

修士学位論文

行列積状態を用いた変分量子固有値ソルバーの実装と
場の理論への応用

(Development of the variational quantum eigensolver using the matrix
product state and its application to the quantum field theory)

東京大学大学院 理学系研究科
物理学専攻 浅井研究室

寺尾 萌里乃

令和5年1月

概要

場の理論の1つに量子色力学 (Quantum Chromodynamics, QCD) がある。これはハドロンの構成や相互作用を記述する理論であり、数値計算の場合は空間を離散化した格子 QCD に対しモンテカルロ法を用いる手法が主流となっている。しかしモンテカルロ法は特定の状況で値が発散するという符号問題が知られており、格子 QCD も符号問題により数値計算が困難な状況を有する。そこで量子コンピュータによるシミュレーションに取り組んだ。量子コンピュータは量子力学的な特徴を活かし従来のコンピュータでは解くことの難しい問題を扱うことができると期待されており、機械学習や量子系のシミュレーション、組合せ最適化問題など、様々な応用先が検討されている。量子系のシミュレーションにおいては、例えば変分量子固有値ソルバーと呼ばれる手法により基底状態を求めることができる。これは量子コンピュータ上で ansatz と呼ばれる量子状態を生成し、これに対する Hamiltonian の期待値をコスト関数として、古典コンピュータにより最適化を行い基底状態へ近似した状態を得る手法である。ところが現状の量子コンピュータは発展途上の段階にあり、使用できる量子ビット数に限りがある。また量子ビット数の多い状況では Hilbert 空間にて求める状態を探索する時に local minima によって近似性能が落ちてしまう。

そこで本研究では Schwinger モデルに対する変分量子固有値ソルバーにテンソルネットワークを用いて性能改善に試みた。特に行列積状態 (Matrix Product State, MPS) と呼ばれるテンソルネットワークは、Hilbert 空間の小さな部分空間を探索することにより特定の量子系の基底状態を近似できる性質を持つ。これを利用して MPS を変分量子固有値ソルバーに適用した ansatz(MPS-inspired ansatz) による効率的な Hilbert 空間の探索に取り組んだ。さらに MPS や MPS-inspired ansatz の構造を利用して、MPS-inspired ansatz に対し mid-circuit measurement や並進対称性を適用し、量子ビット数や step 数の少ないアルゴリズムの実装にも取り組んだ。

実験を通して、MPS を適用した ansatz は今回比較を行った従来の ansatz に比べ高い性能を維持することが確認できた。さらに mid-circuit measurement を適用した場合には近似精度が変わらないという結果が得られ量子ビット数を抑えた実装が可能であることを示した。また並進対称性を利用した ansatz については収束性能と local minima の分布に関して考察を行った。

目次

1	序論	2
1.1	背景	2
1.2	研究目的	2
1.3	論文の構成	3
2	量子コンピュータ	4
2.1	基本事項	4
3	変分量子固有値ソルバー	9
3.1	概要	9
3.2	Ansatz	9
3.3	測定	10
3.4	最適化	11
3.5	課題	12
4	テンソルネットワーク	15
4.1	基本事項	15
4.2	強み	16
4.3	MPS と量子ゲートの関係	17
5	物理モデル	25
5.1	量子色力学	25
5.2	Schwinger モデル	27
6	MPS-inspired ansatz の実装 (MPS を用いた VQE)	29
6.1	実験の概観	29
6.2	従来の VQE との比較	29
6.3	mid-circuit measurement	34
6.4	並進対称性	37
7	結論	43
	謝辞	44
	付録 A 用語の定義	49

1 序論

1.1 背景

量子コンピュータは量子力学を用いて計算を行う計算機である。1981年の講演でFeynmanは、シミュレーションにおいて量子力学的な振る舞いの記述が重要であることを説き、量子コンピュータが提案された [1]。そしてその後、Vazirani や Bernstein などによる量子コンピュータの計算可能性 (どのような問題を扱うことが可能か) に関する発表 [2] や Shor のアルゴリズム [3] や Grover のアルゴリズム [4] を代表とする、古典コンピュータに対する量子コンピュータの優位性を示唆する重要な発表によって、量子コンピュータの計算能力の高さが強く認識された。

上記のようなアルゴリズムや計算可能性についての研究と同時に、ハードウェアの作製も盛んに進められた。量子コンピュータの5つの構成要素 [5]

1. 量子ビットの集まりを含む物理系
2. 特定の初期状態を用意する能力
3. 量子ゲートと呼ばれる、量子ビットに対する任意のユニタリー変換を近似できるような量子操作の集まり
4. 扱う問題を適切な量子ゲートを含む量子回路へ変換できる古典コンピュータ
5. 計算結果を読み出すために量子ビットを測定する能力

に従い、既に存在していた超伝導やイオン制御を用いた量子コンピュータのハードウェア開発が進められた。そして量子コンピュータの実現に向けた精力的な研究は今日まで継続して行われている。古典コンピュータに対する優位性を示す発表 [6, 7] がなされた他、Google による実機を用いた量子超越性に関する発表 [8] は産業方面にも多大なインパクトを与えた。

以上のような高い計算能力を各分野の課題解決に利用しようと、量子化学や物理系のシミュレーション、機械学習、組合せ最適化問題などに対して盛んに研究が行われている。物理シミュレーションにおいては、場の理論の特に重要な分野として量子色力学 (Quantum Chromodynamics, QCD) がある。これはハドロンの構成や相互作用に関する理論で、現在は主に格子 QCD に対しモンテカルロシミュレーションを用いて数値的に調べられている。これまで、この手法によって幾つもの物理量が計算され理論の検証に貢献してきた。その一方でモンテカルロシミュレーションには符号問題という欠点が存在し、特に有限密度の原子核やクォークを扱う状況での計算が困難となっている。

量子コンピュータは上記のような領域の理解につながると期待される。しかしながら、現状の量子コンピュータは数百量子ビット程度の大きさでノイズが存在しており、NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) 時代と呼ばれている [9]。ノイズを訂正するために多くの量子ビットが必要となることから、実機での計算は量子ビットが非常に限られた状況となっている。

1.2 研究目的

本研究ではテンソルネットワークを量子コンピュータのアルゴリズムに用いることで、より少ない計算コストでの量子系のシミュレーションの実装に取り組む。NISQ時代の量子コンピュータのシミュレーションに向けた活用方法としては、変分量子固有値ソルバー (Variational Quantum Eigensolver, VQE) [22] があ

る。系のエネルギーをコスト関数として、量子コンピュータによる状態生成と古典コンピュータにおける最適化を繰り返すことで基底状態を求める手法である。本研究でのシミュレーションの対象としては、前節で述べた QCD といくつかの共通点を有するモデルとして知られる Schwinger モデル [56] を取り扱う。1.1 節で述べたように、量子コンピュータを用いたアルゴリズムにおいては量子ビットの数には限りがあり、未だ量子ビットを多く必要とする計算の実行は難しい。また現在用いられている量子コンピュータと古典コンピュータの両方を用いた最適化においては Hilbert 空間の大きさに由来する課題が存在する。そこで Hilbert 空間の大きさや量子ビット数を抑えた VQE 実行に向け、テンソルネットワークの適用を試みた。テンソルネットワークは物性物理の分野で主に用いられている技術であり、テンソルで表される状態をグラフとして扱う。効率的な縮約計算やより少ない次元のテンソルへの近似が可能となり、計算リソースの削減が実現されている。本研究ではテンソルネットワークのうち行列積状態 (Matrix Product State, MPS) [42, 43] と呼ばれるものを用いる。特徴としては特定の状態を効率的に表現できる点がある。一般には Hilbert 空間全体で正しい状態かどうか探索を行うが、一部の状態については小さな部分空間だけを考えることで十分な精度の近似した状態が得られることが示されている。

そこで本研究では、条件を満たす Schwinger モデルに対して MPS を適用した量子回路 (MPS-inspired ansatz) を用いることにより、従来の VQE に比べ計算コストを抑えつつ同等以上の収束精度をもつアルゴリズムの開発を目的とする。さらに、サイト数が大きい時の MPS の性質や MPS を用いた量子回路の構造を利用することで、量子ビット数や最適化にかかる step 数を減らす MPS-inspired ansatz の開発にも試みる。そのための手法として、mid-circuit measurement という量子ビットの再利用や並進対称性を持った量子回路の実装を検討する。以上が研究目的である。

最後に新規性と意義について述べる。本研究の新規性は場の理論のモデルに対して MPS を適用した VQE に取り組んでいる点にあると考える。テンソルネットワークを量子回路に適用した先行研究は存在しているが、その多くが物性分野のモデルに対してである [11–14]。場の理論のモデルに適用した研究も存在するが、Schwinger モデルに関して MPS の VQE への適用は本研究が初めて行っている。また本研究では Schwinger モデルという簡単なモデルに対しての実装を行っているが、より高次元の複雑なモデルでの実装に向けた基礎固めとしての意味合いも大きい。本研究で得られた結果はそういった状況でのアプローチに活かされると考える。

1.3 論文の構成

本論文では 2, 3 章を通して量子コンピュータに関する基礎事項、4 章でテンソルネットワークについて記した後、5 章で対象とする物理系について述べる。その後 6 章では行った実験について説明し、7 章で全体をまとめる。

2 量子コンピュータ

本章では量子コンピュータによる計算の基本的な事柄について述べる。

2.1 基本事項

量子コンピュータでは主にゲート方式とアニーリング方式の2種類が用いられており、本研究では特にゲート方式での実験を行う。量子情報に関する数学的な用語については付録にて定義を行なっている。

通常のコンピュータはビットと呼ばれる0や1の組み合わせにより情報を扱うのに対し、量子コンピュータでは0と1に対応する状態 $|0\rangle, |1\rangle$ のほかに重ね合わせ状態やもつれ状態が用いられる。古典コンピュータに合わせて、情報の単位は量子ビットと呼ばれ2成分ベクトルで表される。

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (2)$$

式(1)は計算基底と呼ばれ、1量子ビットの任意の状態は $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ を用いて計算基底の重ね合わせ(式(2))で表すことができる。ここで $|\alpha|^2, |\beta|^2$ はそれぞれ $|\psi\rangle$ を計算基底で測定した時に $|0\rangle, |1\rangle$ を得る確率である。そのため $\langle\psi|\psi\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ という規格化条件を満たす。これより式(2)は

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (3)$$

と書き換えることができ、特に1量子ビットの場合にはBloch球と呼ばれる球(図1)によって図示することもできる。図1では3つの軸がそれぞれ後に出てくるPauli演算子X, Y, Zの固有状態に対応し、球面上が純粋状態、球面内部が混合状態に対応する。

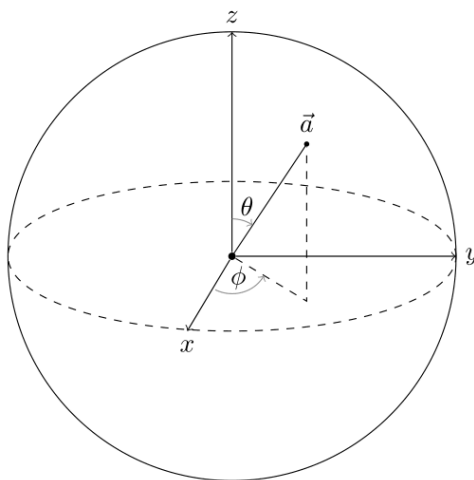


図1: Bloch 球

続いて量子ゲートと呼ばれる、量子ビットへの作用について説明する。特に1量子ビットの場合を考えると、ある状態 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ に対し量子ゲート U を作用させた後の状態を $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle = \alpha'|0\rangle + \beta'|1\rangle$ とする。作用後の状態も規格化条件を満たす必要があることから $\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|U^\dagger U|\psi\rangle = 1$ が成り立つ。こ

れより量子ゲートに対しては $U^\dagger U = I$, つまりユニタリー演算子であることが求められる. ここでは 1 量子ビットで説明したが, 2 量子ビット以上へ作用する量子ゲートも存在する. それらのゲートも同様に考えることによりユニタリー性を持つことが確認できる.

さて, 量子コンピュータでの演算を行う時には量子ビットを配線, 量子ゲートを配線上の図形として表し, 配線や図形によって構成されるものを量子回路と呼ぶ. 量子回路において量子ビットの初期状態は $|00\cdots 0\rangle$ となっており, 図 2(a) のように表される.

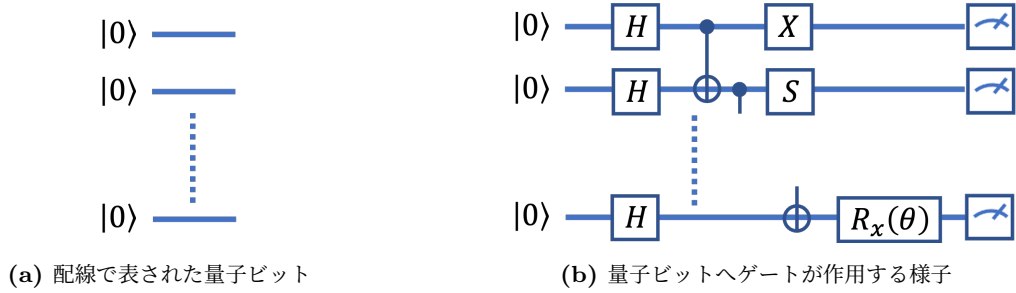


図 2: 回路図の例

時間は左から右へ経過し, 図 2(b) のように複数のゲートのほか測定と呼ばれる演算が配置された様子を表している. それでは量子回路において主要なゲートを紹介する.

単一量子ビットゲート

まず 1 量子ビットへ作用するゲートを説明する.

- I ゲート

作用するベクトルと同じベクトルを出力するゲート

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

- Pauli ゲート

$$\sigma_1 \equiv X \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 \equiv Y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 \equiv Z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

で定義される. ここで σ_i, σ_j ($i, j \in \{1, 2, 3\}$) は次の交換関係と反交換関係を満たす.

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I \quad (6)$$

$\epsilon_{ijk}, \delta_{ij}$ はそれぞれレヴィチヴィタ記号とクロネッカーのデルタを用いており, 同じ添字についてはアインシュタインの縮約規則により省略している.

- Hadamard ゲート

z 基底では次のような行列で表される. Bloch 球上では x 軸と z 軸の中間を通る軸についての回転に対応する. H ゲートとも表記される.

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

- S ゲート

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \quad (8)$$

H ゲートと合わせると Pauli ゲート間には次のような関係が成り立つ.

$$X = HZH, \quad Y = SHZHS^\dagger \quad (9)$$

- 回転ゲート

$R_i(\theta)$ は $i \in \{x, y, z\}$ 軸について θ だけ回転する操作に対応する.

$$R_x(\theta) \equiv \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, R_y(\theta) \equiv \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, R_z(\theta) \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{pmatrix} \quad (10)$$

多量子ビットゲート

- CNOT ゲート

2 量子ビットに作用するゲートである. 作用する 2 量子ビットはそれぞれ制御量子ビットと標的量子ビットと呼ばれ, 制御量子ビットが $|0\rangle, |1\rangle$ の場合に標的量子ビットには I, X が作用する.

$$\text{CNOT} = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

CNOT を作用させることで, 下記のように 2 量子ビットの状態を独立に扱うことができなくなる場合がある. この状態はエンタングル状態やもつれ状態と呼ばれる.

$$\text{CNOT} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

量子回路上では次のように表される.



図 3: CNOT ゲート

図 3 において, 黒丸の存在する量子ビットが制御量子ビット, 白丸の存在する量子ビットが標的量子ビットを表す.

- SWAP ゲート

2 量子ビットに作用するゲートであり, 量子状態を交換する.

$$\text{SWAP} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (12)$$

次の回路図のように配置することで CNOT ゲートで実行することができる.



図 4: SWAP ゲート

その他

- 測定

量子ビットに対し Z 基底への射影を行うことで測定値 ± 1 と対応する状態 $|0\rangle$ または $|1\rangle$ を得る操作. 量子回路では図 5 のように表される.



図 5: 測定

- リセット

量子ビットを $|0\rangle$ へ変換する操作. 本研究においては測定後の量子ビットを $|0\rangle$ へ戻す際に用いられる.

以上のような量子ゲートを作用させることで量子ビットは様々な状態を取りうる. 量子力学では Hilbert 空間と呼ばれる空間の中で状態や作用を考える. 量子ゲートの作用により量子ビットが張る空間も Hilbert 空間に含まれる. 特に 1 量子ビットと 2 量子ビットに作用する任意のユニタリーゲートは以下の形で表せることが示されている.

- 1 量子ビット [19]

$$U = e^{i\alpha} R_z(\beta) R_y(\gamma) R_z(\delta) \quad (13)$$

この U は U3 ゲートと呼ばれる.

- 2 量子ビット [20]

$$U = (A_0 \otimes A_1) e^{i\mathbf{k} \cdot \Sigma} (B_0 \otimes B_1) \quad (14)$$

A_0, A_1, B_0, B_1 は U3 ゲートである.

最後にエンタングル状態の程度を測る指標として entanglement entropy, 特に von Neumann entropy と Rényi entropy を紹介する. これは, ある系 A と B の entanglement の程度を示す指標である. 全体系 $A+B$ での状態を ρ_{AB} とすると, 系 A での状態 ρ_A は系 B における部分トレース Tr_B を用いて $\rho_A := \text{Tr}_B \rho_{AB}$ と定義される. これらを用いて von Neumann entropy の定義を記す.

定義 1. 系 A と系 B からなる合成系 $A+B$ を考える. この時, 系 A における縮約状態 $\rho_A := \text{Tr}_B \rho_{AB}$ の von Neumann entropy は

$$S = -\text{Tr}_A(\rho_A \log \rho_A) \quad (15)$$

である. ただし系 $A+B$ における量子状態は ρ_{AB} である.

次は Rényi entropy の定義である.

定義 2. 系 A と系 B からなる合成系 $A + B$ を考える. この時, 系 A における縮約状態 $\rho_A := \text{Tr}_B \rho_{AB}$ の Rényi entropy は

$$S_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \log(\text{Tr}_A \rho_A^\alpha), \quad \alpha \in (0, 1) \cup (1, \infty) \quad (16)$$

ρ_{AB} が純粋状態の時, von Neumann entropy や Rényi entropy を考える系として A, B のいずれを選んでも変わらないことが Schmidt 分解を用いて示せる [18]. また特に $\alpha \rightarrow 1$ では $\lim_{\alpha \rightarrow 1} S_\alpha \rightarrow S$ となる [21].

3 変分量子固有値ソルバー

本章では物理系のシミュレーションとして基底状態を求める変分量子固有値ソルバー (Variational Quantum Eigensolver, VQE) [22] について説明する。

3.1 概要

VQE は量子コンピュータによる状態生成と古典コンピュータによるパラメータ最適化により対象とする Hamiltonian の基底状態を求めるアルゴリズムである。(図 6)

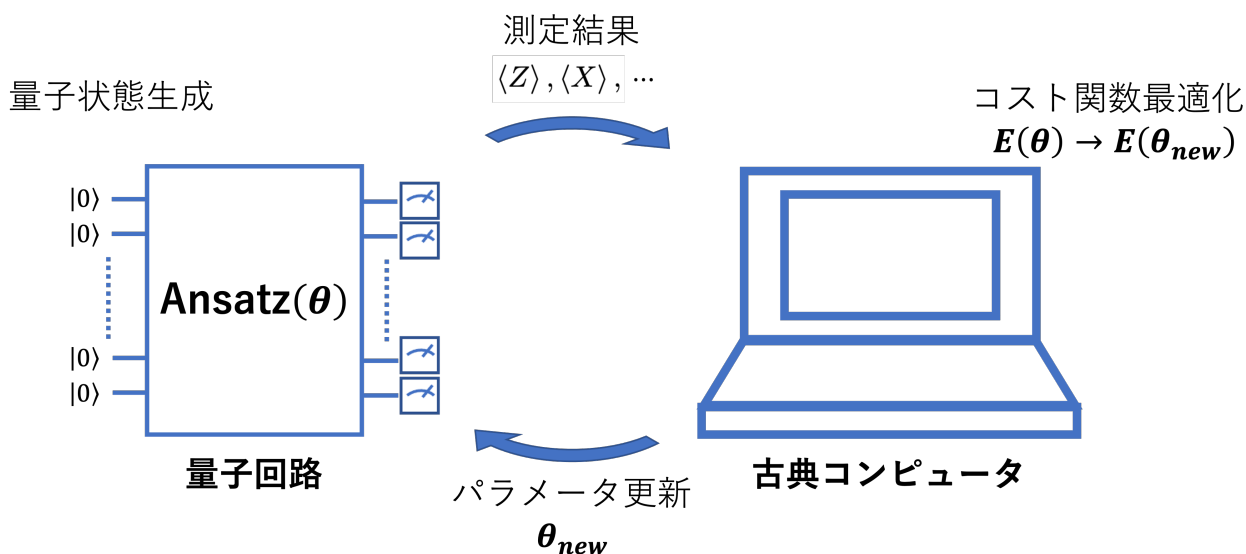


図 6: VQE による最適化の様子

図は、量子コンピュータ上において量子回路により量子状態を生成する過程と古典コンピュータ上にてコスト関数を最適化する過程が繰り返し行われることを示している。VQE ではまず初めに、パラメータを含んだ回転ゲートやエンタングルゲートによって量子回路を構成する。これは試行状態 (ansatz) と呼ばれる。

3.2 Ansatz

本節では ansatz について、特に実験で用いる HEA(Hardware Efficient Ansatz) と HVA(Hamiltonian Variational Ansatz) を説明する。

- HEA [23]

回転ゲートの層とエンタングルゲートの層を繰り返し作用させることにより作り出される ansatz. original の論文での定義は次の通りである。

$$|\Psi(\theta)\rangle = \prod_{q=1}^N [U^{q,d}(\theta^{q,d})] \times U_{\text{ENT}} \times \prod_{q=1}^N [U^{q,d-1}(\theta^{q,d-1})] \times \cdots \times U_{\text{ENT}} \times \prod_{q=1}^N [U^{q,0}(\theta^{q,0})] |00 \cdots 0\rangle \quad (17)$$

$$U^{q,i}(\theta^{q,i}) = R_z^q(\theta_1^{q,i}) R_x^q(\theta_2^{q,i}) R_z^q(\theta_3^{q,i})$$

U_{ENT} = 全ての量子ビットをエンタングルさせるゲート

- HVA [24]

対象とする Hamiltonian に含まれる項に応じて回転ゲートやエンタングルゲートを配置する。扱う Hamiltonian \mathcal{H} がある演算子 h_a , ある係数 J_a を用いて $\mathcal{H} = \sum_{a=1}^n J_a h_a$ と書ける時, 以下のように定義される.

$$|\Psi(\theta)\rangle = \exp(i\theta_n h_{a_n}) \cdots \exp(i\theta_2 h_{a_2}) \exp(i\theta_1 h_{a_1}) |\psi_0\rangle \quad (18)$$

この時 $|\psi_0\rangle$ は Hamiltonian に含まれるいずれかの項 h_a の基底状態である.

3.3 測定

量子回路は演算の最後に測定を行うことによりどのような状態が生成されたか知ることができる. そこで本節では量子回路の測定と測定値の処理について説明する. 測定は Pauli 演算子 Z の固有値に対する固有射影演算子 $P_0 = |0\rangle\langle 0|$, $P_1 = |1\rangle\langle 1|$ によって行われる. ここでの固有射影演算子 P_a , ($a = 0, 1$) とは状態 $|\psi\rangle$ に作用することで Z の固有値 a の固有空間へ射影を行う演算子である. 測定で得られる結果は固有値 a に対応し, 得られる確率 $p(a)$ は

$$p(a) = \langle \psi | P_a | \psi \rangle \quad (19)$$

と与えられる. また, 測定後の状態は

$$\frac{P_a |\psi\rangle}{\sqrt{p(a)}} \quad (20)$$

である. 1回の測定では $|0\rangle$ または $|1\rangle$ のいずれかが得られるのみであるため, 多数回測定を行うことにより $p(0), p(1)$ を求めることができる. 測定の平均値は測定値 a と得られる確率 $p(a)$ によって

$$\mathbb{E}(Z) = \sum_a a p(a) \quad (21)$$

と表せることから

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(Z) &= \sum_a \langle \psi | P_a | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \sum_a P_a | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | Z | \psi \rangle \end{aligned}$$

のように測定の平均値によって $|\psi\rangle$ に対する Z の期待値を求めることができる. また (9) 式で示した Pauli 演算子についての関係から, 測定前に Hadamard ゲートや S ゲートなどを作用させることで X, Y の期待値を得ることができる.

さらに, 任意のエルミート演算子 A は単位演算子 I と Pauli 演算子 X, Y, Z の線形和によって表すことができる.

$$A = aI + bX + cY + dZ \quad (22)$$

測定から Pauli 演算子の期待値が得られれば,

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = a + b \langle \psi | X | \psi \rangle + c \langle \psi | Y | \psi \rangle + d \langle \psi | Z | \psi \rangle \quad (23)$$

と求めることができる.

3.4 最適化

VQE では量子回路の測定で得られた結果を用いて最適化を行う. 本節では最適化について説明する. 前節にて量子回路の測定を通して, 量子回路の状態 $|\psi\rangle$ に対する Pauli 演算子の期待値が得られることを述べた. そして任意の Hamiltonian はエルミート演算子であることから, Pauli 演算子の期待値を組み合わせることで期待値 (=エネルギー) を求めることができる. VQE ではコスト関数としてエネルギーを用い, それが小さくなるようにパラメータを変化させていくことでエネルギーが最も小さくなる状態 (=基底状態) への近似を行う. そのため VQE におけるパラメータはパラメータ空間にてエネルギーがより小さくなる方向へ変化させる必要があり, これにはパラメータに関するエネルギーの勾配の情報が必要である. 本節ではパラメータに関するエネルギーの勾配の計算方法として, パラメータシフト法について述べる [17].

まず量子回路はパラメータ $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_l)$ を含むある一連のユニタリーゲート $U(\theta) = \prod_{j=1}^l U_j(\theta_j)$ が初期状態 ρ_{in} に作用しているものであり, $U_j(\theta_j)$ は Pauli ゲート P_j により $U_j(\theta_j) = e^{-i\theta_j P_j/2}$ と表される回転ゲートであると仮定する. 以上の量子回路に対し, パラメータ θ_j についての物理量 B の期待値の勾配 $\partial \langle B \rangle / \partial \theta_j$ を求めることを考える. まず量子回路に対する B の期待値 $\langle B(\theta) \rangle$ は次のように表せる.

$$\langle B(\theta) \rangle = \text{Tr} \left(B U_{l:1} \rho_{\text{in}} U_{l:1}^\dagger \right) \quad (24)$$

ここで $U_{j:k} = U_j \cdots U_k$ とした. ここで $U_j(\theta_j)$ が P_j についての回転ゲートであることから $\langle B(\theta) \rangle$ の θ_j についての勾配は

$$\frac{\partial \langle B(\theta) \rangle}{\partial \theta_j} = \text{Tr} \left(B \frac{\partial U_{l:1}}{\partial \theta_j} \rho_{\text{in}} U_{l:1}^\dagger \right) + \text{Tr} \left(B U_{l:1} \rho_{\text{in}} \frac{\partial U_{l:1}^\dagger}{\partial \theta_j} \right) \quad (25)$$

$U_j(\theta_j) = e^{-i\theta_j P_j/2}$ であり P_j はエルミート, また随伴演算子について $(CD)^\dagger = D^\dagger C^\dagger$ が成り立つから

$$\frac{\partial U_{l:1}}{\partial \theta_j} = U_1 \cdots U_{j-1} \cdot \frac{\partial U_j}{\partial \theta_j} \cdot U_{j+1} \cdots U_l = -\frac{i}{2} U_1 \cdots U_j \cdot P_j U_{j+1} \cdots U_l = -\frac{i}{2} U_{l:j} P_j U_{j-1:1} \quad (26)$$

$$\frac{\partial U_{l:1}^\dagger}{\partial \theta_j} = \frac{i}{2} U_{j-1:1}^\dagger P_j U_{l:j}^\dagger \quad (27)$$

したがって交換関係 $[C, D] = CD - DC$ を用いて

$$\frac{\partial \langle B \rangle}{\partial \theta_j} = \frac{i}{2} \text{Tr} \left(-B U_{l:j} P_j U_{j-1:1} \rho_{\text{in}} U_{l:1}^\dagger + B U_{l:1} \rho_{\text{in}} U_{j-1:1}^\dagger P_j U_{l:j}^\dagger \right) \quad (28)$$

$$= -\frac{i}{2} \text{Tr} \left(B U_{l:j} P_j U_{j-1:1} \rho_{\text{in}} U_{j-1:1}^\dagger U_{l:j}^\dagger + B U_{l:j} U_{j-1:1} \rho_{\text{in}} U_{j-1:1}^\dagger P_j U_{l:j}^\dagger \right) \quad (29)$$

$$= -\frac{i}{2} \text{Tr} \left(B U_{l:j} [P_j, U_{j-1:1} \rho_{\text{in}} U_{j-1:1}^\dagger] U_{l:j}^\dagger \right) \quad (30)$$

と書ける. ここで $U_j(\theta_j)$ は

$$U_j(\theta_j) = e^{-i\theta_j P_j/2} = \cos\left(\frac{\theta_j}{2}\right) I - iP_j \sin\left(\frac{\theta_j}{2}\right) \quad (31)$$

より $U_j(\pm\pi/2) = (I \mp iP_j)/\sqrt{2}$ を用いて

$$U_j\left(\frac{\pi}{2}\right) \rho U_j^\dagger\left(\frac{\pi}{2}\right) - U_j\left(-\frac{\pi}{2}\right) \rho U_j^\dagger\left(-\frac{\pi}{2}\right) = -i[P_j, \rho] \quad (32)$$

これを式 (30) に代入すれば

$$\frac{\partial \langle B(\theta) \rangle}{\partial \theta_j} = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(BU\left(\theta + \frac{\pi}{2} \mathbf{e}_j\right) \rho_{\text{in}} U^\dagger\left(\theta + \frac{\pi}{2} \mathbf{e}_j\right) - BU\left(\theta - \frac{\pi}{2} \mathbf{e}_j\right) \rho_{\text{in}} U^\dagger\left(\theta - \frac{\pi}{2} \mathbf{e}_j\right) \right) \quad (33)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\langle B\left(\theta + \frac{\pi}{2} \mathbf{e}_j\right) \rangle - \langle B\left(\theta - \frac{\pi}{2} \mathbf{e}_j\right) \rangle \right) \quad (34)$$

ここで \mathbf{e}_j は j 番目の成分が 1 であるような単位ベクトルである.

以上の計算からパラメータ θ_j についての物理量 B の期待値の勾配 $\partial \langle B \rangle / \partial \theta_j$ は, θ_j について $\pm\pi/2$ だけずらした期待値により求められることがわかる.

3.5 課題

上記の過程を経てシミュレーションが行われている VQE であるが, アルゴリズムの実行においていくつかの課題が存在している. ここではそれらについて述べる.

- Barren plateau

コスト関数の最適化において関数の勾配の分散が消失する現象. コスト関数 $E(\theta)$ が初期状態 $|0\rangle$ にランダムなユニタリー演算 $U(\theta)$ の作用した状態に対する Hamiltonian H の期待値

$$E(\theta) = \langle 0 | U^\dagger(\theta) H U(\theta) | 0 \rangle \quad (35)$$

で表される時, k 番目のパラメータ θ_k に対する勾配 $\partial_k E \equiv \partial E(\theta) / \partial \theta_k$ の分散は $b > 1$ と量子ビット数 n を用いて

$$\text{Var}[\partial_k E] \approx \mathcal{O}\left(\frac{1}{b^n}\right) \quad (36)$$

と表される. n に対し $\text{Var}[\partial_k E]$ は指数的に 0 へ減少することがわかる [25]. 原因としては回路の深さ [25], 測定する物理量 [26], ノイズ [27] などいくつも存在し, Barren plateau を避ける回路やアルゴリズムも考案されている [26, 28–30]. 次の図は量子ビット数に対して Barren plateau が存在することを示している.

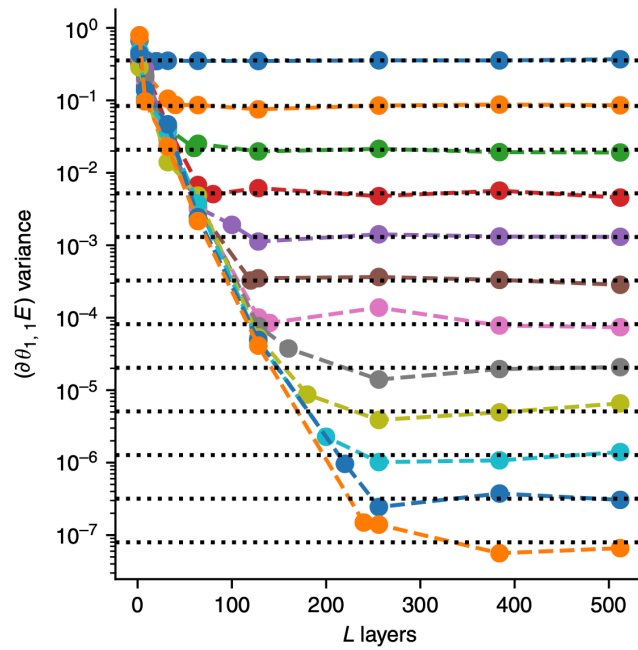


図 7: 量子ビット数と回路の深さに対する Barren plateau [25]

図 7 では量子ビット数が色の異なるプロット, 回路に含まれる繰り返しの構造が横軸の Layer 数として表され, 縦軸はコスト関数の勾配の期待値となっている. 量子ビット数や回路の深さが大きくなるほどコスト関数の勾配の期待値が減少していることがわかる.

- local minima

問題のサイズが大きくなった時に global minimum ではなく local minima に収束してしまう現象. 古典コンピュータや量子コンピュータでのニューラルネットワークにおいて盛んに研究されている [32–38]. local minima には global minimum への収束を助ける良い性質のものと, global minimum から離れた所に存在し最適化を妨げる悪い性質のものが存在し, その性質が変化する相転移が確認されている. (図 8)

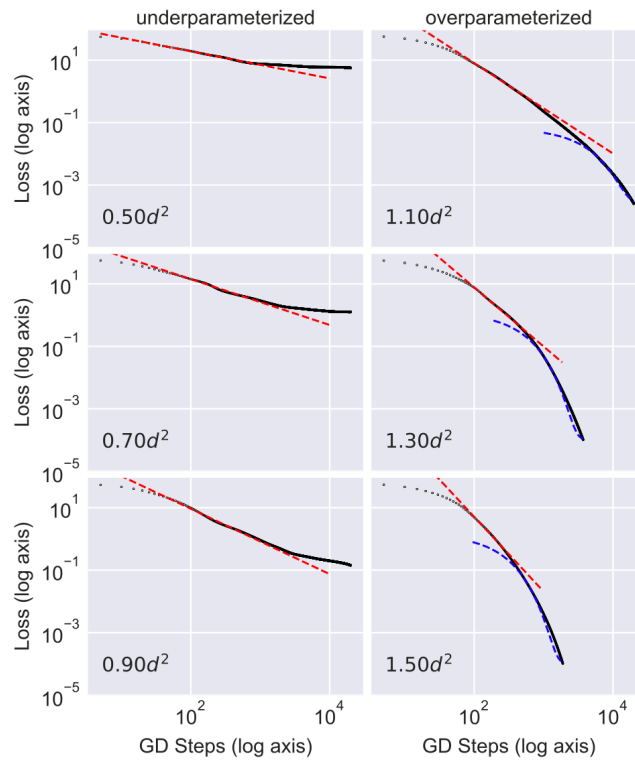


図 8: 学習性能における相転移現象 [37]

横軸はステップ数, 縦軸はコスト関数の大きさに対応しており, 赤や青の点線はフィッティングにより得られた曲線である. また d^2 は Hilbert 空間の次元, グラフ左下の値は最適化に用いた量子回路に含まれるパラメータ数に対応した量である. 図の左側の 3 つのグラフではパラメータ数が d^2 に比べ小さい値, 右側では大きい値でのコスト関数の収束の様子を示している. 左側では step 数が増えても 10^{-1} 以下へは収束が進んでいないのに対し, 右側ではより小さいオーダーまでコスト関数の収束が進んでいる. このことからパラメータ数と空間の次元の比によって local minima の性質が変化していることがわかる. また量子ビットが多い状況では local minima の影響が大きくなることが確認されている [39].

4 テンソルネットワーク

本研究では量子コンピュータのアルゴリズムにテンソルネットワークの特性を活用している。本章ではテンソルネットワークの基本事項から量子コンピュータとの対応までみてゆく。

4.1 基本事項

テンソルとは多次元の配列と定義される [40, 41]. テンソルはランクという量を持っており, これは添え字の数を表している. 特にランクが 0 のテンソルはスカラー, ランクが 1 のテンソルはベクトル, ランクが 2 のテンソルは行列と呼ばれる.

- スカラー : λ
- ベクトル : ψ^μ, ϕ_ν
- 行列 : C_ν^μ
- 一般のテンソル : $D_{\gamma\delta\dots}^{\alpha\beta\dots}$

また, テンソル同士の計算において重要なものに縮約がある. これは繰り返される添え字について足し合わせを行う計算であり, 縮約をとることで新しいテンソルが作られる. 例えばベクトル B^μ と行列 $C_{\mu\nu}$ の μ についての縮約を考えると新しいベクトル A_ν が得られる.

$$A_\nu = \sum_{\mu=1}^D B^\mu C_{\mu\nu} \quad (37)$$

テンソルネットワークとは一部もしくは全ての添え字について縮約がとられた, (37) 式のようなテンソルの集まりのことを意味し, テンソルネットワークはダイアグラムと呼ばれる図によって表される. (図 9) テンソルは丸や四角などの形, 添え字は線として図示する. 縮約計算は線をつなぐことで表され, 上に挙げた様々なランクのテンソルは次のように表される.

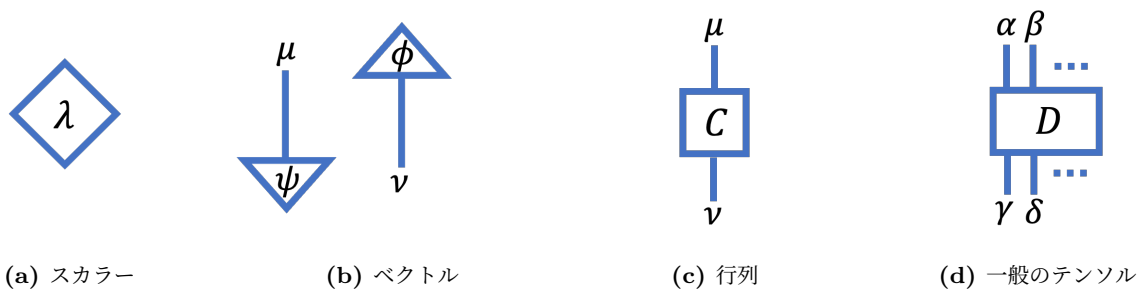


図 9: 各ランクのテンソルのダイアグラム

そして, 添字や縮約の取り方の異なる, 多くのテンソルネットワークが考案されている [42–46]. 本研究ではその中でも行列積状態 (Matrix Product State, MPS) [42, 43] という次式で定義されるテンソルネットワークを用いている.

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_\alpha} \sum_{i_\alpha} A_{i_1}^{\sigma_1} A_{i_1, i_2}^{\sigma_2} \cdots A_{i_{N-2}, i_{N-1}}^{\sigma_{N-1}} A_{i_{N-1}}^{\sigma_N} |\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_{N-1} \sigma_N\rangle \quad (38)$$

ただし $\sigma_j \in \{0, 1\}$ は j 番目のサイトの量子ビットの固有状態 $|0\rangle, |1\rangle$ のいずれかを表す.

4.2 強み

本節ではテンソルネットワークの強みとするとところを見てゆく。縮約計算をダイアグラムとして図示することにより、リソースを抑えた計算が可能となる場合がある。一般的な例としては

- 計算に必要なメモリーの量を抑えた順番での縮約
- 低ランク近似

を行うことでリソースを抑えた計算が実現されている。

特に量子系を扱う場合は area law という性質を有する量子状態に関して顕著な事実が存在する。2.1 節にて紹介した entanglement entropy は 2 つの Hilbert 空間の entanglement の程度を測る指標であった。そして量子多体系の分野では、特定の状態の entanglement entropy は対象とする 2 つの系の境界面の大きさに比例してスケールする、area law という性質が知られており、特に 1 次元の gapped な系と一部の 2 次元以上の系の基底状態で確認されている [47]。Hilbert 空間に存在する多くの状態の entanglement entropy は境界面ではなくその部分系の体積に比例するため非常に強力な制約となっている。(図 10)

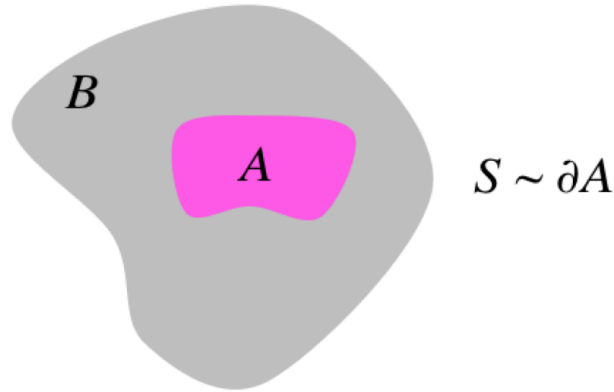


図 10: area law に従う空間 [41]

以上の area law に対し、MPS は次の性質をもつことが示されている [47, 49].

命題 1 (MPS の近似可能性). 状態の列 $\rho_I = \{\rho_1, \dots, \rho_n\}$, $I = \{1, \dots, n\}$ で表される状態を持つ長さ n の 1 次元量子系が Rényi entropy S_α について area law を満たす、つまり

$$S_\alpha = O(1), \alpha < 1 \quad (39)$$

が成り立つ場合、MPS でよく近似できる。一方で ρ_I が von Neumann entropy S_1 が volume law を満たす時

$$S_1 = \Omega(n) \quad (40)$$

MPS で効率的に近似することはできない。ここで S_α, S_1 はそれぞれ

$$S_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \log \text{Tr}(\rho^\alpha) \quad (41)$$

$$S_1 = -\text{Tr}(\rho \log \rho) \quad (42)$$

このほかの entanglement entropy のスケールと MPS での近似についての関係は以下の表にまとめられている。

$S_\alpha \sim$	const	$\log L$	$L^\kappa (\kappa < 1)$	L
$S_{\alpha < 1}$	approximable			
$S \equiv S_1$			undetermined	
$S_{\alpha > 1}$			undetermined	inapproximable

図 11: MPS での近似と EE の関係 [49]

$\alpha < 1$ であるときの Rényi entropy S_α が系の大きさ L に対して一定もしくは $\log L$ でスケールする系に対しては MPS で効率よく基底状態を近似できる。反対に von Neumann entropy に対して L でスケールする系や $\alpha > 1$ の Rényi entropy S_α に対し L^κ ($\kappa < 1$) もしくは L でスケールする系の基底状態に対しては MPS を用いた効率的な近似は厳しい、ということを表している。この性質から、扱う状態が area law を満たすかどうかによって MPS で効率的に近似が可能か判断できる。

以上をまとめると、次のようにしてテンソルネットワークの強みが量子アルゴリズムに活かせると考える。本研究では MPS を表す ansatz となるよう量子ゲートを配置し、これを用いた VQE により基底状態を求める。また扱う Hamiltonian は area law を満たすような Schwinger モデルの状況を考える。そのため通常の ansatz では大きな Hilbert 空間の様々な量子状態の中からエネルギーを最小にする状態を見つける必要があるが、MPS を用いた ansatz では図 10 に示したような小さな部分空間のみを探索し求める状態を得ることができる。したがって小さな部分空間へ制限することで調べる量子状態の数という観点で、より効率良く解が得られると考えた。

4.3 MPS と量子ゲートの関係

本節では MPS と量子回路との対応づけについて説明する [50, 51]。 (38) 式の MPS 全体と 1 成分のダイアグラムは図 12 のように表される。成分同士をつなぐ脚は bond index, 下向きに出た脚 σ は physical index と呼ばれる。bond index i_j の取りうる値 $i_j \in \{1, 2, \dots, D_j\}$ の D_j は bond dimension と呼ばれる。

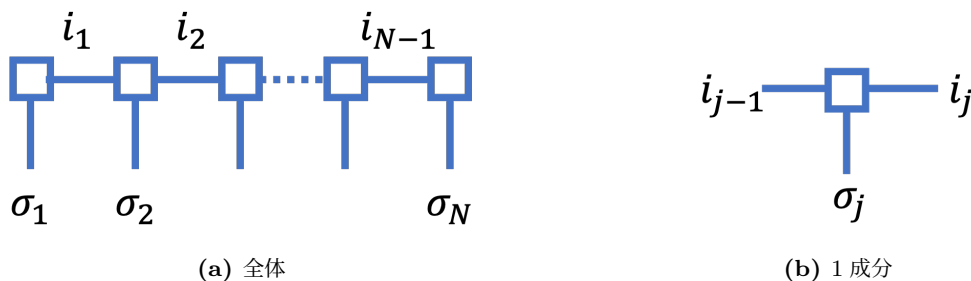


図 12: MPS のダイアグラム

続いて MPS の 1 成分と量子ゲートの対応について述べる。 j 番目の MPS の要素 $A_{i_{j-1}, i_j}^{\sigma_j}$ に対し行列 U を

次式のように関係付ける.

$$A_{i_{j-1}, i_j}^{\sigma_j} = U_{(0b_1^{(j-1)}b_2^{(j-1)}\dots), (b_1^{(j)}b_2^{(j)}\dots\sigma_j)} \quad (43)$$

2進数表記 $i_j = b_1^{(j)}b_2^{(j)}\dots$ により bond index $i_j \in \{0, 1, 2, \dots, D_j - 1\}$ を別の bond index $b_k^{(j)} \in \{0, 1\}$, $k \in \{1, \dots, \lceil \log_2 D_j \rceil\}$ として表した. $\lceil a \rceil$ は a 以上の最小の整数を意味し, U をユニタリーにするために bond index に固定した添字 0 を加えて正方行列とした. 以降は特に全ての bond dimension が等しい $D_1 = D_2 = \dots = D_{N-1} = D$ である MPS を考える. 元の MPS と 2 進数表記による行列とのダイアグラムによる対応は次のようになっている.

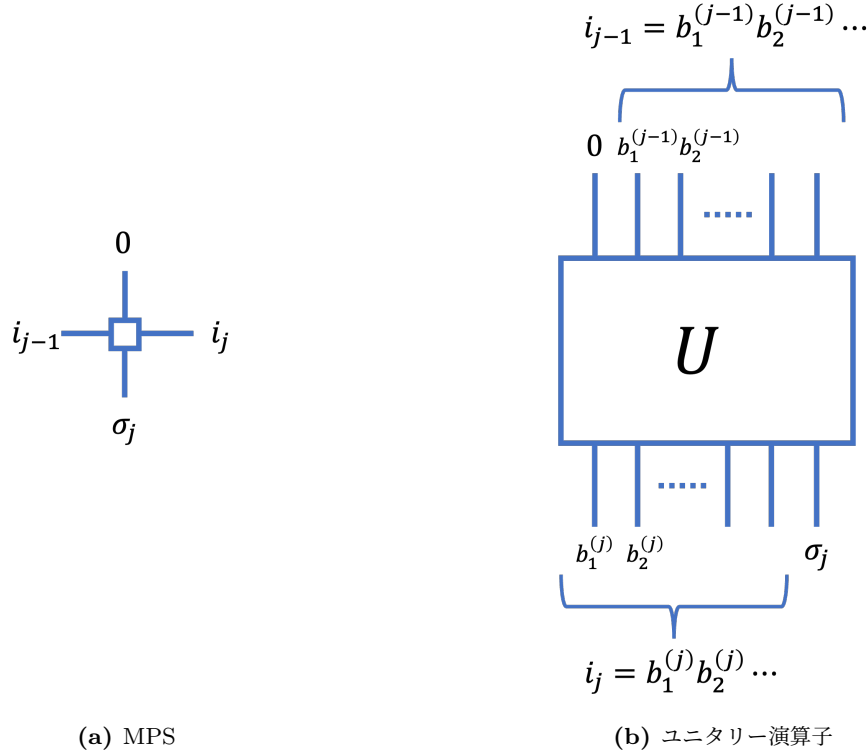


図 13: MPS とユニタリー演算子との対応

図 13 では (a) 通常の MPS の要素に対し (b) 2 進数で表した bond index がどのようにダイアグラムで表されるかを示している. 2 進数の各桁の成分が index として表されている. 1 番目と N 番目の MPS の要素 $A_{i_1}^{\sigma_1}$, $A_{i_{N-1}, 0}^{\sigma_N}$ についても同様に扱うために $A_{0, i_1}^{\sigma_1}$, $A_{i_{N-1}, 0}^{\sigma_N}$ とすると

$$A_{0, i_1}^{\sigma_1} = U_{(000\dots), (b_1^{(1)}b_2^{(1)}\dots\sigma_1)} \quad (44)$$

$$A_{i_{N-1}, 0}^{\sigma_N} = U_{(0b_1^{(N-1)}b_2^{(N-1)}\dots), (00\dots\sigma_N)} \quad (45)$$

この場合の固定添字は bond index が 0 となっている状況を考えているため, $\lceil \log_2 D \rceil$ 個の 0 が並んでいる. さらに正方行列に関して成り立つ定理 [19]

定理 1 (特異値分解). A を正方行列とするとき

$$A = UDV \quad (46)$$

を満たすユニタリー行列 U , V と負でない要素を持つ対角行列 D が存在する. 特に D の対角要素は特異値と呼ばれる.

を利用すると $A_{i_{j-1}, i_j}^{\sigma_j}$ は次の条件を満たすように変形することができる.

$$\sum_{i_{j-1}, \sigma_j} \left(\tilde{A}_{i_{j-1}, i_j}^{\sigma_j} \right)^\dagger \tilde{A}_{i_{j-1}, i'_j}^{\sigma_j} = \delta_{i_j, i'_j} \quad (47)$$

$$\sum_{i_{j-1}, \sigma_j} \tilde{A}_{i_{j-1}, i_j}^{\sigma_j} \left(\tilde{A}_{i_{j-1}, i'_j}^{\sigma_j} \right)^\dagger = \delta_{i_j, i'_j} \quad (48)$$

1 行目は左正準条件, 2 行目は右正準条件と呼ばれ, これにより U はユニタリーとなる. 1 番目と N 番目の MPS の要素 $A_{0, i_1}^{\sigma_1}$, $A_{i_{N-1}, 0}^{\sigma_N}$ の場合にはそれぞれ

$$\sum_{i_1, \sigma_1} \left(\tilde{A}_{0, i_1}^{\sigma_1} \right)^\dagger \tilde{A}_{0, i'_1}^{\sigma_1} = 1, \quad \sum_{i_1, \sigma_1} \tilde{A}_{0, i_1}^{\sigma_1} \left(\tilde{A}_{0, i'_1}^{\sigma_1} \right)^\dagger = 1 \quad (49)$$

$$\sum_{\sigma_N} \left(\tilde{A}_{i_{N-1}, 0}^{\sigma_N} \right)^\dagger \tilde{A}_{i'_{N-1}, 0}^{\sigma_N} = \delta_{i_{N-1}, i'_{N-1}}, \quad \sum_{\sigma_N} \tilde{A}_{i_{N-1}, 0}^{\sigma_N} \left(\tilde{A}_{i'_{N-1}, 0}^{\sigma_N} \right)^\dagger = \delta_{i_{N-1}, i'_{N-1}} \quad (50)$$

となる. 固定添字 0 を量子ビットの状態 $|0\rangle$ とした時, 元の MPS(図 12) は次のダイアグラムに変形される.

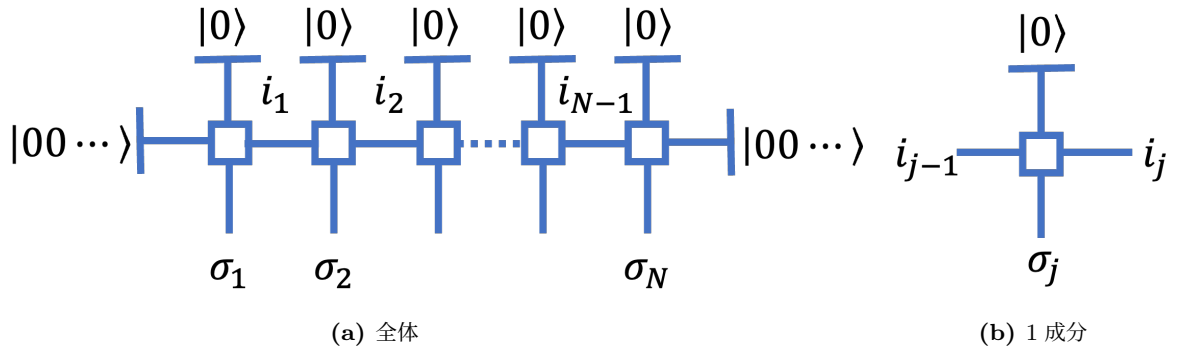


図 14: $|0\rangle$ を繋げた MPS のダイアグラム

これより MPS のダイアグラムとユニタリー演算子との対応は図 15,16 のようになる. ここでは境界部分について図示している.

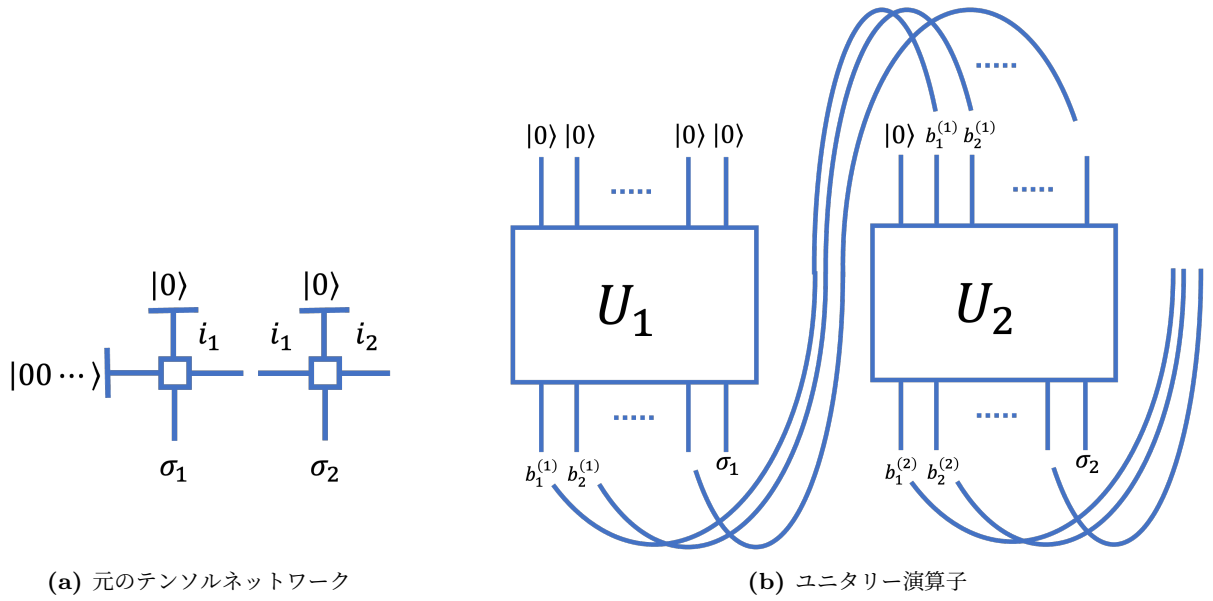


図 15: 1,2 番目の MPS の要素についての対応

図 15 ではまず 1,2 番目の MPS の要素に関する対応関係を図示した. (a) が元のテンソルネットワーク, (b) が対応するユニタリー演算子である. 縮約をとる添字については曲線で結んでいる. 同様に $N - 1, N$ 番目の MPS の要素に関する対応関係については次図の通りである.

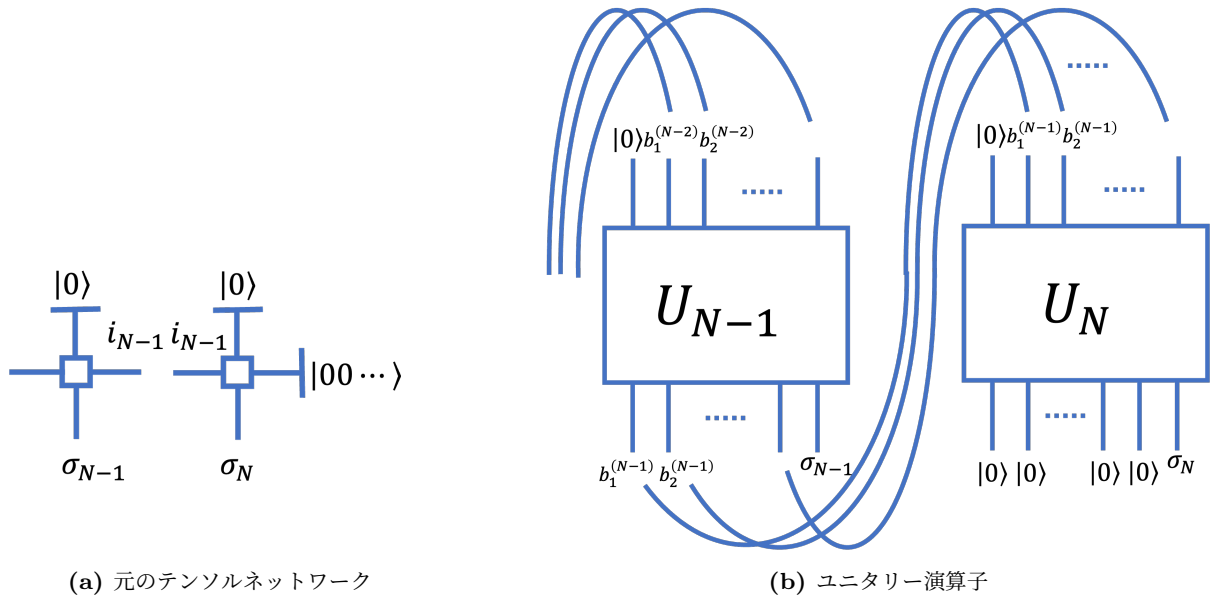


図 16: $N - 1, N$ 番目の MPS の要素についての対応

MPS のユニタリー演算子での表記 (図 15(b), 16(b)) では index は量子ビットに対応していることから, 対応する index の縮約を考えることによって MPS に対応した量子回路を作成することができる. 従って量子回路としては次図のように表される. bond dimension $D=4$ の場合を示している. 以降 physical index, bond index に対応する量子ビットをそれぞれ physical qubit, bond qubit と呼ぶ.

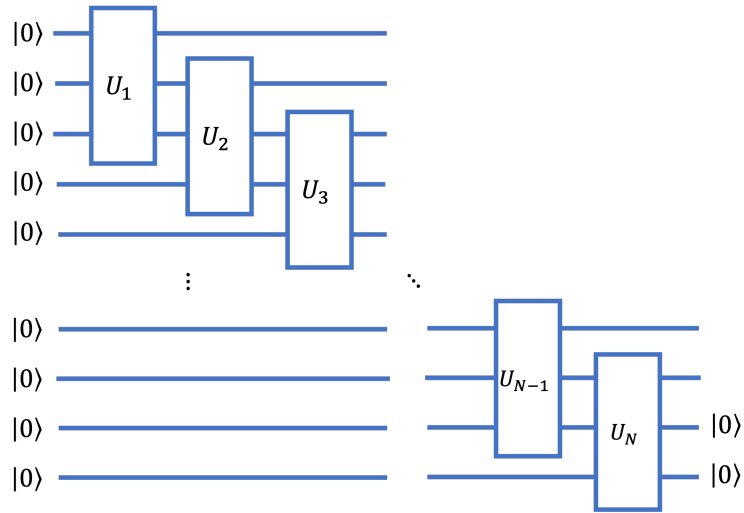


図 17: MPS に対応した量子回路

最後の 2 量子ビットについては本節の最後で議論する．先に物理量に関するテンソルネットワークと量子回路の対応を見る．MPS が

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_\alpha} \sum_{i_\alpha} A_{0,i_1}^{\sigma_1} A_{i_1,i_2}^{\sigma_2} \cdots A_{i_{N-2},i_{N-1}}^{\sigma_{N-1}} A_{i_{N-1},0}^{\sigma_N} |\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_{N-1} \sigma_N\rangle \quad (51)$$

と表される時、テンソルネットワークでは物理量 \mathcal{O} の期待値は次式のように書かれる．

$$\langle \psi | \mathcal{O} | \psi \rangle = \sum_{\sigma_\alpha, \sigma'_\alpha} \sum_{i_\alpha, i'_\alpha} \left(A_{0,i'_1}^{\sigma'_1} A_{i'_1,i'_2}^{\sigma'_2} \cdots A_{i'_{N-2},i'_{N-1}}^{\sigma'_{N-1}} A_{i'_{N-1},0}^{\sigma'_N} \right)^\dagger \mathcal{O}_{\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_N} A_{0,i_1}^{\sigma_1} A_{i_1,i_2}^{\sigma_2} \cdots A_{i_{N-2},i_{N-1}}^{\sigma_{N-1}} A_{i_{N-1},0}^{\sigma_N} \quad (52)$$

特に物理量として Pauli 演算子 $Z = Z_1 \otimes Z_2 \otimes \cdots \otimes Z_N$ を選んだ場合、対応するダイアグラムは次図の通りである．

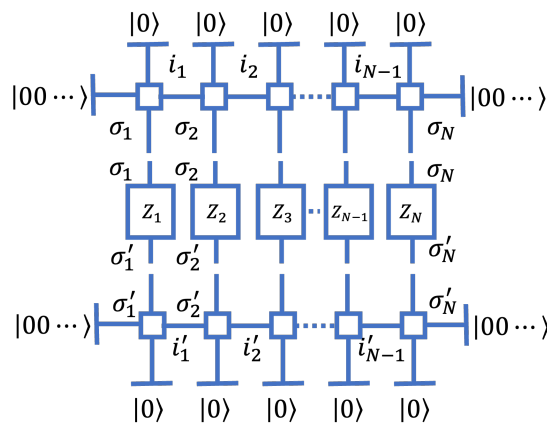


図 18: 物理量 Z の期待値

一方、3.3 節より量子状態 $|\psi\rangle$ を生成する量子回路に対する測定は物理量 Z に対する期待値 $\langle \psi | Z | \psi \rangle$ を得る操作であった．これより図 17 の量子回路において全ての量子ビットを測定する操作は MPS に対し物理量

Z の期待値を求めることに対応する. (図 19)

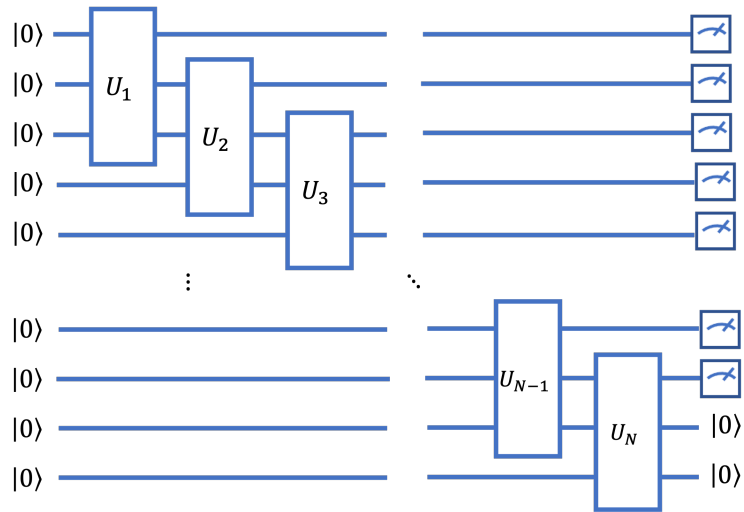


図 19: 測定部分も含めた MPS に対応する量子回路

以降は MPS に対応した図 19 のような量子回路を MPS-inspired ansatz [52] と呼ぶ. 最後に境界条件について議論する. 開放端条件と周期境界条件での構造について見る.

- 開放端条件

MPS と量子回路との対応づけの最後に触れた, 2 量子ビットについて考える.

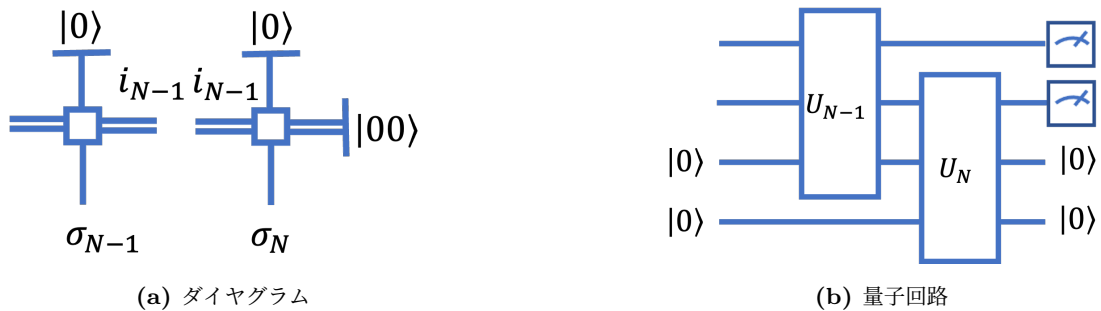


図 20: 量子回路の最後の 2 量子ビット部分

ダイアグラムでは bond qubit の数を bond index の本数として図示している. 量子回路は左から右へ演算が行われることを考慮すると, (b) では各ユニタリー演算子は $|0\rangle$ や 2 つの bond qubits を入力として情報を受け取り, 2 つの bond qubits と 1 量子ビットへの測定操作へ出力する. ユニタリー演算子の脚の本数という観点では, $|0\rangle$ により 1 本補充され測定により 1 本消費していると理解できる. MPS のダイアグラムにおいて bond qubit への測定操作は存在しないことから, これを回避することが MPS と量子回路との自然な対応と考える. そこで補充される $|0\rangle$ や bond qubit を段階的に減らすことにより自然な対応づけを実現した [53]. (図 19)

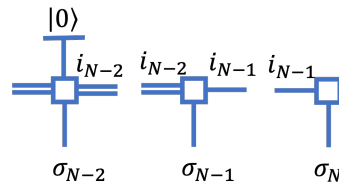


図 21: 開放端条件における MPS

また開放端条件における量子回路は次図のようになる。

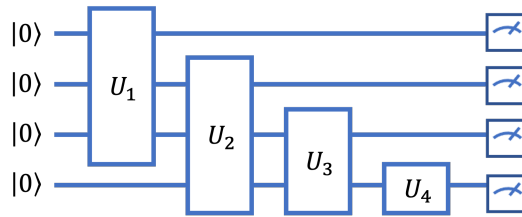


図 22: 開放端条件に対応する MPS-inspired ansatz

- 周期境界条件

この場合 1 番目と N 番目の MPS の要素が隣り合う。従って MPS のダイアグラムは次図のようになる。

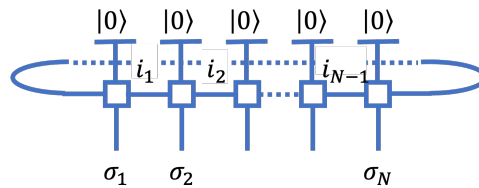


図 23: 周期境界条件での MPS

よって MPS のダイアグラムとユニタリ演算子との対応も 1 番目と N 番目の MPS の要素をつなぐように対応させれば (図 24)

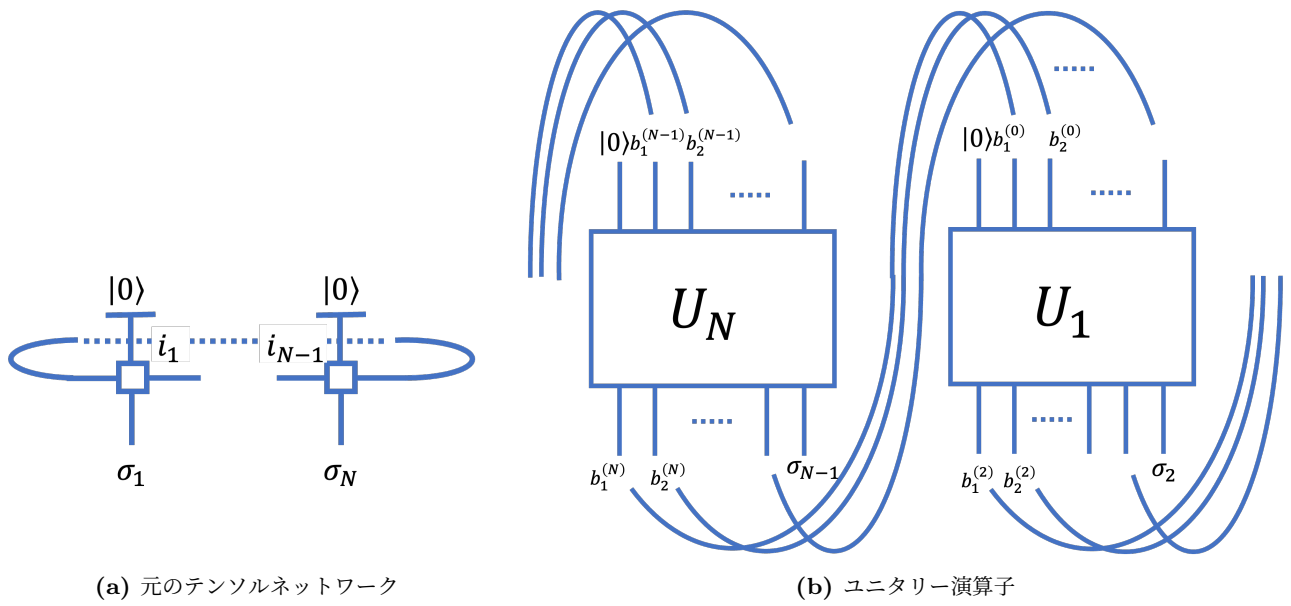


図 24: N 番目と 1 番目の MPS の要素についての対応

となる. ただし bond index $i_N = b_1^{(N)} b_2^{(N)} \dots$ と $i_0 = b_1^{(0)} b_2^{(0)} \dots$ に対しては $i_N = i_0 \Leftrightarrow (b_i^N = b_i^0 (i = 1, 2, \dots))$ とした. これはサイト数が 4 の MPS に対応する量子回路では以下のよ
うに表される.

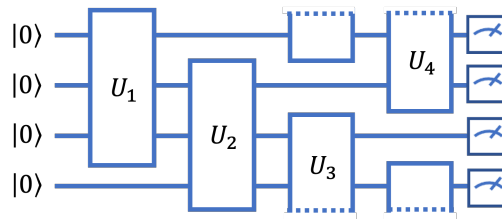


図 25: 周期境界条件に対応する MPS-inspired ansatz

本研究では開放端条件を扱うため図 22 のような回路により実験を行った.

5 物理モデル

本章では実験で用いた物理モデルである Schwinger モデルについて説明する。まず Schwinger モデルにより振る舞いが表現される量子色力学について概要を述べていく [54, 55].

5.1 量子色力学

この世界には電磁相互作用, 強い相互作用, 弱い相互作用そして重力相互作用の 4 種類の力が存在する。現在の標準模型は以上の相互作用のうち

- 電磁相互作用 (quantum electrodynamics, QED)
- 強い相互作用 (quantum chromodynamics, QCD)
- 弱い相互作用

と

- 上記の相互作用が働くクォークという粒子
- 強い相互作用を除いた力が作用するレプトンという粒子

に対する理論において多くの実験事実の説明に成功している。それぞれの相互作用の理論はゲージ原理に基づいて記述される。ゲージ原理とは、時空の各点において独立な変換を行なっても物理法則は変わらないことを課す原理である。ゲージ場という、相互作用を媒介する場を導入することにより、物質場とゲージ場の間の相互作用やゲージ場の運動を決定する役割を持つ。QED や QCD はこのゲージ原理に従って定式化される。QED では荷電粒子間に働く電磁相互作用を記述する。次式が自由な荷電粒子の Lagrangian である。

$$\mathcal{L}_D = \bar{\psi}(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi \quad (53)$$

光子による場 A_μ をゲージ場として、物質場とゲージ場への局所的な変換に対する Lagrangian の不変性を課すと \mathcal{L}_D は

$$\mathcal{L}_D \rightarrow \mathcal{L}'_D = \bar{\psi}(i\gamma^\mu (\partial_\mu + ieQA_\mu) - m)\psi \quad (54)$$

で表される。ここで e は素電荷, Q は電荷である。また、光子は質量が 0 であることから質量 0 の Klein-Gordon 方程式を満たすことやローレンツ不変性, ゲージ不変性を考慮することにより、光子場の運動項 \mathcal{L}_A は

$$\mathcal{L}_A = -\frac{1}{4}(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu)(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) \equiv \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \quad (55)$$

となる。ここで $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ は電磁場の強さと呼ばれる。以上より QED における Lagrangian \mathcal{L}_{QED} は

$$\mathcal{L}_{\text{QED}} = \mathcal{L}'_D + \mathcal{L}_A \quad (56)$$

$$= \bar{\psi}(i\gamma^\mu (\partial_\mu + ieQA_\mu) - m)\psi - \frac{1}{4}(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu)(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) \quad (57)$$

続いては強い相互作用についてである。強い相互作用をする粒子をハドロン, しない粒子をレプトンといい、ハドロンには $p, n, \pi_0, \pi^\pm, \Lambda_0$ など非常に多くの種類が存在している。クォークはハドロンを構成するさらに微小な粒子で u, d などが存在し、粒子に固有の性質が反対の符号であるクォークを反クォークという。こ

これらの種類の違いはフレーバーと呼ばれる。ここではクォークを q_f , $f = \{1, \dots, n_q\}$ と表記する。QCD はクォークを束縛することでハドロンを構成する様子について記述する理論である。クォークの持つ 3 自由度として (r, g, b) を導入する。対応する反クォークは $(\bar{r}, \bar{g}, \bar{b})$ と表される。ハドロンとしては (r, g, b) または $(\bar{r}, \bar{g}, \bar{b})$ の組み合わせ (バリオン), もしくは $(r, \bar{r}), (g, \bar{g}), (b, \bar{b})$ の組み合わせ (メソン) として存在することから, 色の三原色の考え方より, カラーと呼ばれる。そのためハドロンとして存在する粒子はカラーを持たないと理解できる。自由なクォーク $q_f = (q_{fr}, q_{fg}, q_{fb})$ に対する Lagrangian 密度は

$$\mathcal{L}_q = \sum_{f=1}^{n_q} \bar{q}_f(x) (i\gamma^\mu \partial_\mu - m_f) q_f(x) \quad (58)$$

と表される。この時 m_f はクォーク q_f の質量を意味する。QCD ではグルーオンによる場 $G_\mu^a(x)$ をゲージ場として, 物質場とゲージ場への局所的な変換に対する Lagrangian の不変性を課す。これにより Lagrangian \mathcal{L}_q は

$$\mathcal{L}_q \rightarrow \mathcal{L}'_q = \sum_{f=1}^{n_q} \bar{q}_f(x) \left(i\gamma^\mu \left(\partial_\mu + ig_s \sum_{a=1}^8 G_\mu^a(x) \frac{\lambda^a}{2} \right) - m_f \right) q_f(x) \quad (59)$$

となる。ただし λ^a はゲルマン行列と呼ばれる行列である。QCD に関する物質場やゲージ場のこれまでの記述は QED をより一般的に扱ったものとして考えられることからグルーオン場の運動項は QED と同様に考えて

$$\mathcal{L}_G = -\frac{1}{4} \sum_{a=1}^8 G_{\mu\nu}^a G^{a\mu\nu} \quad (60)$$

と表される。以上より QCD における Lagrangian 密度 \mathcal{L}_{QCD} は

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = \mathcal{L}'_q + \mathcal{L}_G \quad (61)$$

$$= \sum_{f=1}^{n_q} \bar{q}_f(x) \left(i\gamma^\mu \left(\partial_\mu + ig_s \sum_{a=1}^8 G_\mu^a(x) \frac{\lambda^a}{2} \right) - m_f \right) q_f(x) - \frac{1}{4} \sum_{a=1}^8 G_{\mu\nu}^a G^{a\mu\nu} \quad (62)$$

となる。以上のようにして記述される QCD の特徴に, 漸近的自由性とクォークの閉じ込めがある。

- 漸近的自由性

場の量子論のパラメータは量子補正の影響で, 対象とするエネルギーのスケールによって有効な値が変化する。ゲージ結合定数もその一つである。摂動論との関連を述べるためゲージ結合定数を g の代わりに $\alpha = g^2/4\pi$ と書くと, QED と QCD のそれぞれのゲージ結合定数 α_e, α_s は

$$\begin{aligned} - \alpha_e &= \frac{e^2}{4\pi} \\ - \alpha_s &= \frac{g_s^2}{4\pi} \end{aligned}$$

となる。より高いエネルギーでの相互作用を考えることはより微小な相互作用をみることを意味し, それに対応して QCD と QED は

- α_e : 増加
- α_s : 減少

となることが実験的に確認されている。(図 26)

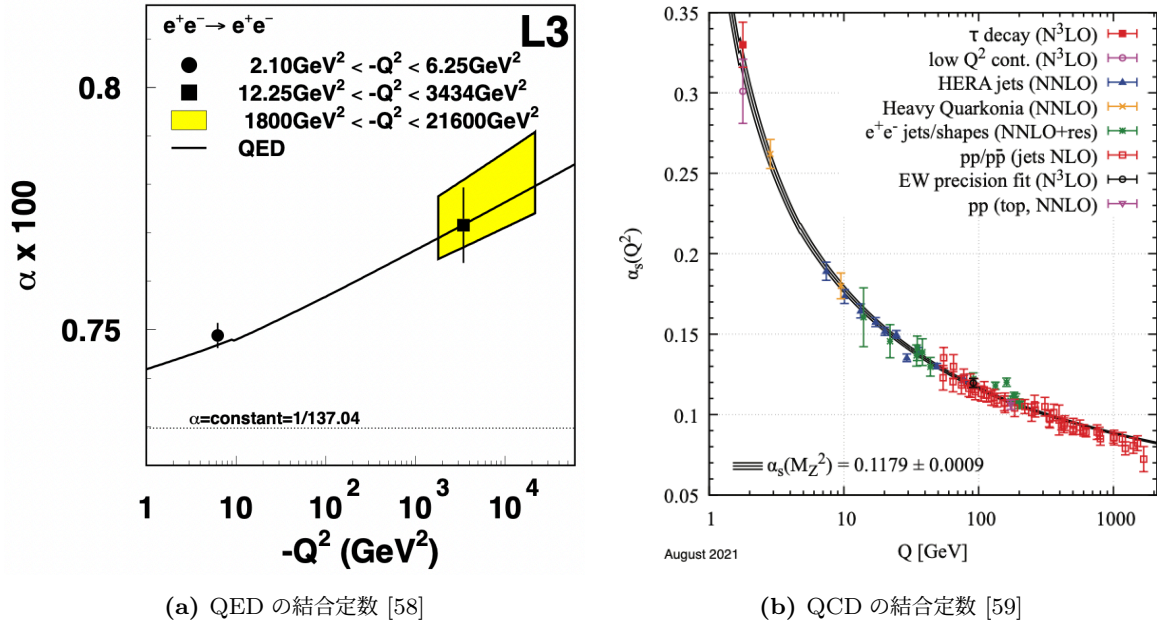


図 26: エネルギースケールによる結合定数の変化

横軸はエネルギー、縦軸はそれぞれの結合定数を表している。特に QCD の結合定数 α_s は高エネルギーとなる程小さくなっていき自由場に近づくことがわかる。QCD におけるこの性質は漸近的自由性と呼ばれる。

- クォークの閉じ込め低エネルギーにおける現象で単独ではカラーを持つ粒子を取り出すことができないことを指す。図 26 を見ると低エネルギーでは α_s が非常に大きいことから、この状況では結合定数に関する摂動以外の手法により解析を行う必要がある。

本節の前半にて QED や QCD の Lagrangian について考えた。場の理論における定式化の方法には、主に Lagrangian \mathcal{L} により定まる経路積分 $\prod_m \int d\phi_m \exp(\int dx \mathcal{L})$ を行う経路積分形式と演算子により状態やその変化を追う演算子形式がある。素粒子物理におけるシミュレーション方法には経路積分形式を利用するモンテカルロ法が広く用いられているが、被積分関数である指数関数の肩の成分によっては収束しないという符号問題が存在する。QCD のシミュレーションにおいても符号問題の影響によりシミュレーションが困難な場合がある。そのため次節で説明する Schwinger モデルのような toy モデルを利用した QCD へのアプローチを取り組まれている。

5.2 Schwinger モデル

続いて Schwinger モデルについて説明する [56, 57, 62]。これは次の (1+1) 次元の Lagrangian \mathcal{L} で表現される。

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + i\bar{\psi}\gamma^\mu(\partial_\mu + igA_\mu)\psi - m\bar{\psi}\psi \quad (63)$$

1 項目は電磁場の運動項、2 項目と 3 項目は光子場とディラック粒子の相互作用を表す。量子コンピュータでは有限次元 Hilbert 空間上での演算を行うが、式 (63) は無限次元の Lagrangian であるためそのままでは実行することができない。そこでまず N サイトの 1 次元の格子モデルへと変換する。式 (63) に対応する

Hamiltonian H は次式で表される.

$$H = \frac{1}{2}\Pi^2 - i\bar{\psi}\gamma^1(\partial_1 + igA_1)\psi + m\bar{\psi}\psi \quad (64)$$

ここで $\Pi = \partial_0 A_1$ である. 次にディラック粒子 $\psi(x) = (\psi_u(x), \psi_d(x))^T$ を次のように変換することで格子上のモデルに変換することができる [64].

$$\frac{\chi_n}{\sqrt{a}} \equiv \begin{cases} \psi_u(x) & n:\text{even} \\ \psi_d(x) & n:\text{odd} \end{cases} \quad (65)$$

$n \in \{0, 1, \dots, N\}$ であり, a を格子の間隔として $x = na$ としている. この時ゲージ場の演算子は

$$U_n \Leftrightarrow e^{-iagA^1(x)} \quad (66)$$

$$L_n \Leftrightarrow -\frac{\Pi(x)}{g} \quad (67)$$

が対応する. また χ_n, U_n, L_n は以下の関係式を満たす.

$$\{\chi_n^\dagger, \chi_m\} = \delta_{mn}, \quad \{\chi_n, \chi_m\} = 0, \quad [U_n, L_m] = \delta_{mn}U_n \quad (68)$$

これより Hamiltonian は

$$H = J \sum_{n=0}^{N-2} L_n^2 - iw \sum_{n=0}^{N-2} \left(\chi_n^\dagger U_n \chi_{n+1} - \chi_{n+1}^\dagger U_n^\dagger \chi_n \right) + m \sum_{n=0}^{N-1} (-1)^n \chi_n^\dagger \chi_n \quad (69)$$

となる. ただし $w = 1/(2a)$, $J = ga^2/2$ である. 次に物理的に許される状態のみをとるように制約を課す. QED においては Gauss law を制約とすればよい [63]. 格子場における Gauss law は

$$L_n - L_{n-1} = \chi_n^\dagger \chi_n - \frac{1 - (-1)^n}{2} \quad (70)$$

より境界条件を $L_{-1} = 0$ として上式を解き, ゲージ場を $U_n = 1$ と固定すれば L_n, U_n を取り除くことができる [57]. スピン系に対する方程式を得るために χ_n に Jordan-Wigner 変換

$$\chi_n = \frac{X_n - iY_n}{2} \prod_{i=0}^{n-1} (-iZ_i) \quad (71)$$

を行えば Hamiltonian は次のように表せる.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \frac{w}{2} \sum_{m=0}^{N-1} (X_m X_{m+1} + Y_m Y_{m+1}) + \frac{J}{2} \sum_{n=0}^{N-3} \sum_{m=n+1}^{N-2} (N - m - 1) Z_n Z_m + \frac{J}{2} \sum_{n=0}^{N-2} \frac{1 + (-1)^n}{2} \sum_{i=0}^n Z_n \\ + \frac{m}{2} \sum_{n=0}^{N-1} (-1)^n Z_i + Const. \quad (72) \end{aligned}$$

ここで X_n, Y_n, Z_n は n 番目のサイトに作用する Pauli 演算子である.

Schwinger モデルは (1+1) 次元のモデルではあるが, 閉じ込めを示すポテンシャルを持つ [60], カイラル対称性が破れる [61], など QCD と同様の性質を持っていることで知られており, Schwinger モデルに対する研究も盛んに行われている [58, 61, 62, 65–67].

6 MPS-inspired ansatz の実装 (MPS を用いた VQE)

本章では MPS を活かした ansatz により, 従来の VQE より優れた収束性能をもつ ansatz の開発を試みた.

6.1 実験の概観

それぞれの実験の詳しい説明に入る前に, 各節の実験内容について概要を述べる. 本章では MPS-inspired ansatz を用いた 3 種類の実験を行う.

まず 6.2 節において従来の VQE ansatz との性能の比較を行う. ここでは従来の VQE ansatz として, 3.2 節で紹介した HEA や HVA を用いる. 従来の ansatz では量子ビット数が増えるに従って Hilbert 空間が大きくなることから 3.5 節で述べた local minima の影響が強まり近似性能が落ちることが確認されている [39]. 一方 MPS は Hilbert 空間全体に比べて小さな部分空間のみを探索することから, MPS-inspired ansatz は local minima の影響が少なく近似性能の低下が抑えられると考えた.

続いて 6.3 節では量子回路の途中で測定を行う操作 (mid-circuit measurement) を利用した実験を行った. 図 22 のように MPS-inspired ansatz は作用するユニタリーゲートが一方向にずれてゆき, 一度演算が終わった量子ビットには再度ゲートが作用しない構造を持つ. そこで mid-circuit measurement と $|0\rangle$ への初期化操作を共に用いた量子ビットの再利用を行うことで量子ビット数を抑えられると考えた. 特に本研究は実機ではなく simulator により実験を行っていることから, 実機によるノイズの影響は存在しない. そのため本実験では, mid-circuit measurement を用いて少ない量子ビット数の ansatz となった場合にも, 通常の MPS-inspired ansatz と同等の精度の結果が得られるかどうかを調べるのが目的である.

最後に 6.4 節では並進対称性を利用した最適化手法について取り組んだ. 1 次元量子系では, サイト数が非常に大きい場合に境界部分以外で一様な状態 (物理量を測定すると同じ結果を出力する状態) となることが知られている. そこで本研究で近似を行う Schwinger モデルの基底状態も, サイト数が大きい場合には境界以外では一様な状態が実現されると考えた. これは MPS-inspired ansatz が最適化後に出力する状態としては, MPS の要素に対応するユニタリーゲートごとに等しいパラメータを持つ ansatz となることを意味する. そこで 2 回の最適化を行うことを考えた. まず MPS-inspired ansatz のユニタリーゲートごとにパラメータを固定して最適化を行い, 次に全てのパラメータを独立にした上で初期値に 1 回目の結果を用いる. 最終的に目指す状態が境界以外で一様な状態であることから, 1 段階目の最適化で完全に一様な ansatz として最適化を進めて 2 段階目の最適化で境界部分の調整を行うことができると考えた. この手法ではパラメータ数の少ない ansatz で最適化を進めることが可能であり, パラメータ数の少ない ansatz の方が最適化が速くなる傾向にあることから, 並進対称性を利用した以上の手順によって同じ精度の結果をより少ない最適化過程で得られると考えた.

6.2 従来の VQE との比較

本節では 4.3 節で示した構造を持つ MPS-inspired ansatz について従来の VQE との性能の比較を行う. MPS は bond dimension を変化させることで下のように張る部分空間の大きさを変化させることができる.

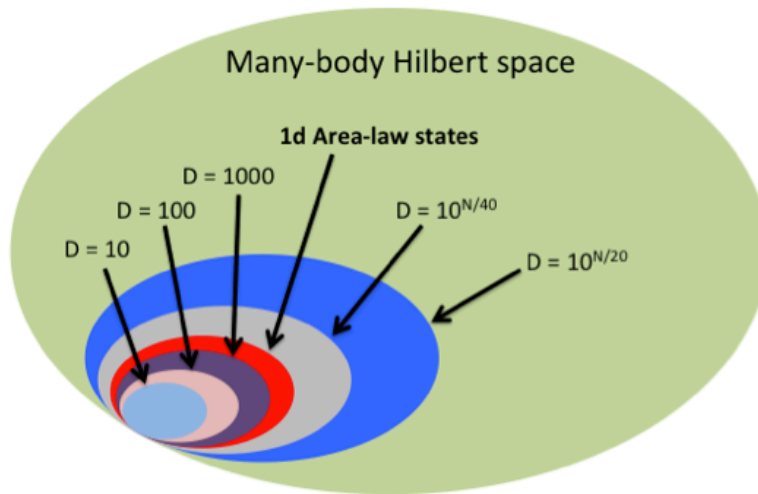


図 27: bond dimension ごとの部分空間の大きさ [41]

MPS を ansatz の構造として用いることで, Hilbert 空間全体ではなく部分空間を探索してより効率良く量子状態を生成しようと考えた.

性能についてみる前に, MPS-inspired ansatz が Hilbert 空間を部分的に張り bond dimension によりその大きさが変化することを確認する. 量子回路の量子ビット数は 12 で固定し, bond dimension は 4, 16, 256, 4096 と変化させた. ansatz の張る部分空間の大きさは entanglement entropy により確認した.

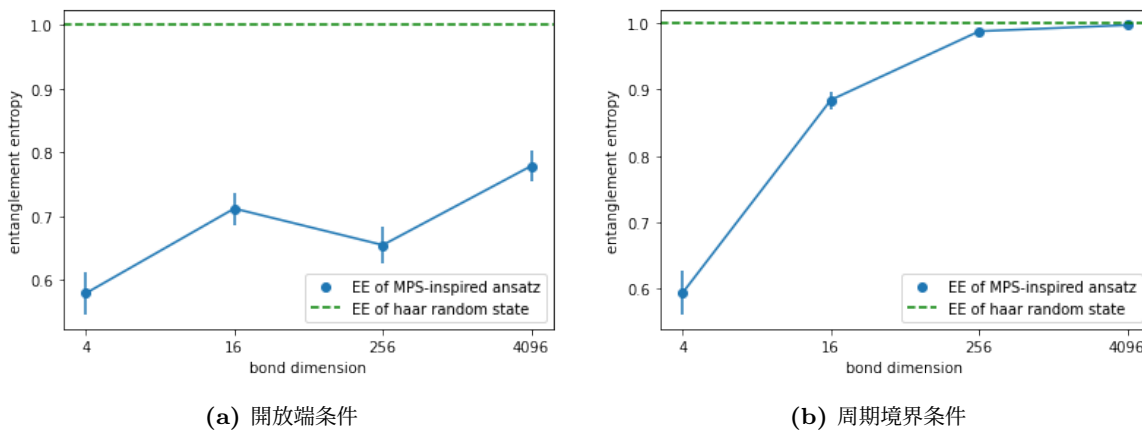


図 28: 境界条件ごとの MPS-inspired ansatz の entanglement entropy

左は開放端条件, 右は周期境界条件での結果を表す. 点線は Haar measure により random に取り出したユニタリーゲートによる Haar random state の entanglement entropy を表す. Hilbert 空間から random に取り出した状態は高い確率で非常にエンタングルした状態であることから, 点線はほとんど最大限エンタングルした状態の entanglement entropy を表している [68]. いずれの境界条件の場合も bond dimension が増えるにつれて Haar random state へ漸近していることがわかる.

それでは従来の VQE との比較に移る. 4.3 節で説明した MPS-inspired ansatz に対し, 3.2 節で説明した HEA と HVA との比較を行う. それぞれの ansatz の設定は次のようになっている.

- MPS-inspired ansatz

4.3 節に示したように、一部の量子ビットを共有するようなユニタリーゲートを連続して作用させる。わかりやすさのためにサイト数が 4 の場合の量子回路を再度載せる。

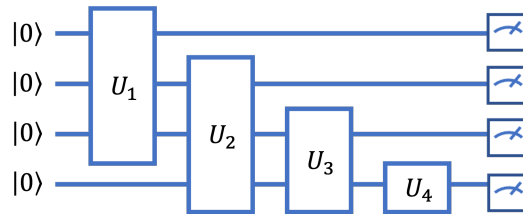


図 29: 開放端条件に対応する MPS-inspired ansatz

特にユニタリーゲート U (上図では U_1 や U_2) について、パラメータ数の異なる 3 種類の場合 (21, 24, 27) で収束性能をみている。このパラメータ数は 3 量子ビットの任意の状態を表すために必要なパラメータ数 15 より大きな値であることから決めている。参考にサイト数が 4 でユニタリーゲートに含まれるパラメータ数が 21 の MPS-inspired ansatz の一例を示す。回路が長いので 3 分割されており、灰色のラインで分割された回路部分が前から順に上図のユニタリーゲートに対応している。

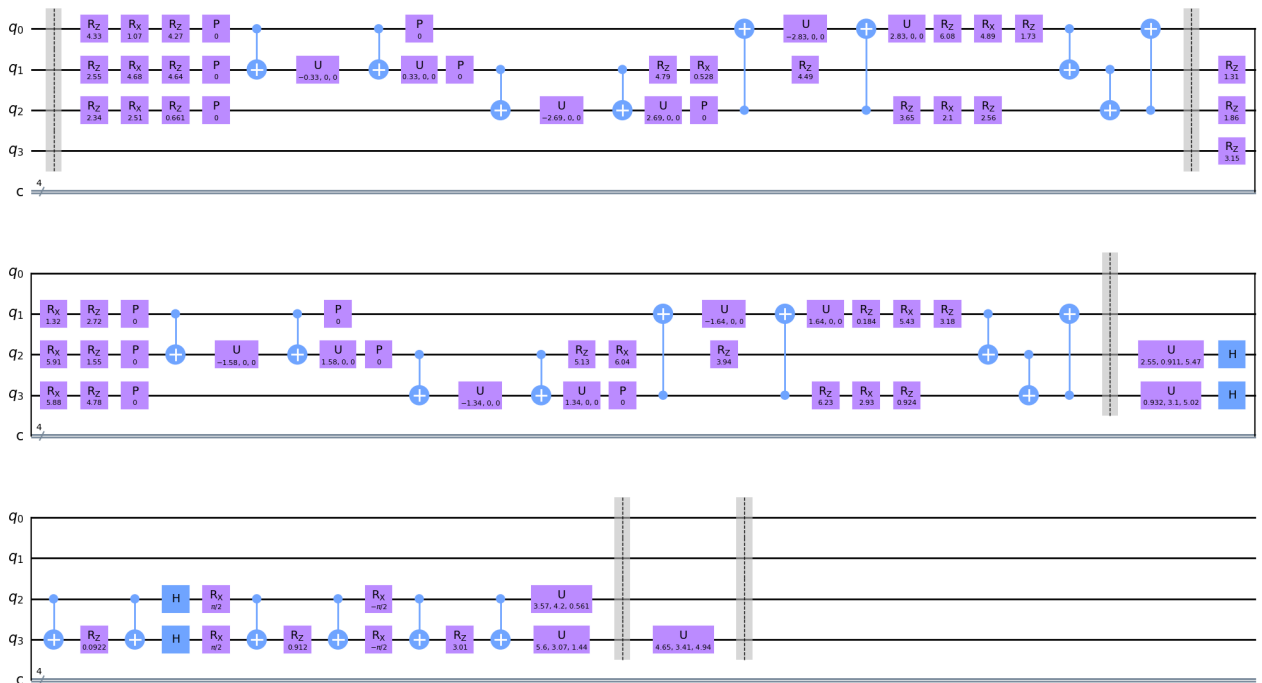


図 30: 用いた MPS-inspired ansatz の例

- HEA

3.2 節で述べたように、単一量子ビットへ作用する回転ゲートの層と隣り合う量子ビットに対するエンタングルゲートの層を繰り返すことで実装している。HEA に関しては回路構造に多少の自由度があることから、本実験では合計のパラメータ数が異なる 3 種類の MPS-inspired ansatz に対して同じパラメータ数となるよう ansatz を作成し比較を行った。サイト数や対応させる MPS-inspired ansatz により構造が異なることから一般式では示せない。そのため参考としてサイト数が 4 でユニタリーゲートに含まれるパラメータ数が 21 の MPS-inspired ansatz に対応した HEA を載せる。エンタングル

ゲートに関しては効率的に量子ビットがエンタングルされるよう brick wall 状 [69] に配置した。

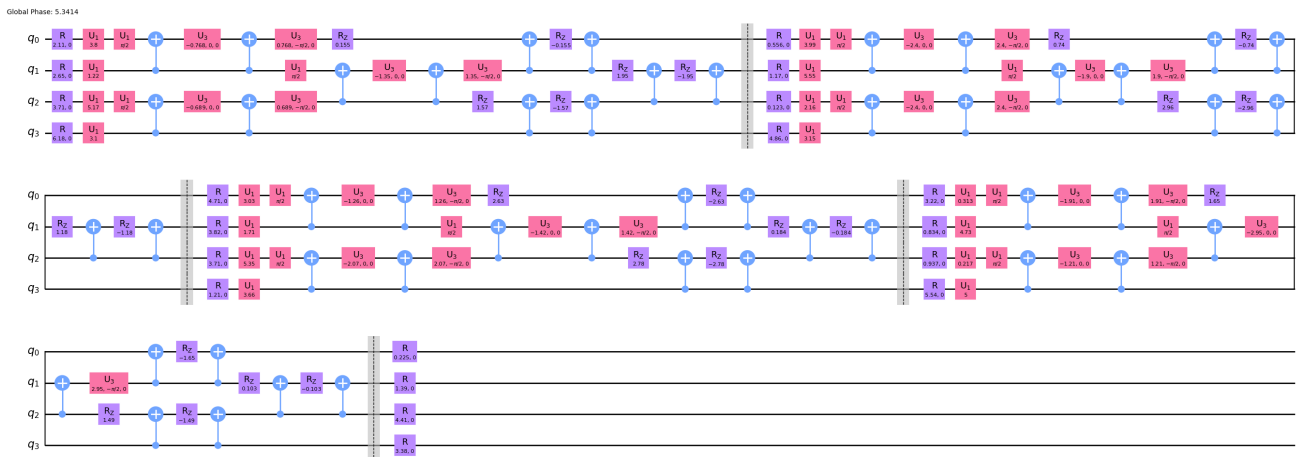


図 31: 用いた HEA の例

- HVA

HVA ではまず初期状態を準備し、次にパラメータにより基底状態を生成する。初期状態は扱う Hamiltonian のいずれかの項の基底状態である必要があった。Schwinger モデルに対しては式 (72) の 3 項目の質量項の基底状態 $|1010\dots\rangle$ を利用した。状態生成を行う部分に関しては、5 章で述べた項を表すようにゲート配置を行った。参考としてサイト数 4 の場合を載せる。回路の初めに全ての量子ビットへ作用している X ゲートが初期状態準備、その後は分割されている要素毎に式 (72) の Hamiltonian の $X_i X_{i+1}, Y_i Y_{i+1}, Z_m Z_n, \sum_n Z_n, Z_n$ の各項に対応している。

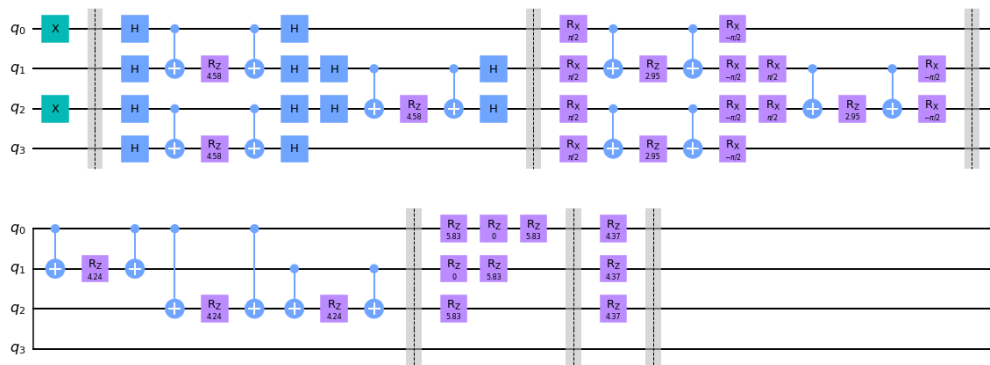


図 32: 用いた HVA の例

HVA は Hamiltonian に対応した上図のような ansatz を繰り返すことにより精度を高めることができる [24]. 6.2 節の実験では上図を 1layer として 5,7,9layer の場合での精度を比較に用いている。

本節の実験は Qulacs [70] によって行い、optimizer には COBYLA [71] を用いた。Qulacs では量子回路を状態ベクトルとして扱い Hamiltonian に対する期待値を計算することができるため、Hamiltonian の期待値を決定する際に測定による統計誤差が生じない。

上記のそれぞれの ansatz に対しパラメータ数や layer 数の異なるものを用意し、Schwinger モデルの基底

状態の近似精度によって比較を行った。試行回数は 100 回である。それでは結果をみる。

まずは最も良い精度となったコスト関数の振る舞いを示す。

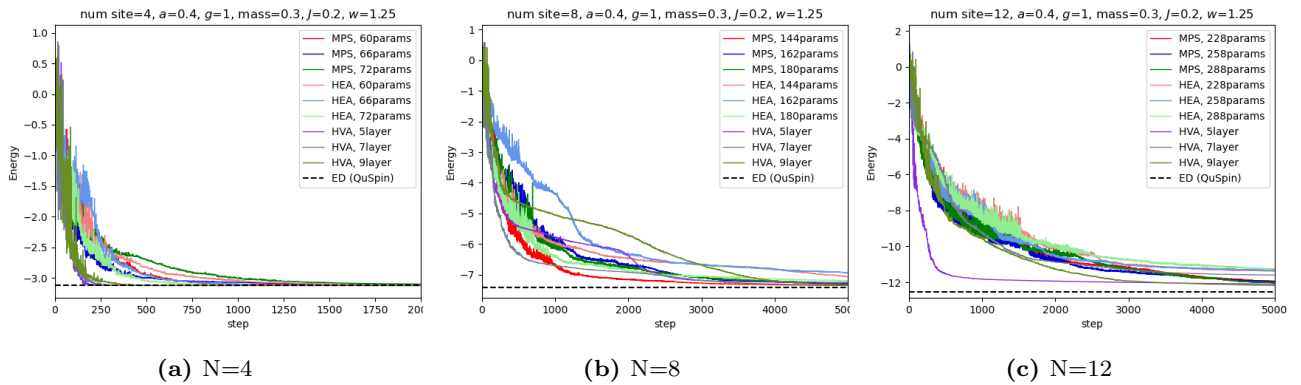


図 33: サイト数 N ごとのコスト関数の様子

横軸は最適化でのステップ数, 縦軸はエネルギーの大きさを表している。ここでは濃い赤, 青, 緑色のグラフが MPS-inspired ansatz, 薄い赤, 青, 緑色のグラフが HEA, 紫, 灰, 黄緑色のグラフが HVA の結果を示している。同じ ansatz においても, 総パラメータ数の違いを異なる色として表している。全ての ansatz において同様に厳密対角化の値へ収束しているとともに, いずれのサイト数の場合にも step 数の少ない段階から HVA は収束がよく進んでいることがわかる。

次にエネルギー比を示す。

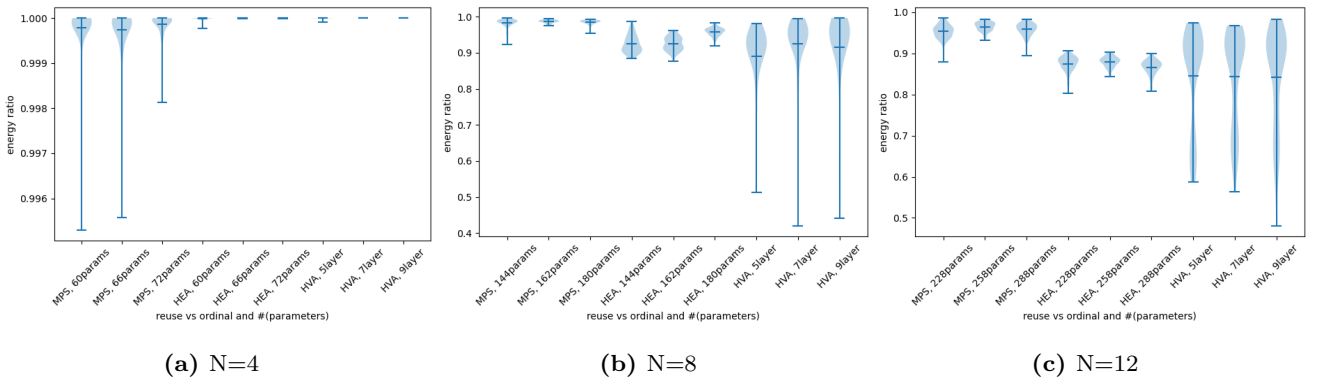


図 34: サイト数 N ごとのコスト関数の様子

横軸は比較する ansatz の種類, 縦軸は収束値の値を厳密対角化の解で割った値を示しており, 1 に近いほど良い精度であることを意味する。図はバイオリンプロットと呼ばれるもので, 上下のバーがデータの分布する幅, 中心のバーは平均値, 縦軸方向に広がる山はデータの分布を示している。各 ansatz のバイオリンプロットの平均値と分布の幅については表 1 のようになっている。

表 1: エネルギー比の平均値と分布の幅

サイト数 N	平均値			分布の幅		
	MPS-inspired	HEA	HVA	MPS-inspired	HEA	HVA
4	0.9998	1.0000	1.0000	0.9963-1.0000	0.9999-1.0000	1.0000
8	0.9848	0.9355	0.9096	0.9504-0.9952	0.8933-0.9764	0.4581-0.9908
12	0.9588	0.8729	0.8432	0.9019-0.9839	0.8718-0.9027	0.5436-0.9746

表は MPS-inspired ansatz, HEA, HVA の 3 種類の ansatz での収束値に関して, その分布の平均値と幅を示している. $N = 4$ の時には MPS-inspired ansatz の近似精度が HEA や HEA に比べ低くなっている. 一方サイト数が増えるにつれて HEA や HVA はエネルギー比の平均が $N = 8$ では 0.92 前後, $N = 12$ では 0.85 前後と下がっているのに対し, MPS-inspired ansatz では $N = 8, 12$ の場合にもエネルギー比が 0.95 以上となっており, 高い近似精度を示している. 収束値の分布についても HEA や HVA はサイト数の増加で $N = 12$ の時には HEA で 0.87-0.9, HVA で 0.54-0.97 と低い精度まで広がらついているのに対し, MPS-inspired ansatz は 0.9 以上と高い精度を保っている. また HVA の収束値の分布に関しては, $N = 8$ で精度の悪い方へ分布が広がり, $N = 12$ ではエネルギー比が 0.65 付近に小さなピークが見られる. これについては, [72] にて HVA の layer 数に対する local minima の性質の変化が確認されていることから, 本研究においても同様の影響により local minima が収束を妨げていると考えられる. 以上より MPS を用いた VQE ansatz の実装により HEA や HVA に比べて良い精度で基底状態を生成できることが確認できた.

6.3 mid-circuit measurement

続いて mid-circuit measurement を用いて量子ビット数を抑えた回路の実装に取り組む. mid-circuit measurement とは回路の途中で測定を行う操作のことである. $|0\rangle$ へ初期化する操作と共に用いることで量子ビットの再利用が可能となる. これを利用して量子ビット数を抑えた量子回路の実装が行われている [73–77]. 4.3 節にて図示した MPS-inspired ansatz は一度演算が終わると測定まで演算の行われない量子ビットが多く存在する. そこで mid-circuit measurement を活用し量子ビット数を抑えた量子回路の実装に取り組んだ. 演算の終わった量子ビットを mid-circuit measurement と初期化により次の演算で初めて利用される量子ビットへと変換した. 6.1 節で説明した本来の MPS-inspired ansatz との対応は以下のようにになっている.

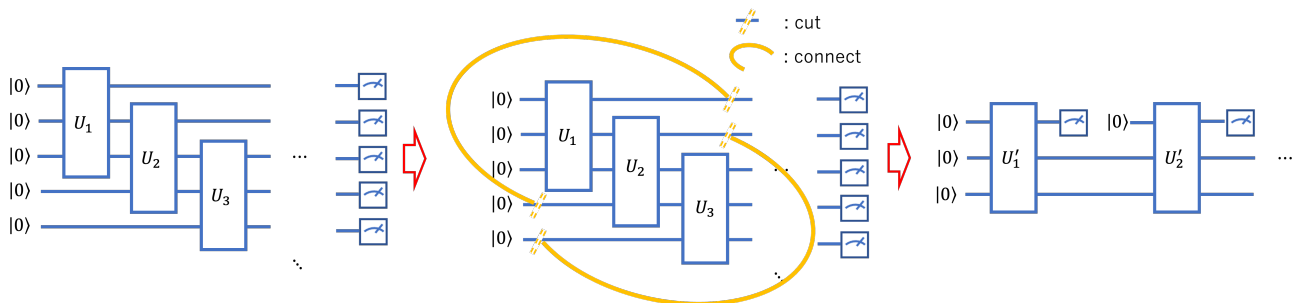


図 35: mid-circuit measurement を行う回路との対応

左が元の MPS-inspired ansatz, 中央が使い終わった量子ビットの mid-circuit measurement と初期化

を結びつける様子, 右が mid-circuit measurement を利用した MPS-inspired ansatz である. 元の回路と mid-circuit measurement を利用した回路は SWAP ゲートにより等価な回路となっている. 本節の実験では量子ビットに対する mid-circuit measurement と初期化を正確に行うために, これらの機能がフレームワーク内の関数として用意されている Qiskit [78] を利用し, optimizer は前節と同様に COBYLA を用いた. また本実験では回路の途中で測定という非ユニタリーな操作を行っていることから, 量子回路を状態ベクトルとして Hamiltonian の期待値を得るという Qulacs の手法は利用できない. そのため量子回路を多数回実行し, Hamiltonian の期待値をサンプリングにより求める方法を用いた. 期待値を決定するために量子回路を実行する回数は shot 数と呼ばれる. shot 数が多いほど精度の高い結果が得られる. (図 36)

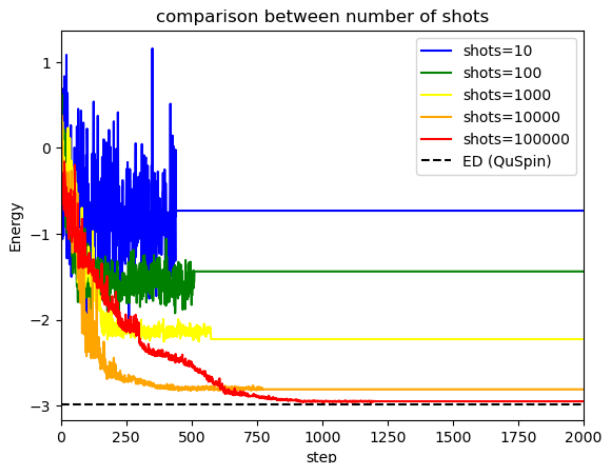


図 36: shot 数に対する近似精度の変化

上図はサイト数 4, ユニタリーゲートのパラメータ数が 21 の MPS-inspired ansatz においてショット数を 10 から 1000000 まで変化させた時のコスト関数である. shot 数が多いほど高い精度で収束していることが確認できる. しかし shot 数が多くなる程実行時間が長くなってしまふ. そのためサイト数が 4 の場合にて精度と実行時間を考慮して shot 数を 10000 として実験を行った. 実験は MPS-inspired ansatz に対し mid-circuit measurement を用いた場合とそうでない場合での性能を比較した. 本実験でも 100 回試行を行っている.

まず最も精度良く収束したコスト関数は次の通りである.

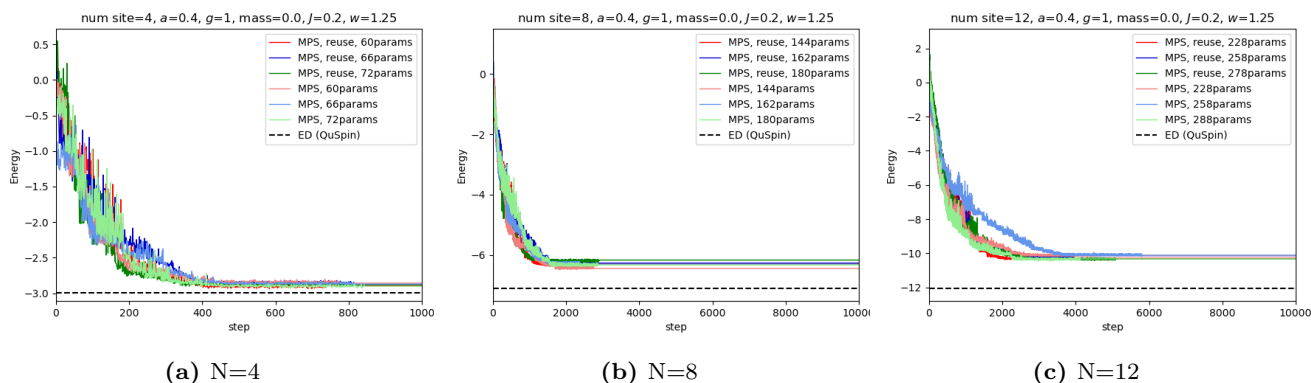


図 37: サイト数 N ごとのコスト関数の様子

サイト数が増えるにつれて厳密対角化の解から離れてしまっている。これは [27] にて確認されているように、有限で一定の shot 数では量子ビット数が増えるほどコスト関数の勾配が減少することが影響していると考えられる。一方図 37 では収束精度には mid-circuit measurement を加えた場合とそうでない場合での大きな違いは見られない。

続いてエネルギー比である。

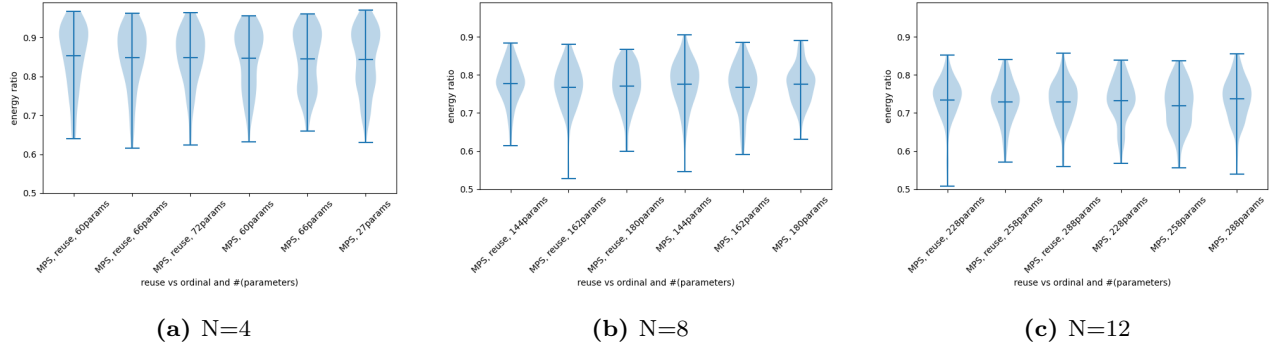


図 38: サイト数 N ごとのエネルギー比の様子

mid-circuit measurement を利用した MPS-inspired ansatz の結果が左の 3 つのプロット、通常の MPS-inspired ansatz の結果が右の 3 つのプロットに対応している。mid-circuit measurement を用いた場合とそうでない場合において、平均値とその分布の相対的な様子には大きな違いは見られない。またエネルギー比の平均値と分布の幅は次の表のようになっている。

表 2: エネルギー比の平均値と分布の幅

サイト数 N	平均値		分布の幅	
	あり	なし	あり	なし
4	0.8502	0.8448	0.6265-0.9639	0.6303-0.9621
8	0.7718	0.7727	0.5806-0.8772	0.5891-0.8936
12	0.7305	0.7293	0.5461-0.8497	0.5539-0.8440

表は mid-circuit measurement を利用した ansatz(あり) と利用していない ansatz(なし) に関して、その分布の平均値と幅を示している。サイト数が増えるに従って平均値は 0.85($N=4$) から 0.73($N=12$) へと小さくなり、分布の幅も 0.62-0.96($N=4$) から 0.55-0.84($N=12$) と小さい値へ移動しており、精度の低下が確認される。

本節の最後にそれぞれの手法において使用している量子ビット数を次図に示す。

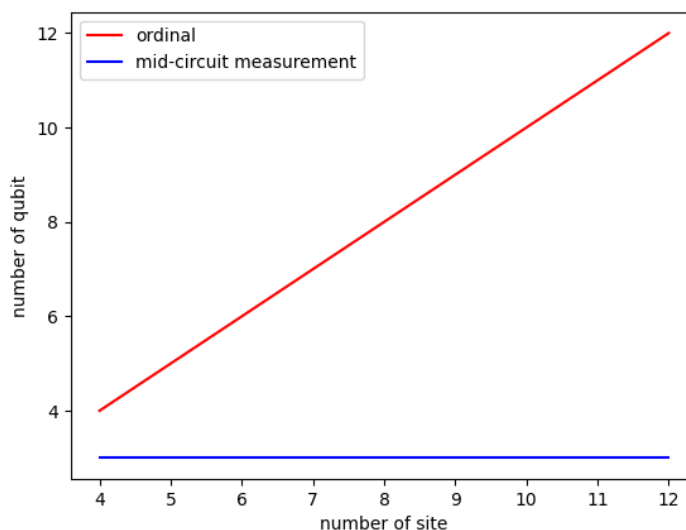


図 39: 使用した量子ビット数の比較

通常の MPS-inspired ansatz ではサイト数に比例して量子ビット数が増加するが mid-circuit measurement を利用する場合は一定の量子ビット数での回路の実装が可能となっている。本実験では physical qubit を 1 つ, bond qubit を 2 つ用いていることから 3 量子ビットで一定となっている。

以上の比較より mid-circuit measurement を利用して量子ビット数を抑えた場合にも通常の MPS-inspired ansatz と同様の精度の結果が得られることが確認できた。

6.4 並進対称性

最後に並進対称性を活かした MPS-inspired ansatz について考える。今回のような 1 次元量子系では十分サイト数が多い場合に、境界を除いたサイトで状態が一様となることが考えられる。このことより最終的に求めるパラメータにも並進対称性を持ったような近い値を取ると考えられる。そこで本節では MPS の要素ごとに近いパラメータの値に収束すると考えて

1. MPS の要素のパラメータごとに同じ値とする、並進対称性を持った量子回路
2. 全てのパラメータが独立な量子回路

の順に最適化を行い、精度を保ったままより少ないステップ数や実行時間での状態生成を試みた。(図 40) ただし 2 番目の最適化での初期値には 1 番目の最適化の結果を用いる。

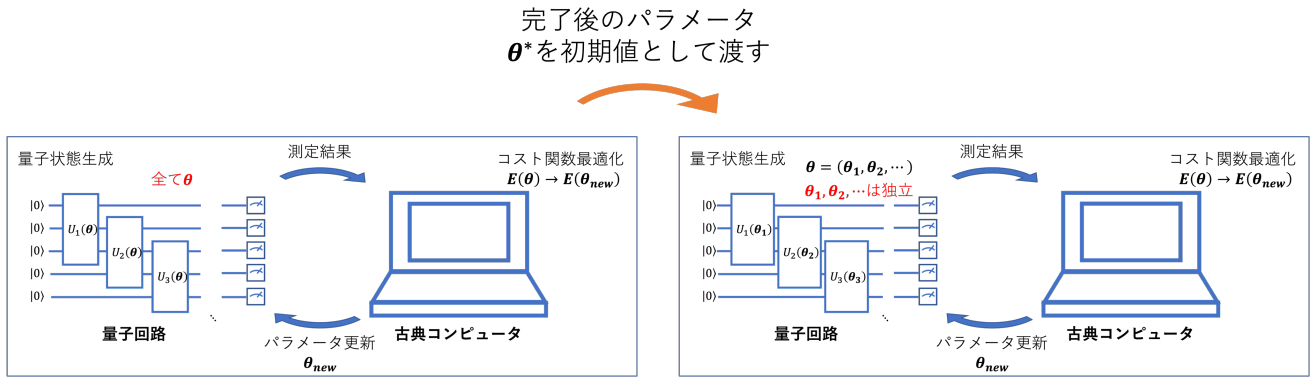


図 40: 並進対称性を活かした最適化方法

本節では 6.1 節で導入した MPS-inspired ansatz との比較を行う. シミュレーションには Qulacs を利用した.

また optimizer に関しては, 並進対称性を利用する手法では初期値が最適化に影響を及ぼす. optimizer には勾配を利用するものとしなないものが存在するが, 良い初期値であること (1 回目の最適なパラメータであること) が活かされる optimizer である必要があった. そこで gradient-free と gradient-based の様々な optimizer で比較を行った. サイト数 4, MPS-inspired ansatz におけるユニタリーゲートのパラメータ数が 21 であるような状況での結果は次の通りである. 図 41 は勾配をパラメータ更新に用いない optimizer, 図 42 は用いる optimizer によるコスト関数である.

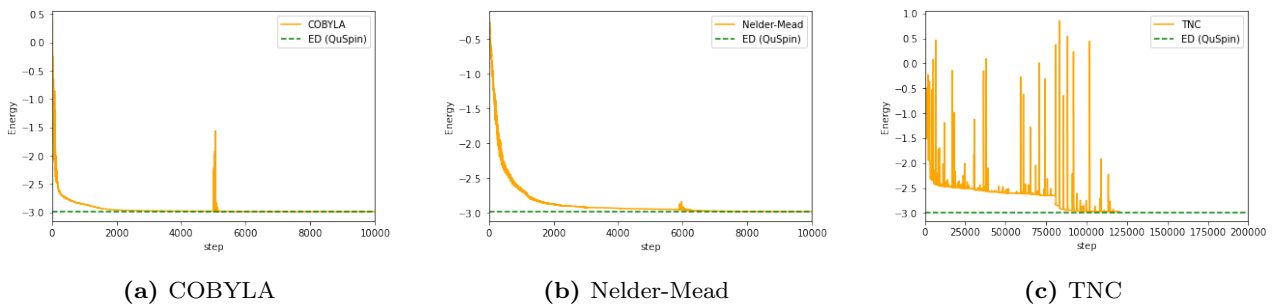


図 41: 勾配を利用しない optimizer によるコスト関数

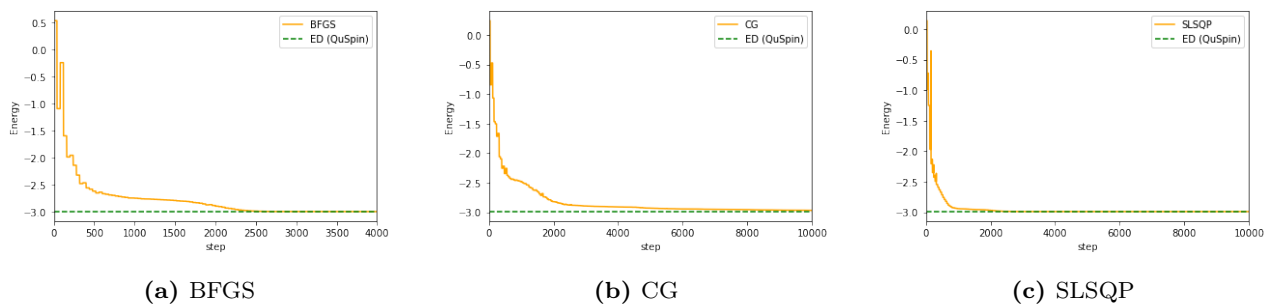


図 42: 勾配を利用した optimizer によるコスト関数

勾配を利用しない optimizer では 2 回目の最適化へ切り替わる時にいずれもピークが存在する. コスト関数の観点から, 1 回目のパラメータを活かしてより速く収束を行うためには勾配情報を用いた optimizer が適

切であると考えた。また精度には大きな違いが見られなかったことから、実行時間の短さにより SLSQP [79] を用いた。

本実験では並進対称性を利用して 2 段階の最適化を行うアルゴリズムと通常の MPS-inspired ansatz による VQE アルゴリズムの性能の比較を行い、それぞれの条件の ansatz について 100 回の試行を行った。まず最もよい収束精度の場合のコスト関数の様子を見る。

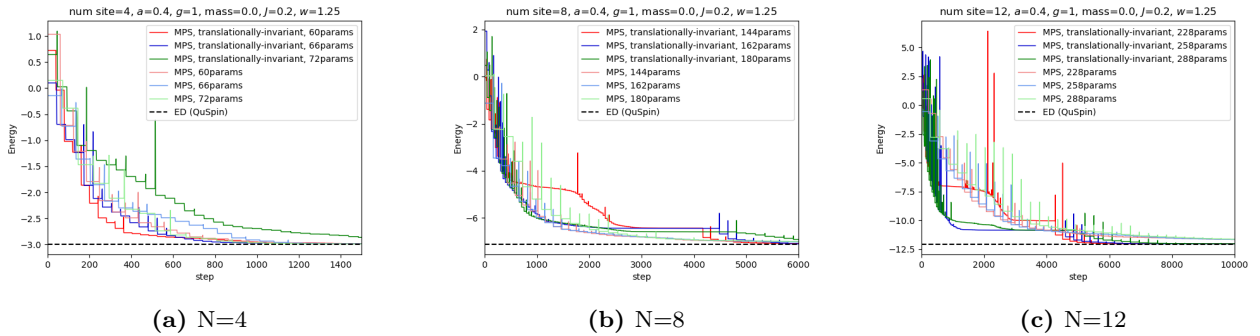


図 43: サイト数 N ごとのコスト関数の様子

このグラフでは並進対称性を持たせた MPS-inspired ansatz を濃い色のグラフ、従来の MPS-inspired ansatz は薄い色のグラフに対応しており、点線は厳密対角化の値を示す。いずれのグラフも十分なステップ数ののちに収束していることがわかる。次にエネルギー比を比較する。

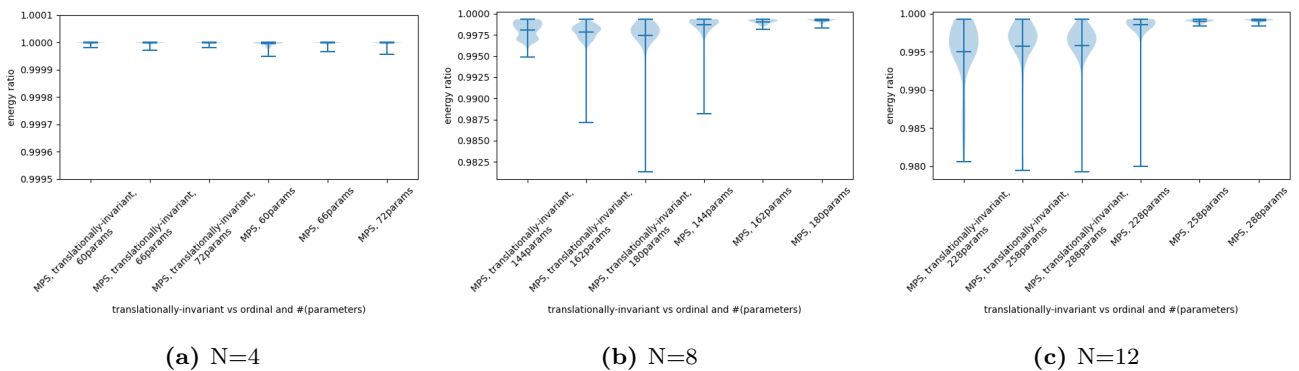


図 44: サイト数 N ごとのエネルギー比

各サイトの図において左の 3 つのプロットが並進対称性を利用した MPS-inspired ansatz による結果、右の 3 つのプロットが通常の MPS-inspired ansatz による結果を表している。並進対称性を利用した場合とそうでない場合でいずれも高い精度ではあるものの、収束値の分布の様子から並進対称性を利用した場合の方が精度が低下していることが確認される。それぞれのサイト数における分布の平均値と幅を表 3 に示す。

表 3: エネルギー比の平均値と分布の幅

サイト数 N	平均値		分布の幅	
	並進対称性を利用した手法	通常の ansatz	並進対称性を利用した手法	通常の ansatz
4	1	1	1	1
8	0.9978	0.9985	0.9878-0.9993	0.9949-0.9994
12	0.9961	0.9989	0.9798-0.9993	0.9923-0.9993

表は並進対称性を利用した 2 段階の最適化手法と通常の MPS-inspired ansatz による最適化での収束値に関して、その分布の平均値と幅を示している。

MPS-inspired ansatz に比べて並進対称性を利用した場合には平均値が 0.998($N=8$), 0.996($N=12$) と変化しているのに対し、通常の最適化では 0.998 以上を保っている。分布の幅に関しても、並進対称性を利用している場合には $N=8, 12$ のいずれの場合にも 0.99 以下まで収束値が分布しているが、通常の最適化手法では常に 0.99 以上の収束値となっており、並進対称性を利用した最適化では精度の低下が確認された。

この結果について考察を行う。まず本実験で用いる MPS-inspired ansatz や並進対称性を活かした ansatz は Hilbert 空間の次元に比べてパラメータ数の少ない回路である [37]。また global minimum の形状はサイト数が増えるほど狭く勾配の大きなものとなることが示されている [26]。そしてパラメータ数 l と Hilbert 空間の次元に比例する量 m に対する Local minima の分布は以下のようになることが確認されている [35, 36]。

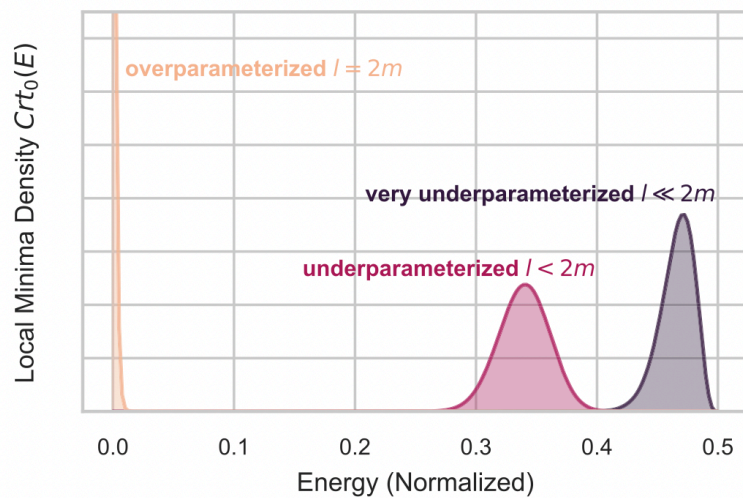


図 45: パラメータ数と Hilbert 空間の次元に対する local minima の分布 [36]

横軸は解となるエネルギーと最適化により得られた結果との差を示し、0 で正しい結果に収束できていることを意味する。縦軸は local minima の数を示している。パラメータ数 l が $2m$ に比べて小さいほど解から離れた値に local minima が集中している一方で、その比が 1 に近づくにつれて local minima の分布が global minimum に近づいてゆく。

以上の事実から次のように考察した。並進対称性を活かした最適化ではまずパラメータ数の少ない回路による最適化を行うことからその多くが local minima に収束する。その後のパラメータを独立にした 2 回目の最適化では、パラメータ数が増えたことにより local minima が global minimum の方向に移動していると考えられるが、初期値が local minima の付近に存在することから多くの場合において再度 local minima へ収

束してしまうと考えた.

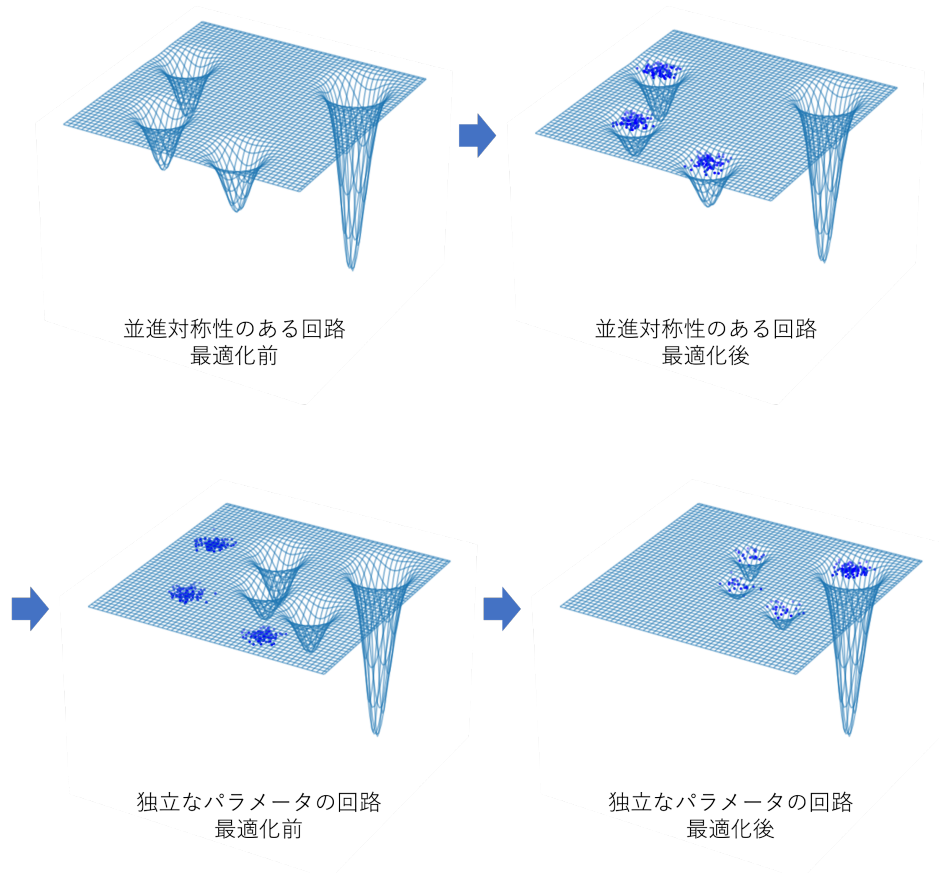


図 46: 最適化時のコスト関数のイメージ図

パラメータ数が異なる回路であることより最適化にかかる時間についての比較も行った. CPU : Intel Core i5, メモリ : 16GB, クロック周波数 : 2.3GHz の MacBook Pro(2017) での結果は図 47 の通りである.

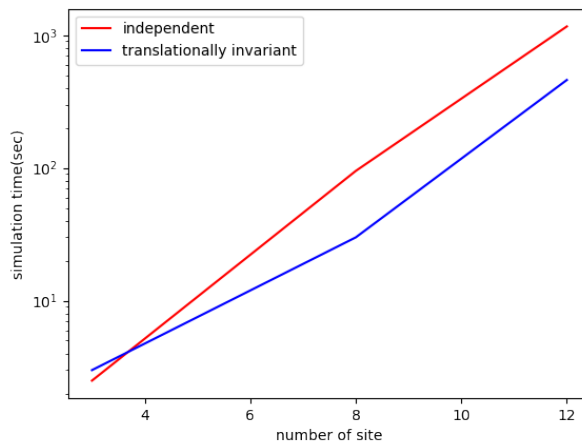


図 47: 最適化にかかる時間の比較

横軸はサイト数, 縦軸は最適化にかかった時間を示している. SLSQP は最適化にかかる時間がパラメータ

数に依存することから、並進対称性を活かした回路では初期の最適化にかかる時間が非常に抑えられているためと考えられる。以上の結果から並進対称性を活かした回路では一定の精度のもとで実行時間を抑えた実装が可能であることが確認できた。

7 結論

本研究では NISQ 時代の量子コンピュータである VQE を利用して Schwinger モデルにおける基底状態を求めた。しかし現状では実際の量子コンピュータにおいて使用できる量子ビット数が限られており、また大きな Hilbert 空間において最適化を妨げる barren plateau や local minima といった課題も存在する。そこでテンソルネットワークの一つである MPS を利用することで Hilbert 空間の大きさや量子ビット数の観点などで効率的な ansatz の実装を試みた。MPS には area law に従う状態をよく近似できるという性質がある。そこで量子回路の生成する状態が MPS となるようなゲート配置を行うことにより、MPS の特徴を利用しようと考えた。

そして以上の回路を用いて 3 種類の実験を行った。まず従来の VQE ansatz との性能の比較である。ここでは従来の ansatz として HEA と HVA を用いた。MPS-inspired ansatz が Hilbert 空間のうち小さな部分空間のみを探索することから、サイト数の増加に対する近似性能の低下を抑えられると予想した。結果としては、サイト数の増加に対し MPS-inspired ansatz は従来の VQE ansatz に比べて高い精度を保ったまま収束することを確認できた。

次に、量子回路の途中で測定を行う、mid-circuit measurement という操作により量子ビット数を抑えた量子回路の実装を行った。これは MPS-inspired ansatz の持つユニタリーゲートは量子ビットに対して一方向にずれてゆくことから、演算の終わった量子ビットと初めて用いられる量子ビットが繰り返し作り出される構造を利用している。実験では量子回路を多数回実行することで Hamiltonian の期待値を求めていたが、shot 数に対する収束性能の低下が見られた。一方でコスト関数の収束値については、その分布の平均値や分布の広がりはいずれも大きな違いは見られなかったことから同等の収束性能を持つと言える。通常の MPS-inspired ansatz ではサイト数に比例して必要な量子ビット数が増加しているのに対し、mid-circuit measurement を用いた ansatz では量子ビット数は 3 と一定であったことから、量子ビット数を抑えた実装が可能であることを確認できた。

最後に、並進対称性を持たせた MPS-inspired ansatz と通常の MPS-inspired ansatz を組み合わせた 2 段階の最適化手法について性能を確認した。これは、十分長い 1 次元量子系では境界を除くサイトにおいて多くの場合一様な状態となる性質を利用することで、より少ない最適化過程で実行できると考えたためであった。結果としては、並進対称性を利用した手法の方が収束値の平均値が悪化し、収束値の分布も精度の低い方向へ広がってしまった。原因としては、1 回目の最適化で得られたパラメータが local minima の分布の影響を大きく受けるものであったためと考察した。一方、最適化にかかる実行時間については、並進対称性を利用した手法の方がより短い時間で可能であることが確認できた。今回の研究結果を受けて、今後は

- mid-circuit measurement を利用した、実機での MPS-inspired ansatz の実行
- local minima の分布に関する検証 (異なる初期値に対する最適化への影響, 勾配を利用しない optimizer での local minima の影響, パラメータ数と Hilbert 空間の次元の比を考慮した ansatz の構成)

に取り組んでいきたい。

謝辞

本研究を進めるにあたり多くの方にご協力いただきました。ここに感謝申し上げます。

指導教官である浅井祥二 教授には量子コンピュータという、世界中で盛んに取り組まれている興味深い研究に参加する機会をいただきました。2年間やりがいを持って研究に取り組むことができました。寺師弘二 准教授には、ご多用にも関わらず私の研究に時間を割いていただき、研究の本質に関する理解からスライドや論文の体裁まで幾度となくご教授いただきました。加えて、一人で研究に取り組むことの多かった私に度々お気遣いくださいました。澤田龍 准教授には研究に関するご指摘だけでなく、ゼミや学会、海外渡航における様々な手続きまで広くご協力いただきました。田中純一 教授には発表にて頂いた質問を通して、研究に対する理解を深めることができました。飯山悠太郎 助教には研究で用いる計算機の利用に関してアドバイスをいただきました。永野廉人 特任研究員には、研究の具体的な内容について何度も議論の機会をいただきました。また議論や日常的なやりとりは、研究者としての姿勢を学ぶ大変貴重な経験となりました。

量子コンピュータグループを通して、大久保龍之介さん、張元豪さん、水原慎一さん、後輩の尾嶋陸斗さん、上曾山健介さん、山崎峻さんには発表やゼミでの議論を通して研究への理解が深まり、また研究生活を楽しく過ごすことができました。ICEPP 物理事務室の皆様には研究に必要な手続き等のサポートをいただきました。浅井研究室を通して並木飛鳥さんや盧承佑さん、同期の山下恵理香さん、後輩の荻野恭輔さん、河井力さん、また ICEPP 関係者の皆様には普段の生活で仲良く接していただきました。最後に、研究生生活を不自由なく支えてくれた家族に感謝申し上げます。

参考文献

- [1] Richard P. Feynman, Simulating Physics with Computers, *Int. J. Theor. Physics* 21, 467-488 (1982)
- [2] Ethan Bernstein, Umesh Vazirani Quantum complexity theory, *SIAM Journal on Computing*, 26(5):1411-1473, (1997)
- [3] Peter W Shor, Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer, *SIAM review*, 41(2):303-332, (1999)
- [4] L. Grover, Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack, *Phys. Rev. Lett.* 79, 325 (1997)
- [5] David P DiVincenzo, The physical implementation of quantum computation, *Fortschritte der Physik: Progress of Physics*, 48(9-11):771-783 (2000)
- [6] Dan Shepherd, Michael J. Bremner, Temporally unstructured quantum computation, *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 465(2105):1413-1439, (2009)
- [7] Zhengfeng Ji, Anand Natarajan, Thomas Vidick, John Wright, Henry Yuen, $MIP^* = RE$, arXiv:2001.04383v3 [quant-ph]
- [8] Google Quantum AI, Exponential suppression of bit or phase error with cyclic error correction, *Nature* 595, p.383 (2021)
- [9] John Preskill, Quantum Computing in the NISQ era and beyond, *Quantum* 2, 79 (2018)
- [10] Hugh Collins, <https://newsroom.ibm.com/2022-11-09-IBM-Unveils-400-Qubit-Plus-Quantum-Processor>
2022年12月8日閱覽
- [11] Reza Haghshenas, Johnnie Gray, Andrew C. Potter, Garnet Kin-Lic Chan, Variational Power of Quantum Circuit Tensor Networks, *Phys. Rev. X* 12, 011047 (2022)
- [12] Ian MacCormack, Alexey Galda, Adam L. Lyon, Simulating Large PEPs Tensor Networks on Small Quantum Devices, arXiv:2110.00507v1 [quant-ph]
- [13] Yu Zhang, Lukasz Cincio, Christian F. A. Negre, Piotr Czarnik, Patrick Coles, Petr M. Anisimov, Susan M. Mniszewski, Sergei Tretiak, Pavel A. Dub, Variational quantum eigensolver with reduced circuit complexity, *npj Quantum Information* 8, 96 (2022)
- [14] Michael Foss-Feig, Stephen Ragole, Andrew Potter, Joan Dreiling, Caroline Figgatt, John Gaebler, Alex Hall, Steven Moses, Juan Pino, Ben Spaun, Brian Neyenhuis, David Hayes, Entanglement from tensor networks on a trapped-ion QCCD quantum computer, *Phys. Rev. Lett.* 128, 150504 (2022)
- [15] Yarkoni, Sheir and Raponi, Elena and Bäck, Thomas and Schmitt, Sebastian, Quantum Annealing for Industry Applications: Introduction and Review, *Rept.Prog.Phys.* 85 (2022) 10, 104001
- [16] Maria Schuld, Ville Bergholm, Christian Gogolin, Josh Izaac, and Nathan Killoran, Evaluating analytic gradients on quantum hardware, *Phys. Rev. A* 99, 032331 (2019)
- [17] K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa, and K. Fujii, Quantum circuit learning, *Phys. Rev. A* 98, 032309 (2018)
- [18] 石坂智, 小川朋宏, 河内亮周, 木村元, 林正人, 量子情報科学入門, 共立出版, 2012
- [19] Michael A. Nielsen, Isaac L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, American

- Association of Physics Teachers (2002)
- [20] Robert R. Tucci, An Introduction to Cartan's KAK Decomposition for QC Programmers, 18 Jul 2005, arXiv, 0507171v1
- [21] Martin Müller-Lennert, Frédéric Dupuis, Oleg Szehr, Serge Fehr, and Marco Tomamichel, On quantum Rényi entropies: a new generalization and some properties, arXiv:1306.3142v4 [quant-ph]
- [22] A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.-Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, J. L. O'Brien, A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor, *Nature Communications* 5 (2014) 4213
- [23] Kandala, A., Mezzacapo, A., Temme, K. et al., Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets, *Nature* 549, 242-246 (2017)
- [24] Dave Wecker, Matthew B. Hastings, and Matthias Troyer, Progress towards practical quantum variational algorithms, *PhysRevA* 92, 042303 (2015)
- [25] Jarrod R. McClean, Sergio Boixo, Vadim N. Smelyanskiy, Ryan Babbush, Hartmut Neven, Barren plateaus in quantum neural network training landscapes, *Nature Communications* 9, 4812 (2018)
- [26] M. Cerezo, Akira Sone, Tyler Volkoff, Lukasz Cincio, Patrick J. Coles, Cost function dependent barren plateaus in shallow parametrized quantum circuits, *Nature Communications* 12, 1791 (2021)
- [27] Samson Wang, Enrico Fontana, M. Cerezo, Kunal Sharma, Akira Sone, Lukasz Cincio, Patrick J. Coles, Noise-induced barren plateaus in variational quantum algorithms, *Nature Communications* 12, 6961 (2021)
- [28] Andrea Skolik, Jarrod R. McClean, Masoud Mohseni, Patrick van der Smagt, Martin Leib, Layer-wise learning for quantum neural networks, *Quantum Machine Intelligence* 3, 5 (2021)
- [29] Edward Grant, Leonard Wossnig, Mateusz Ostaszewski, and Marcello Benedetti, An initialization strategy for addressing barren plateaus in parametrized quantum circuits, *Quantum* 3, 214 (2019)
- [30] Stefan H. Sack, Raimel A. Medina, Alexios A. Michailidis, Richard Kueng, Maksym Serbyn, Avoiding Barren Plateaus Using Classical Shadows, *PRX Quantum* 3, 020365 (2022)
- [31] P. Baldi, K. Hornik, Neural networks and principal component analysis: learning from examples without local minima, *Neural Networks* 2, 1 (1989)
- [32] Hao Li, Zheng Xu, Gavin Taylor, Tom Goldstein, Visualizing the Loss Landscape of Neural Nets, arXiv:1712.09913v3 [cs.LG]
- [33] Luca Venturi, Afonso S. Bandeira, Joan Bruna, Spurious Valleys in Two-layer Neural Network Optimization Landscapes, arXiv:1802.06384v4 [math.OC]
- [34] Kenji Kawaguchi, Deep Learning without Poor Local Minima, arXiv:1605.07110v3 [stat.ML]
- [35] Eric R. Anschuetz, Critical Points in Quantum Generative Models, arXiv:2109.06957v2 [quant-ph]
- [36] Eric R. Anschuetz, Bobak T. Kiani, Quantum variational algorithms are swamped with traps, *Nature Communications* 13, 7760 (2022)
- [37] Bobak Toussi Kiani, Seth Lloyd, Reevu Maity, Learning Unitaries by Gradient Descent, arXiv:2001.11897v3 [quant-ph]
- [38] Xuchen You, Xiaodi Wu, Exponentially Many Local Minima in Quantum Neural Networks, arXiv:2110.02479v1 [quant-ph]
- [39] David Wierichs, Christian Gogolin, Michael Kastoryano, Avoiding local minima in variational

- quantum eigensolvers with the natural gradient optimizer, *Phys. Rev. Research* 2, 043246 (2020)
- [40] Jacob Biamonte, Lectures on Quantum Tensor Networks, arXiv:1912.10049v2 [quant-ph]
- [41] Roman Orus, A Practical Introduction to Tensor Networks: Matrix Product States and Projected Entangled Pair States, *Annals Phys.* 349 (2014) 117
- [42] M. Fannes, B. Nachtergaele, R. F. Werner, Finitely correlated states on quantum spin chains, *Communications in Mathematical Physics* 144, 443-490 (1992)
- [43] A. Klümper, A. Schadschneider, J. Zittartz, Groundstate properties of a generalized VBS-model, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* volume 87, pages 281-287 (1992)
- [44] G. Vidal, Class of Quantum Many-Body States That Can Be Efficiently Simulated, *Phys. Rev. Lett.* 101, 110501 (2008)
- [45] F. Verstraete, J. I. Cirac, Renormalization algorithms for Quantum-Many Body Systems in two and higher dimensions, arXiv:cond-mat/0407066v1 [cond-mat.str-el]
- [46] F. Verstraete, J. I. Cirac, Valence-bond states for quantum computation, *Phys. Rev. A* 70, 060302(R) (2004)
- [47] J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio, Colloquium: Area laws for the entanglement entropy, *Rev. Mod. Phys.* 82, 277 (2010)
- [48] Sukin Sim, Peter D. Johnson, Alán Aspuru-Guzik, Expressibility and entangling capability of parameterized quantum circuits for hybrid quantum-classical algorithms, *Adv. Quantum Technol.* 2 (2019) 190007
- [49] Norbert Schuch, Michael M. Wolf, Frank Verstraete, and J. Ignacio Cirac, Entropy scaling and simulability by Matrix Product States, *Phys. Rev. Lett.* 100, 030504 (2008)
- [50] F. Barratt, James Dborin, Matthias Bal, Vid Stojevic, Frank Pollmann, A. G. Green, Parallel quantum simulation of large systems on small NISQ computers, *npj Quantum Information* 7, 79 (2021)
- [51] Shi-Ju Ran, Encoding of matrix product states into quantum circuits of one- and two-qubit gates, *Phys. Rev. A* 101, 032310 (2020)
- [52] Jin-Guo Liu, Yi-Hong Zhang, Yuan Wan, Lei Wang, Variational Quantum Eigensolver with Fewer Qubits, *Phys. Rev. Research* 1, 023025 (2019)
- [53] William Huggins, Piyush Patil, Bradley Mitchell, K Birgitta Whaley, E Miles Stoudenmire, Towards Quantum Machine Learning with Tensor Networks, *Quantum Sci. Technol.* 4 024001 (2019)
- [54] 川村嘉春, 基礎物理から理解するゲージ理論 “素粒子の標準数式” を読み解く, SGC ライブラリ 138, サイエンス社, 2017
- [55] 大川正典, 石川健一, 格子場の理論, SGC ライブラリ 140, サイエンス社, 2018
- [56] J. Schwinger, Gauge Invariance and Mass.II, *Phys. Rev.* 128, 2425(1962)
- [57] Masazumi Honda, Etsuko Itou, Yuta Kikuchi, Lento Nagano, and Takuya Okuda, Classically emulated digital quantum simulation for screening and confinement in the Schwinger model with a topological term, *Phys. Rev. D* 105, 014504 (2022)
- [58] P. Achard et al. (L3 Collaboration), Measurement of the running of the electromagnetic coupling at large momentum-transfer at LEP, *Phys. Lett. B* 623, 26 (2005)
- [59] R.L. Workman et al. (Particle Data Group), Review of Particle Physics, *Prog. Theor. Exp. Phys.*

- 2022, 083C01 (2022)
- [60] Sidney R. Coleman, R. Jackiw, Leonard Susskind, Charge shielding and quark confinement in the massive schwinger model, *Annals Phys.* 93 (1975) 267
- [61] K. Melnikov, M. Weinstein, Lattice Schwinger model: Confinement, anomalies, chiral fermions, and all that, *Phys. Rev. D* 62, 094504 (2009)
- [62] B. Chakraborty, M. Honda, T. Izubuchi, Y. Kikuchi, A. Tomiya, Classically emulated digital quantum simulation of the Schwinger model with a topological term via adiabatic state preparation, *Phys. Rev. D* 105, 094503 (2020)
- [63] Christine Muschik et al., "U(1) Wilson lattice gauge theories in digital quantum simulators", *New J. Phys.* 19 103020 (2017)
- [64] John Kogut, Hamiltonian formulation of Wilson's lattice gauge theories, *Phys. Rev. D* 11, 395 (1975)
- [65] D. Yang, Gouri Shankar Giri, M. Johanning, C. Wunderlich, P. Zoller, P. Hauke, Analog quantum simulation of (1+1) -dimensional lattice QED with trapped ions, *Phys. Rev. A* 94, 052321 (2016)
- [66] Alexander F. Shaw, Pavel Lougovski, Jesse R. Stryker, and Nathan Wiebe, Quantum Algorithms for Simulating the Lattice Schwinger Model, *Quantum* 4, 306 (2020)
- [67] Stefan Kühn, J. Ignacio Cirac, and Mari-Carmen Bañuls, Quantum simulation of the Schwinger model: A study of feasibility, *Phys. Rev. A* 90, 042305 (2014)
- [68] Patrick Hayden, Debbie W. Leung, Andreas Winter, Aspects of Generic Entanglement, *Communications in Mathematical Physics* volume 265, pages 95-117 (2006)
- [69] Marcello Benedetti, Mattia Fiorentini, Michael Lubasch, Hardware-efficient variational quantum algorithms for time evolution, *Phys. Rev. Research* 3, 033083 (2021)
- [70] Yasunari Suzuki, Yoshiaki Kawase, Yuya Masumura, Yuria Hiraga, Masahiro Nakadai, Jiabao Chen, Ken M. Nakanishi, Kosuke Mitarai, Ryosuke Imai, Shiro Tamiya, Takahiro Yamamoto, Tennin Yan, Toru Kawakubo, Yuya O. Nakagawa, Yohei Ibe, Youyuan Zhang, Hirotsugu Yamashita, Hikaru Yoshimura, Akihiro Hayashi, and Keisuke Fujii, Qulacs: a fast and versatile quantum circuit simulator for research purpose, *Quantum* 5, 559 (2021)
- [71] M. J. D. Powell, A direct search optimization method that models the objective and constraint functions by linear interpolation, *Numerical Analysis Reports, DAMTP 1992/NA5*, Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, University of Cambridge, England, (1992)
- [72] Roeland Wiersema, Cunlu Zhou, Yvette de Sereville, Juan Felipe Carrasquilla, Yong Baek Kim, Henry Yuen, Exploring Entanglement and Optimization within the Hamiltonian Variational Ansatz, *PRX Quantum* 1, 020319 (2020)
- [73] Michael Foss-Feig, David Hayes, Joan M. Dreiling, Caroline Figgatt, John P. Gaebler, Steven A. Moses, Juan M. Pino, and Andrew C. Potter, Holographic quantum algorithms for simulating correlated spin systems, *Phys. Rev. Research* 3, 033002 (2021)
- [74] Ludmila Botelho, Adam Glos, Akash Kundu, Jarosław Adam Mischczak, Özlem Salehi, and Zoltán Zimborás, Error mitigation for variational quantum algorithms through mid-circuit measurements, *Phys. Rev. A* 105, 022441 (2022)
- [75] Plato Deliyannis, James Sud, Diana Chamaki, Zoë Webb-Mack, Christian W. Bauer, and Benjamin

- Nachman, Improving quantum simulation efficiency of final state radiation with dynamic quantum circuits, *Phys. Rev. D* 106, 036007 (2022)
- [76] J. Gaebler, C. Baldwin, S. Moses, J. Dreiling, C. Figgatt, M. Foss-Feig, D. Hayes, J. Pino, Suppression of midcircuit measurement crosstalk errors with micromotion, *Phys. Rev. A* 104 062440 (2022)
- [77] Fei Hua, Yuwei Jin, Yanhao Chen, John Lapeyre, Ali Javadi-Abhari, Eddy Z. Zhang, Exploiting Qubit Reuse through Mid-circuit Measurement and Reset, arXiv:2211.01925 [quant-ph]
- [78] Gadi Aleksandrowicz, Thomas Alexander, Panagiotis Barkoutsos, Luciano Bello, Yael Ben-Haim, David Bucher, Francisco Jose Cabrera-Hernández, Jorge Carballo-Franquis, Adrian Chen, Chun-Fu Chen, Jerry M. Chow, Antonio D. Córcoles-Gonzales, Abigail J. Cross, Andrew Cross, Juan Cruz-Benito, Chris Culver, Salvador De La Puente González, Enrique De La Torre, Delton Ding, Eugene Dumitrescu, Ivan Duran, Pieter Eendebak, Mark Everitt, Ismael Faro Sertage, Albert Frisch, Andreas Fuhrer, Jay Gambetta, Borja Godoy Gago, Juan Gomez-Mosquera, Donny Greenberg, Ikko Hamamura, Vojtech Havlicek, Joe Hellmers, Lukasz Herok, Hiroshi Horii, Shaohan Hu, Takashi Imamichi, Toshinari Itoko, Ali Javadi-Abhari, Naoki Kanazawa, Anton Karazeev, Kevin Krsulich, Peng Liu, Yang Luh, Yunho Maeng, Manoel Marques, Francisco Jose Martín-Fernández, Douglas T. McClure, David McKay, Srujan Meesala, Antonio Mezzacapo, Nikolaj Moll, Diego Moreda Rodríguez, Giacomo Nannicini, Paul Nation, Pauline Ollitrault, Lee James O’Riordan, Hanhee Paik, Jesús Pérez, Anna Phan, Marco Pistoia, Viktor Prutyanov, Max Reuter, Julia Rice, Abdón Rodríguez Davila, Raymond Harry Putra Rudy, Mingi Ryu, Ninad Sathaye, Chris Schnabel, Eddie Schoute, Kanav Setia, Yunong Shi, Adenilton Silva, Yukio Siraichi, Seyon Sivarajah, John A. Smolin, Mathias Soeken, Hitomi Takahashi, Ivano Tavernelli, Charles Taylor, Pete Taylour, Kenso Trabing, Matthew Treinish, Wes Turner, Desiree Vogt-Lee, Christophe Vuillot, Jonathan A. Wildstrom, Jessica Wilson, Erick Winston, Christopher Wood, Stephen Wood, Stefan Wörner, Ismail Yunus Akhalwaya, and Christa Zoufal. 2019. Qiskit: An Open-source Framework for Quantum Computing. <https://doi.org/10.5281/zenodo.2562111>
- [79] D. Kraft, A software package for sequential quadratic programming, Deutsche Forschungs- und Versuchsanstalt für Luft- und Raumfahrt Köln: Forschungsbericht (Wiss. Berichtswesen d. DFVLR, 1988)
- [80] Wei Tang, Teague Tomesh, Martin Suchara, Jeffrey Larson, Margaret Martonosi, CutQC: Using Small Quantum Computers for Large Quantum Circuit Evaluations, arXiv:2012.02333v3 [quant-ph]

付録 A 用語の定義

量子コンピュータは量子力学を計算に用いている。ここでは量子コンピュータ上の計算が行われる Hilbert 空間の定義に向けて必要な事項を定義しておく [18, 19]。全体を通して \mathbb{K} は \mathbb{R} または \mathbb{C} とする。

定義 3 (ベクトル空間). 集合 V に和

$$\forall |\psi\rangle, |\psi\rangle \in V \rightarrow |\psi\rangle + |\psi\rangle \in V \quad (73)$$

及びスカラー倍

$$\forall |\psi\rangle \in V, a \in \mathbb{K} \rightarrow a|\psi\rangle \in V \quad (74)$$

の演算があり, (v1)-(v8) の性質を満たす時 V を \mathbb{K} 上のベクトル空間という.

$$(v1) \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in V, \quad |\psi\rangle + |\phi\rangle = |\phi\rangle + |\psi\rangle$$

$$(v2) \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle, |\xi\rangle \in V \quad |\psi\rangle + (|\phi\rangle + |\xi\rangle) = (|\psi\rangle + |\phi\rangle) + |\xi\rangle$$

$$(v3) \exists |\theta\rangle \in V \quad s.t. \forall |\psi\rangle \in V, |\psi\rangle + |\theta\rangle = |\psi\rangle$$

$$(v4) \forall |\psi\rangle \in V, \exists |\xi\rangle \in V \quad s.t. |\psi\rangle + |\xi\rangle = |\theta\rangle$$

$$(v5) \forall |\psi\rangle \in V, a, b \in \mathbb{K}, \quad a \cdot (b \cdot |\psi\rangle) = (ab) \cdot |\psi\rangle$$

$$(v6) \forall |\psi\rangle \in V, \quad 1 \cdot |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

$$(v7) \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in V, a \in \mathbb{K}, \quad a \cdot |\psi\rangle + a \cdot |\phi\rangle$$

$$(v8) \forall |\psi\rangle \in V, a, b \in \mathbb{K}, \quad (a + b) \cdot |\psi\rangle = a \cdot |\psi\rangle + b \cdot |\psi\rangle$$

(v3) の $|\theta\rangle$ を零ベクトルと呼び, 以降 $|\theta\rangle = 0$ と記す. また (v4) の $|\xi\rangle$ を $|\psi\rangle$ の逆ベクトルと呼び, 以降 $|\xi\rangle = -|\psi\rangle$ と記す. 内積空間の定義に入る前に, ベクトル空間に関する用語をいくつか定義する.

- V の部分集合 $W \subset V$ が部分空間である

$$W \text{ が和とスカラー倍について閉じている } (\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in W, a \in \mathbb{K} \quad |\psi\rangle + |\phi\rangle \in W, a|\psi\rangle \in W)$$

部分空間 W は V の和とスカラー倍の演算を用いてベクトル空間となる.

- ベクトルの集合 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^n$ は一次独立である

$$\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^n \text{ が}$$

$$\sum_{i=1}^n a_i |\psi_i\rangle = 0 \Rightarrow \forall i, a_i = 0 \quad (75)$$

を満たす

- ベクトル空間 V の次元

V は一次独立となるベクトルの個数に上限がある時, 有限次元ベクトル空間と呼ばれ, その最大値を V の次元といい $\dim V$ と記す.

量子コンピュータでは有限個の量子ビットを用いた計算を扱うため, 以降 V を有限次元ベクトル空間とする. それでは内積空間の定義に移る.

定義 4 (内積空間). (p1)-(p8) の性質を満たす演算

$$\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in V \rightarrow \langle \psi | \phi \rangle \in \mathcal{K} \quad (76)$$

を持つベクトル空間を内積空間と呼ぶ.

$$(p1) \forall |\psi\rangle \in V \quad \langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \quad (\text{等号成立は } |\psi\rangle = 0)$$

$$(p2) \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in V \quad \langle \psi | \phi \rangle = \overline{\langle \phi | \psi \rangle} \quad (\bar{a} \text{ は } a \text{ の複素共役})$$

$$(p3) \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle, |\xi\rangle \in V, a, b \in \mathbb{K} \quad \langle \psi | a\phi + b\xi \rangle = a \langle \psi | \phi \rangle + b \langle \psi | \xi \rangle$$

内積に関連した用語をここで定義する.

- 2つのベクトル $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ が直交する

$|\psi\rangle, |\phi\rangle$ が $\langle\psi|\phi\rangle = 0$ を満たす.

- 内積空間 V のノルム $\|\psi\|$
ノルムはベクトルの大きさを表し, 内積を用いることで自然に $\|\psi\| := \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ と定めることができる.
- ベクトル $|\psi\rangle$ の規格化
零ベクトルでない $\forall |\psi\rangle$ に対し単位ベクトル $|\tilde{\psi}\rangle := |\psi\rangle / \|\psi\|$ を求める操作. 正規化とも呼ばれる.
- 正規直交系
互いに直交する単位ベクトルの集合 $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^n$
- 正規直交基底
基底となる正規直交系.
- ベクトルの列 $(|\psi_n\rangle)_n \in \mathbb{N}$ が Cauchy 列 $(|\psi_n\rangle)_n \in \mathbb{N}$ が $n, m \rightarrow \infty$ で $\|\psi_n - \psi_m\| \rightarrow 0$ を満たす
- ベクトルの列 $(|\psi_n\rangle)_n \in \mathbb{N}$ が収束列
 $\exists |\psi\rangle \in V$ s.t. $\|\psi - \psi_n\| \rightarrow 0$
- 内積空間 V が完備
 V の任意の Cauchy 列が収束列となる.

それでは Hilbert 空間の定義を行う.

定義 5 (Hilbert 空間). 完備な内積空間を *Hilbert 空間* という.

ここでテンソル積 Hilbert 空間についても定義を行う.

定義 6 (テンソル積 Hilbert 空間). $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ を d_1, d_2 次元 Hilbert 空間とする. $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ のテンソル積 Hilbert 空間 \mathcal{H}_{12} は以下の性質を満たすテンソル積演算 $(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \in \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \mapsto |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \in \mathcal{H}_{12}$ が定義されている $d_1 d_2$ 次元の Hilbert 空間である.

(i) $\forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1, |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}_2, a, b \in \mathbb{K}$ に対し

$$\begin{aligned} (a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle) \otimes |\phi\rangle &= a(|\psi_1\rangle \otimes |\phi\rangle) + b(|\psi_2\rangle \otimes |\phi\rangle) \\ |\psi\rangle \otimes (a|\phi_1\rangle + b|\phi_2\rangle) &= a(|\psi\rangle \otimes |\phi_1\rangle) + b(|\psi\rangle \otimes |\phi_2\rangle) \end{aligned}$$

(ii) $\forall |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_1, |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$ に対し

$$\langle\psi_1 \otimes \psi_2 | \phi_1 \otimes \phi_2\rangle = \langle\psi_1 | \psi_2\rangle \langle\phi_1 | \phi_2\rangle \quad (77)$$

ベクトル空間の元へ作用する写像として線形演算子を定義する. 以降 V_1, V_2 を d_1, d_2 次元のベクトル空間, \mathcal{H}, \mathcal{K} を d_1, d_2 次元の Hilbert 空間として説明を行う.

定義 7 (線形演算子). 次を満たすような写像 $A : V_1 \rightarrow V_2$ を線形演算子と呼ぶ.

$$A(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle) = aA(|\psi\rangle) + bA(|\phi\rangle) \quad (\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in V_1, a, b \in \mathbb{K}) \quad (78)$$

線形演算子 A のベクトル $|\psi\rangle$ への作用 $A(|\psi\rangle)$ は $A|\psi\rangle, |A\psi\rangle$ とも書かれる. また V_1 から V_2 への線形演算子の集合を $\mathcal{L}(V_1, V_2)$, 特に $V_1 = V_2$ の時は $\mathcal{L}(V_1)$ と記す.

定義 8 (固有値と固有ベクトル). \mathcal{H} 上の線形演算子 A が $a \in \mathbb{C}$ と $|\psi\rangle \neq 0$ に対し

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \quad (79)$$

を満たす時, a を A の固有値, $|\psi\rangle$ を A の固有ベクトル, $E_a := \{|\psi\rangle | A|\psi\rangle = a|\psi\rangle\}$ を固有空間と呼ぶ.

以降は線形演算子 A の固有値の集合を $\sigma(A)$ と書く.

Hilbert 空間内で用いられる計算としてトレース Tr とテンソル積 \otimes がある.

定義 9 (トレース). 正規直交基底 $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^d$ を用いて $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ のトレース Tr は次で定義される.

$$\text{Tr}(A) := \sum_{i=1}^d \langle \phi_i | A \phi_i \rangle \quad (80)$$

定義 10 (線形演算子のテンソル積). 線形演算子 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1), B \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ に対してテンソル積 Hilbert 空間 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ 上の線形演算子 $A \otimes B$ を

$$A \otimes B(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) := (A|\psi\rangle) \otimes (B|\phi\rangle) \quad (\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}_1, |\phi\rangle \in \mathcal{H}_2) \quad (81)$$

により定義する.

以上を用いると, 注目する系 (対象系) S とその他の部分系 (環境系) E からなる全体系 $S + E$ における状態 ρ_{SE} が与えられた時の部分系 S における状態 ρ_S を考えることができる. ここで ρ_S の定義にあたり用いられる部分トレースを次のように定義する.

定義 11 (部分トレース). 対象系 S と環境系 E から構成される系がある時, 環境系 E 上の部分トレースとは

$$C = \sum_j A_j \otimes B_j \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_{SE}) \rightarrow \text{Tr}_E C := \sum_j (\text{Tr}_E B_j) A_j \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_S) \quad (82)$$

と定められる $\mathcal{L}(\mathcal{H}_{SE})$ から $\mathcal{L}(\mathcal{H}_S)$ への写像である. ただし C は \mathcal{H}_{SE} 上の任意の演算子である.

全体系 $S + E$ の状態が ρ_{SE} で与えられる時, 部分系の状態 ρ_S は部分トレースを用いて $\rho_S := \text{Tr}_E \rho_{SE}$ と定義される. 部分系の状態は縮約状態, ρ_S は縮約密度演算子と呼ばれる.

続いて重要な線形演算子を紹介する.

- 単位演算子

演算子 A が $\forall |\psi\rangle \in V_1$ に対し $A|\psi\rangle = |\psi\rangle$ である時 A は V_1 上の単位演算子であるという. この演算子の表記として I_{V_1} もしくは I がしばしば用いられる.

- 逆演算子

$A \in \mathcal{L}(V_1, V_2), B \in \mathcal{L}(V_2, V_1)$ に対し

$$AB = I_{V_2}, BA = I_{V_1} \quad (83)$$

を満たす B を A の逆演算子と呼び $B = A^{-1}$ と記される.

- 随伴演算子

$A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}, \mathcal{K})$ に対し

$$\langle \phi | A \psi \rangle = \langle B \phi | \psi \rangle \quad (\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, |\phi\rangle \in \mathcal{K}) \quad (84)$$

を満たす演算子 $B \in \mathcal{L}(\mathcal{K}, \mathcal{H})$ を A の随伴演算子と呼び $B = A^\dagger$ と記す.

- 正規演算子

$A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が $AA^\dagger = A^\dagger A$ を満たす時 A は正規演算子であるという.

- 正值演算子

$A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対し

$$\langle \psi | A \psi \rangle \geq 0 \quad (85)$$

を満たす時 A は正值演算子であるといい $A \geq 0$ と記す.

- エルミート演算子

$A = A^\dagger$ を満たす $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ をエルミート演算子と呼ぶ.

- 射影演算子

$P^2 = P = P^\dagger$ を満たす $P \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ を射影演算子と呼ぶ. 特に線形演算子 A の固有空間 E_a 上への射影演算子を, 固有値 a の固有射影演算子 P_a と呼ぶ.

- ユニタリー演算子

$U \in \mathcal{L}(\mathcal{H}, \mathcal{K})$ が

$$UU^\dagger = I_{\mathcal{K}}, U^\dagger U = I_{\mathcal{H}} \quad (86)$$

を満たす時 U をユニタリー演算子と呼ぶ.

- 密度演算子

$\rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対し

(i) $\rho \geq 0$

(ii) $\text{Tr} \rho = 1$

を満たす時 ρ を密度演算子と呼ぶ.

重要な定理についても確認する.

定理 2 (スペクトル分解定理). 任意の正規演算子 A は, 固有値 a と固有射影演算子 P_a を用いて

$$A = \sum_{a \in \sigma A} a P_a \quad (87)$$

と書ける. これを A のスペクトル分解と呼ぶ.

定理 3 (Schmidt の分解定理). Hilbert 空間 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ の次元を d_1, d_2 とし, $\{|\phi_i\rangle_{i=1}^{d_1}\}, \{|\xi_i\rangle_{i=1}^{d_2}\}$ をそれぞれの正規直交基底とする. この時, 任意の合成状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ に対し, $p_i > 0$ ($i = 1, 2, \dots, l \leq \min[d_1, d_2]$) と $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ の正規直交系 $\{|\zeta_i\rangle_{i=1}^l, \{|\eta_i\rangle_{i=1}^l$ が存在して

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^l \sqrt{p_i} |\zeta_i\rangle \otimes |\eta_i\rangle \quad (88)$$

と書くことができる. これを Schmidt 分解という. p_i を Schmidt 係数, l を Schmidt 階数と呼び $\sum_{i=1}^l p_i = 1$ を満たす.

スペクトル分解を用いて演算子の関数は次のように定義される.

定理 4 (演算子の関数). 固有値 $\{a_i\}$, 対応する固有射影演算子 $\{E_i\}$ を用いて $A = \sum_i a_i E_i$ とスペクトル分解されるエルミート演算子 A に対し, エルミート演算子 $f(A)$ は

$$f(A) := \sum_i f(a_i) E_i \quad (89)$$

と定義される. ただし f は全ての $\{a_i\}$ を定義域に含むような実数値関数である.

また情報は量子状態によって表され, 密度演算子が対応する. 量子状態 ρ には混合状態と純粋状態の 2 種類の状態が存在し, 純粋度という次の指標により区別される.

$$\rho \text{ が純粋状態} \stackrel{\text{def}}{\equiv} \text{純粋度 } \text{Tr}(\rho^2) = 1 \quad (90)$$

$$\rho \text{ が混合状態} \stackrel{\text{def}}{\equiv} \text{純粋度 } \text{Tr}(\rho^2) \leq 1 \quad (91)$$

特に純粋状態については単位ベクトルで表すことができる. ベクトル $|\psi_\rho\rangle$ と密度演算子 ρ は次式のように対応する.

$$\rho = |\psi_\rho\rangle \langle \psi_\rho| \quad (92)$$

そして量子コンピュータ上の計算は多くの場合ユニタリー演算子が作用することで実行される.