M,\gamma}^\dagger = a_\gamma(\gamma_M) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes I_{\mathcal{H}_X} \quad (\text{H.140})$$

であるから,

$$\text{Tr} \left[U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right] = 2d_{n-2,m-1} a_\gamma(\gamma_M) \quad (\text{H.141})$$

を得る. (H.138), (H.141) を (H.137) に代入して,

$$\mathbb{V}_{\boldsymbol{\theta}, \phi} \left[\frac{\partial C(\boldsymbol{\theta}, \phi)}{\partial \gamma} \right] = \frac{4d_{n,m} d_{n-2,m-1} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(\rho^{(m)}) \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(O^{(m)})}{(d_{n,m}^2 - 1)^2} \int \nu_M(d\gamma_M) a_\gamma(\gamma_M) \quad (\text{H.142})$$

$$= \frac{4b_\gamma d_{n,m} d_{n-2,m-1} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(\rho^{(m)}) \Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(O^{(m)})}{(d_{n,m}^2 - 1)^2} \quad (\text{H.143})$$

を得る. ここで,

$$b_\gamma := \int \nu_M(d\gamma_M) a_\gamma(\gamma_M) = \int_{[0,2\pi)} \frac{d\theta}{2\pi} \int_{[0,2\pi)} \frac{d\phi}{2\pi} a_\gamma(\gamma_M) = \begin{cases} 1 & (\gamma = \theta) \\ \frac{1}{2} & (\gamma = \phi) \end{cases}. \quad (\text{H.144})$$

とした.

H.9 系 6.7 の証明

$m < 0, m > n$ なる整数 m に対して, $d_{n,m} = {}_n C_m = 0$ と定義する.

H.9.1 (6.44) の導出

$\Delta_{d_{n,m}}^{(2)} (P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{global}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger)$ を求めればよい. まず,

$$P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{global}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger = -P_{n,m} \left(\bigotimes_{j=0}^{n-1} |\tau_j\rangle \langle \tau_j| \right) P_{n,m}^\dagger = - \bigotimes_{j=0}^{n-1} |\tau_j\rangle \langle \tau_j| \quad (\text{H.145})$$

であるから,

$$\text{Tr} [P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{global}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger] = -1, \quad \text{Tr} [(P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{global}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger)^2] = 1 \quad (\text{H.146})$$

を得る. したがって, 求めたかった $\Delta_{d_{n,m}}^{(2)} (P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{global}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger)$ は,

$$\Delta_{d_{n,m}}^{(2)} (P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{global}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger) = \frac{d_{n,m} - 1}{d_{n,m}} \quad (\text{H.147})$$

となる. ゆえに,

$$\mathbb{V}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C_{\text{global}}}{\partial \gamma} \right] = \frac{4b_\gamma d_{n,m} d_{n-2,m-1}}{(d_{n,m}^2 - 1)^2} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)} (\rho) \Delta_{d_{n,m}}^{(2)} (P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{global}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger) \quad (\text{H.148})$$

$$= \frac{4b_\gamma d_{n,m} d_{n-2,m-1}}{(d_{n,m}^2 - 1)^2} \frac{d_{n,m} - 1}{d_{n,m}} \frac{d_{n,m} - 1}{d_{n,m}} = \frac{4b_\gamma d_{n-2,m-1}}{d_{n,m} (d_{n,m} + 1)^2} \quad (\text{H.149})$$

を得る.

H.9.2 (6.45) の導出

$\Delta_{d_{n,m}}^{(2)} (P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{local}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger)$ を求めればよい. まず,

$$P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{local}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger = -\frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} P_{n,m} X_{n,m} (I^{\otimes j} \otimes |0\rangle \langle 0| \otimes I^{\otimes n-j-1}) X_{n,m} P_{n,m}^\dagger \quad (\text{H.150})$$

$$= -\frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} P_{n,m} (I^{\otimes j} \otimes |\tau_j\rangle \langle \tau_j| \otimes I^{\otimes n-j-1}) P_{n,m}^\dagger \quad (\text{H.151})$$

である. さらに,

$$\text{Tr} [P_{n,m} (I^{\otimes j} \otimes |\tau_j\rangle \langle \tau_j| \otimes I^{\otimes n-j-1}) P_{n,m}^\dagger] = \begin{cases} {}_{n-1} C_m & (\tau_j = 0) \\ {}_{n-1} C_{m-1} & (\tau_j = 1) \end{cases} \quad (\text{H.152})$$

が成立するので,

$$\text{Tr} [P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{local}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger] = -\frac{1}{n} \left(\sum_{\{j|\tau_j=0\}} {}_{n-1} C_m + \sum_{\{j|\tau_j=1\}} {}_{n-1} C_{m-1} \right) \quad (\text{H.153})$$

$$= -\frac{1}{n} \left((n-m)_{n-1} C_m + m_{n-1} C_{m-1} \right) \quad (\text{H.154})$$

$$= -\frac{n-1 C_{m-1} \left((n-m)^2 + m^2 \right)}{mn} \quad (\text{H.155})$$

を得る. ここで,

$$|\{j \mid \tau_j = 0\}| = n - m, \quad |\{j \mid \tau_j = 1\}| = m \quad (\text{H.156})$$

を用いた. また, (H.151) より,

$$\begin{aligned} & (P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{local}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger)^2 \\ &= \frac{1}{n^2} \sum_{j,k=0}^{n-1} P_{n,m} (I^{\otimes j} \otimes |\tau_j\rangle \langle \tau_j| \otimes I^{\otimes n-j-1}) P_{n,m}^\dagger P_{n,m} (I^{\otimes k} \otimes |\tau_k\rangle \langle \tau_k| \otimes I^{\otimes n-k-1}) P_{n,m}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{H.157})$$

を得る. さらに, $j = k$ であれば,

$$\text{Tr} [P_{n,m} (I^{\otimes j} \otimes |\tau_j\rangle \langle \tau_j| \otimes I^{\otimes n-j-1}) P_{n,m}^\dagger P_{n,m} (I^{\otimes k} \otimes |\tau_k\rangle \langle \tau_k| \otimes I^{\otimes n-k-1}) P_{n,m}^\dagger] = \begin{cases} n-1 C_m & (\tau_j = 0) \\ n-1 C_{m-1} & (\tau_j = 1) \end{cases} \quad (\text{H.158})$$

が成立し, $j \neq k$ であれば,

$$\text{Tr} [P_{n,m} (I^{\otimes j} \otimes |\tau_j\rangle \langle \tau_j| \otimes I^{\otimes n-j-1}) P_{n,m}^\dagger P_{n,m} (I^{\otimes k} \otimes |\tau_k\rangle \langle \tau_k| \otimes I^{\otimes n-k-1}) P_{n,m}^\dagger] = \begin{cases} n-2 C_m & (\tau_j = \tau_k = 0) \\ n-2 C_{m-1} & (\tau_j \neq \tau_k) \\ n-2 C_{m-2} & (\tau_j = \tau_k = 1) \end{cases} \quad (\text{H.159})$$

が成立するので,

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left[(P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{local}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger)^2 \right] \\ &= \frac{1}{n^2} \left(\sum_{\{(j,k) \mid j=k, \tau_j=0\}} n-1 C_m + \sum_{\{(j,k) \mid j=k, \tau_j=1\}} n-1 C_{m-1} \right. \\ & \quad \left. + \sum_{\{(j,k) \mid j \neq k, \tau_j = \tau_k = 0\}} n-2 C_m + \sum_{\{(j,k) \mid j \neq k, \tau_j \neq \tau_k\}} n-2 C_{m-1} + \sum_{\{(j,k) \mid j \neq k, \tau_j = \tau_k = 1\}} n-2 C_{m-2} \right) \quad (\text{H.160}) \\ &= \frac{1}{n^2} \left((n-m)_{n-1} C_m + m_{n-1} C_{m-1} + (n-m)(n-m-1)_{n-2} C_m + 2m(n-m)_{n-2} C_{m-1} + m(m-1)_{n-2} C_{m-2} \right) \end{aligned} \quad (\text{H.161})$$

$$= n-1 C_{m-1} \frac{(n-m)^2 + m^2}{mn^2} + n-2 C_{m-1} \frac{m^2 \left((n-m)^2 + (m-1)^2 \right) + (n-m)^2 \left(m^2 + (n-m-1)^2 \right)}{mn^2(n-m)} \quad (\text{H.162})$$

を得る. ここで,

$$|\{(j,k) \mid j = k, \tau_j = 0\}| = n - m, \quad (\text{H.163})$$

$$|\{(j, k) \mid j = k, \tau_j = 1\}| = m, \quad (\text{H.164})$$

$$|\{(j, k) \mid j \neq k, \tau_j = \tau_k = 0\}| = (n - m)(n - m - 1), \quad (\text{H.165})$$

$$|\{(j, k) \mid j \neq k, \tau_j = \tau_k = 1\}| = m(m - 1), \quad (\text{H.166})$$

$$|\{(j, k) \mid j \neq k, \tau_j \neq \tau_k\}| = 2m(n - m) \quad (\text{H.167})$$

を用いた。したがって、求めたかった $\Delta_{d_{n,m}}^{(2)} (P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{local}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger)$ は、(H.155), (H.162) より、

$$\begin{aligned} & \Delta_{d_{n,m}}^{(2)} (P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{local}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger) \\ &= {}_{n-2}C_{m-1} \frac{m^2 \left((n-m)^2 + (m-1)^2 \right) + (n-m)^2 \left(m^2 + (n-m-1)^2 \right)}{mn^2(n-m)} \\ & \quad - {}_{n-1}C_{m-1} \frac{\left((n-m)^2 + m^2 \right) \left((n-m)^2 + m^2 - n \right)}{mn^3} \end{aligned} \quad (\text{H.168})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{{}_{n-2}C_{m-1}}{mn^2(n-m)} \left(m^2 \left((n-m)^2 + (m-1)^2 \right) + (n-m)^2 \left(m^2 + (n-m-1)^2 \right) \right. \\ & \quad \left. - \frac{n-1}{n} \left((n-m)^2 + m^2 \right) \left((n-m)^2 + m^2 - n \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{H.169})$$

$$= \frac{{}_{n-2}C_{m-1}}{mn^3(n-m)} \left((n-m)^4 + (n-m)^2 (3m^2 + 2mn - n^2) \right) = \frac{4m(n-m) {}_{n-2}C_{m-1}}{n^3} \quad (\text{H.170})$$

となる。ゆえに、

$$\mathbb{V}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C_{\text{local}}}{\partial \gamma} \right] = \frac{4b_\gamma d_{n,m} d_{n-2,m-1}}{(d_{n,m}^2 - 1)^2} \Delta_{d_{n,m}}^{(2)} (\rho) \Delta_{d_{n,m}}^{(2)} (P_{n,m} X_{n,m} O_{\text{local}} X_{n,m} P_{n,m}^\dagger) \quad (\text{H.171})$$

$$= \frac{4b_\gamma d_{n,m} d_{n-2,m-1}}{(d_{n,m}^2 - 1)^2} \frac{d_{n,m} - 1}{d_{n,m}} \frac{4m(n-m) {}_{n-2}C_{m-1}}{n^3} = \frac{16b_\gamma d_{n-2,m-1}^2 m(n-m)}{(d_{n,m} + 1)(d_{n,m}^2 - 1)n^3} \quad (\text{H.172})$$

を得る。

H.10 系 6.8 の証明

H.10.1 (6.50) の導出

まず、 $\gamma = \theta$ の場合を考える。定理 6.1 より、

$$\mathbb{E}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right] = \int_{[0, 2\pi)} \frac{d\theta}{2\pi} \int_{[0, 2\pi)} \frac{d\phi}{2\pi} \frac{\partial}{\partial \theta} \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(1)} \left(O^{(m)} \right) U_M(\theta, \phi) \mathcal{A}_R^{(1)} \left(\rho^{(m)} \right) U_M(\theta, \phi)^\dagger \right] \quad (\text{H.173})$$

$$\begin{aligned} &= \int_{[0, 2\pi)} \frac{d\phi}{2\pi} \left(\text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(1)} \left(O^{(m)} \right) U_M(2\pi, \phi) \mathcal{A}_R^{(1)} \left(\rho^{(m)} \right) U_M(2\pi, \phi)^\dagger \right] \right. \\ & \quad \left. - \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(1)} \left(O^{(m)} \right) U_M(0, \phi) \mathcal{A}_R^{(1)} \left(\rho^{(m)} \right) U_M(0, \phi)^\dagger \right] \right) \end{aligned} \quad (\text{H.174})$$

$$= 0 \quad (\text{H.175})$$

を得る. ここで, $U_M(2\pi, \phi) = U_M(0, \phi)$ であることを用いた. $\gamma = \phi$ の場合も同様に, $U_M(\theta, 2\pi) = U_M(\theta, 0)$ であることから,

$$\mathbb{E}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C(\theta, \phi)}{\partial \phi} \right] = 0 \quad (\text{H.176})$$

を得る.

H.10.2 (6.51) の導出

命題 6.2 より,

$$\begin{aligned} \left| \mathbb{V}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C(\theta, \phi)}{\partial \gamma} \right] - v_\gamma(\rho^{(m)}, O^{(m)}) \right| &\leq \frac{2\Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(\rho^{(m)})}{d_{n,m}^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) GJ_1 \right] \right| \\ &\quad + \frac{2\Delta_{d_{n,m}}^{(2)}(O^{(m)})}{d_{n,m}^2 - 1} \int \nu_M(d\gamma_M) \left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) GJ_2 \right] \right| \\ &\quad + \int \nu_M(d\gamma_M) \left| \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right) \mathcal{A}_R^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right] \right| \end{aligned} \quad (\text{H.177})$$

である. ここで,

$$\mathcal{J}_1(\cdot) := \left(U_M^{(m)\dagger} \right)^{\otimes 2}(\cdot) \left(U_{M,\gamma}^{(m)} \right)^{\otimes 2} + \left(U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right)^{\otimes 2}(\cdot) \left(U_M^{(m)} \right)^{\otimes 2} + 2 \left(U_M^{(m)\dagger} \otimes U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right)(\cdot) \left(U_{M,\gamma}^{(m)} \otimes U_M^{(m)} \right) \quad (\text{H.178})$$

$$J_1 := \left(U_M^{(m)} \otimes U_{M,\gamma}^{(m)} \right) \left(U_M^{(m)\dagger} \otimes U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right) - \left(U_{M,\gamma}^{(m)} \otimes U_M^{(m)} \right) \left(U_M^{(m)\dagger} \otimes U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right) \quad (\text{H.179})$$

$$J_2 := \left(U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \otimes U_M^{(m)\dagger} \right) \left(U_{M,\gamma}^{(m)} \otimes U_M^{(m)} \right) - \left(U_M^{(m)\dagger} \otimes U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right) \left(U_{M,\gamma}^{(m)} \otimes U_M^{(m)} \right) \quad (\text{H.180})$$

とした. (H.177) の各項の被積分関数を評価していく. 第 1 項と第 2 項は, 定理 6.3 の証明と同様に評価する. 第 3 項は, $U_M(\gamma_M)$ の具体的な表式を用いることで, 定理 6.3 より強い評価を与える.

まず, (H.177) の第 1 項, 第 2 項の被積分関数は, (H.75), (H.76) 同様に,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) GJ_1 \right] \right| \leq \left\| \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \|J_1\|_2 = a_\gamma(\gamma_M) d_{n-2,m-1} \sqrt{4 + \frac{2n(n-1)}{m(m-n)}} \left\| \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \quad (\text{H.181})$$

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{A}_R^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) GJ_2 \right] \right| \leq \left\| \mathcal{A}_R^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \|J_2\|_2 = a_\gamma(\gamma_M) d_{n-2,m-1} \sqrt{4 + \frac{2n(n-1)}{m(m-n)}} \left\| \mathcal{A}_R^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \quad (\text{H.182})$$

と評価できる. 最後の等号で,

$$\left\| U_{M,\gamma}^{(m)} \right\|_2^4 = \text{Tr} \left[U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} U_{M,\gamma}^{(m)} \right]^2 = 4d_{n-2,m-1}^2 a_\gamma(\gamma_M)^2, \quad (\text{H.183})$$

$$\left\| U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} U_{M,\gamma}^{(m)} \right\|_2^2 = \text{Tr} \left[U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} U_{M,\gamma}^{(m)} \right] = 2d_{n-2,m-1} a_\gamma(\gamma_M)^2, \quad (\text{H.184})$$

$$\text{Tr} \left[U_M^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right] = 0 \quad (\text{H.185})$$

より導かれる

$$\|J_1\|_2 = \|J_2\|_2 = \sqrt{d_{n,m} \left\| U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} U_{M,\gamma}^{(m)} \right\|_2^2 + \left\| U_{M,\gamma}^{(m)} \right\|_2^4 - 2\Re \left(\text{Tr} \left[U_{M,\gamma}^{(m)} U_M^{(m)\dagger} U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right] \text{Tr} \left[U_M^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right] \right)} \quad (\text{H.186})$$

$$= a_\gamma(\gamma_M) d_{n-2,m-1} \sqrt{4 + \frac{2n(n-1)}{m(m-n)}} \quad (\text{H.187})$$

を用いた. (H.177) の第 3 項の被積分関数は,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right) \mathcal{A}_R^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right] \right| \leq \left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right) \right\|_2 \left\| \mathcal{A}_R^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \quad (\text{H.188})$$

と評価できるが, さらに, $\left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_R^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right) \right\|_2$ は,

$$\begin{aligned} \left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right) \right\|_2 &\leq \left\| \left(U_M^{(m)\dagger} \right)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \left(U_{M,\gamma}^{(m)} \right)^{\otimes 2} \right\|_2 \\ &\quad + \left\| \left(U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right)^{\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \left(U_M^{(m)} \right)^{\otimes 2} \right\|_2 \\ &\quad + 2 \left\| \left(U_M^{(m)\dagger} \otimes U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right) \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \left(U_{M,\gamma}^{(m)} \otimes U_M^{(m)} \right) \right\|_2 \end{aligned} \quad (\text{H.189})$$

$$\begin{aligned} &= \left\| \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) U_{M,\gamma}^{(m)\otimes 2} \right\|_2 + \left\| U_{M,\gamma}^{(m)\dagger\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \\ &\quad + 2 \left\| \left(U_M^{(m)\dagger} \otimes U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right) \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \left(U_{M,\gamma}^{(m)} \otimes U_M^{(m)} \right) \right\|_2 \end{aligned} \quad (\text{H.190})$$

と評価できる. (H.190) の第 1 項は, $O \leq U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \leq a_\gamma(\gamma_M) I_{\mathcal{H}_{n,m}}$ であることと補題 H.4 より,

$$\left\| \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) U_{M,\gamma}^{(m)\otimes 2} \right\|_2 = \sqrt{\text{Tr} \left[\left(\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right)^\dagger \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \left(U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right)^{\otimes 2} \right]} \quad (\text{H.191})$$

$$\leq a_\gamma(\gamma_M) \left\| \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \quad (\text{H.192})$$

と評価できる. 同様に, (H.190) の第 2 項は,

$$\left\| U_{M,\gamma}^{(m)\dagger\otimes 2} \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \leq a_\gamma(\gamma_M) \left\| \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \quad (\text{H.193})$$

と評価できる. (H.190) の第 3 項は, $0 \leq I_{\mathcal{H}_{n,m}} \otimes U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \leq a_\gamma(\gamma_M) I_{\mathcal{H}_{n,m}}^{\otimes 2}$, $0 \leq U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \otimes I_{\mathcal{H}_{n,m}} \leq a_\gamma(\gamma_M) I_{\mathcal{H}_{n,m}}^{\otimes 2}$ であることと補題 H.4 より,

$$\left\| \left(U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \otimes U_M^{(m)\dagger} \right) \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \left(U_M^{(m)} \otimes U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right) \right\|_2 \quad (\text{H.194})$$

$$= \sqrt{\text{Tr} \left[\left(\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right)^\dagger \left(U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \otimes I_{\mathcal{H}_{n,m}} \right) \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \left(I_{\mathcal{H}_{n,m}} \otimes U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \right) \right]} \quad (\text{H.195})$$

$$\leq \sqrt{a_\gamma(\gamma_M)} \sqrt{\text{Tr} \left[\left(\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right)^\dagger \left(U_{M,\gamma}^{(m)} U_{M,\gamma}^{(m)\dagger} \otimes I_{\mathcal{H}_{n,m}} \right) \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right]} \quad (\text{H.196})$$

$$\leq a_\gamma(\gamma_M) \sqrt{\text{Tr} \left[\left(\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right)^\dagger \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right]} = a_\gamma(\gamma_M) \left\| \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \quad (\text{H.197})$$

と評価できる. よって, (H.192), (H.193), (H.197) を (H.190) に代入して,

$$\left\| \mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right) \right\|_2 \leq 4a_\gamma(\gamma_M) \left\| \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \quad (\text{H.198})$$

を得る. したがって, (H.188) より, (H.177) の第 3 項の被積分関数は,

$$\left| \text{Tr} \left[\mathcal{J}_1 \left(\mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right) \mathcal{A}_R^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right] \right| \leq 4a_\gamma(\gamma_M) \left\| \mathcal{A}_L^{(2)} \left((O^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \left\| \mathcal{A}_R^{(2)} \left((\rho^{(m)})^{\otimes 2} \right) \right\|_2 \quad (\text{H.199})$$

と評価できる. ゆえに, (H.181), (H.182), (H.199) を (H.177) に代入することで,

$$\begin{aligned} & \left| \mathbb{V}_{\theta, \phi} \left[\frac{\partial C(\theta, \phi)}{\partial \gamma} \right] - v_\gamma^{(m)} \left(\rho^{(m)}, O^{(m)} \right) \right| \\ & \leq 2b_\gamma \left(2\epsilon_R^{(2)} \epsilon_L^{(2)} + \frac{d_{n-2, m-1}}{d_{n, m}^2 - 1} \sqrt{4 + \frac{2n(n-1)}{m(n-m)}} \left(\epsilon_R^{(2)} \Delta_{d_{n, m}}^{(2)} \left(O^{(m)} \right) + \epsilon_L^{(2)} \Delta_{d_{n, m}}^{(2)} \left(\rho^{(m)} \right) \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{H.200})$$

を得る. ここで,

$$b_\gamma = \int \nu_M(d\gamma_M) a_\gamma(\gamma_M) = \int_{[0, 2\pi)} \frac{d\theta}{2\pi} \int_{[0, 2\pi)} \frac{d\phi}{2\pi} a_\gamma(\theta, \phi) = \begin{cases} 1 & (\gamma = \theta) \\ \frac{1}{2} & (\gamma = \phi) \end{cases} \quad (\text{H.201})$$

とした.

H.10.3 (6.52) の導出

(H.140) より,

$$\left\| U_{M, \gamma}^{(m)} \right\|_\infty^2 = a_\gamma(\gamma_M) \quad (\text{H.202})$$

$$\|J_1\|_\infty \leq \left\| I_{\mathcal{H}_{n, m}} \otimes U_{M, \gamma}^{(m)} U_{M, \gamma}^{(m)\dagger} \right\|_\infty + \left\| U_{M, \gamma}^{(m)} U_{M, \gamma}^{(m)\dagger} \otimes U_M^{(m)} U_{M, \gamma}^{(m)\dagger} \right\|_\infty \quad (\text{H.203})$$

$$= \left\| U_{M, \gamma}^{(m)} U_{M, \gamma}^{(m)\dagger} \right\|_\infty + \left\| U_{M, \gamma}^{(m)} \otimes U_{M, \gamma}^{(m)\dagger} \right\|_\infty = 2a_\gamma(\gamma_M) \quad (\text{H.204})$$

$$\|J_2\|_\infty = \left\| U_{M, \gamma}^{(m)\dagger} U_{M, \gamma}^{(m)} \otimes I_{\mathcal{H}_{n, m}} \right\|_\infty + \left\| U_M^{(m)\dagger} U_{M, \gamma}^{(m)} \otimes U_{M, \gamma}^{(m)\dagger} U_M^{(m)} \right\|_\infty \quad (\text{H.205})$$

$$= \left\| U_{M, \gamma}^{(m)\dagger} U_{M, \gamma}^{(m)} \right\|_\infty + \left\| U_{M, \gamma}^{(m)} \otimes U_{M, \gamma}^{(m)\dagger} \right\|_\infty = 2a_\gamma(\gamma_M) \quad (\text{H.206})$$

を得るので, 定理 6.3 より,

$$\left| \mathbb{V}_\gamma \left[\frac{\partial C(\gamma)}{\partial \gamma} \right] - v_\gamma(\rho, O) \right| \leq 4b_\gamma \left(\epsilon_R^{(2)} \epsilon_L^{(2)} \|O\|_1^2 + \frac{\epsilon_R^{(2)} \Delta_d^{(2)}(O) + \epsilon_L^{(2)} \Delta_d^{(2)}(\rho) \|O\|_1^2}{d^2 - 1} \right) \quad (\text{H.207})$$

を得る. ここで,

$$b_\gamma = \int \nu_M(d\gamma_M) a_\gamma(\gamma_M) = \int_{[0, 2\pi)} \frac{d\theta}{2\pi} \int_{[0, 2\pi)} \frac{d\phi}{2\pi} a_\gamma(\theta, \phi) = \begin{cases} 1 & (\gamma = \theta) \\ \frac{1}{2} & (\gamma = \phi) \end{cases} \quad (\text{H.208})$$

とした.