

修士学位論文発表審査会

Neural Quantum Stateを用いた量子誤り抑制

総合文化研究科 野口研究室 M2
前蔵 遼





1. 研究背景
2. 研究概要
3. Neural Quantum State
4. サンプリングによる古典Virtual Distillation
5. 数値計算結果
6. 今後の展望

1. 研究背景



1.研究背景



量子コンピューター

原子や電子などの量子性を用いて情報処理を行うコンピューター。スーパーコンピュータを使っても膨大な計算時間を要する問題を短時間で解けると期待されている。

現在利用可能な量子コンピューター



超伝導



イオントラップ



冷却原子

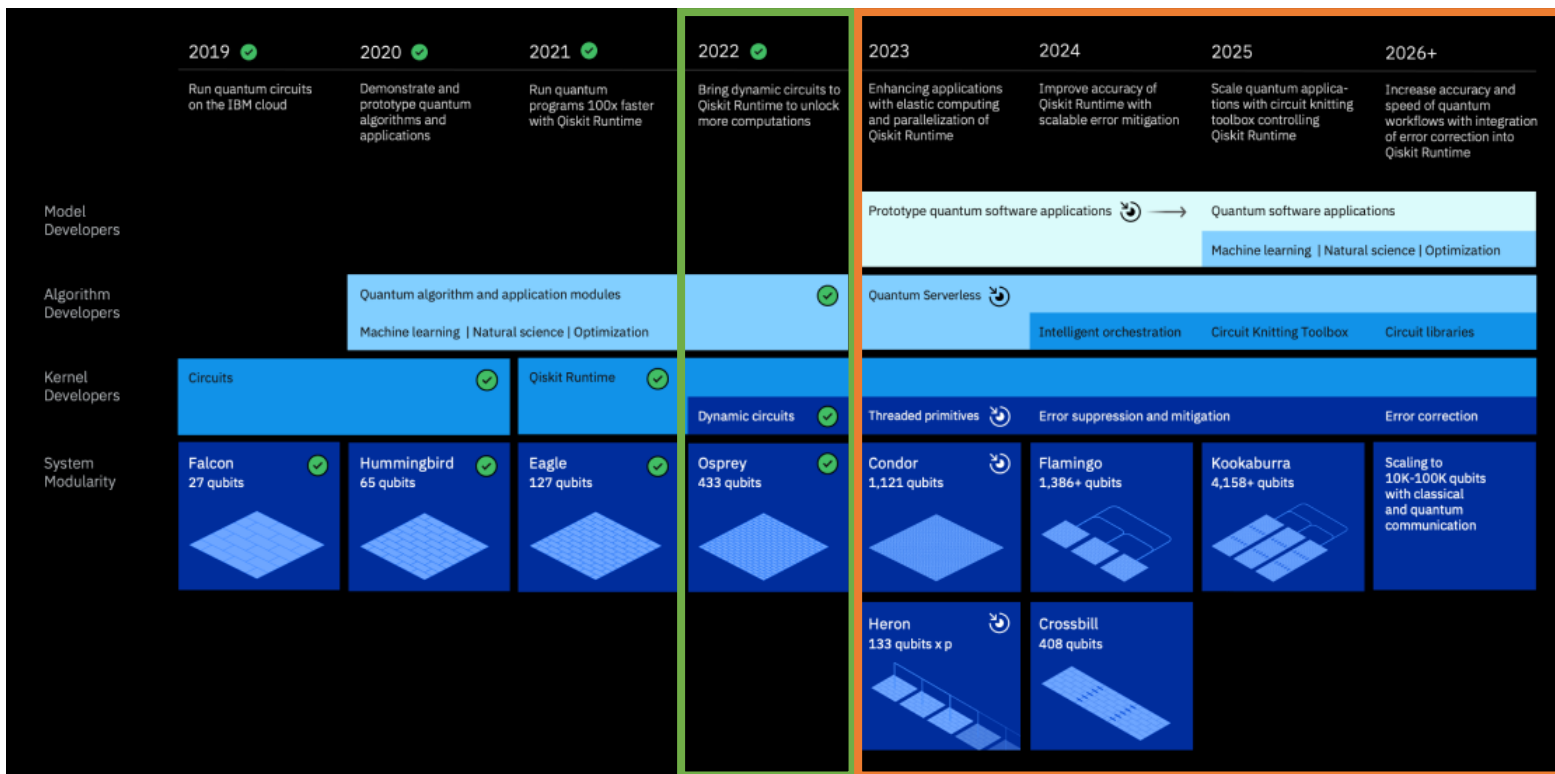


光量子

1.研究背景



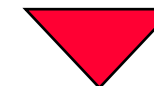
例：IBMの超伝導量子コンピュータ開発のロードマップ (<https://www.ibm.com/quantum/roadmap> より引用)



現在

量子ビット数：433 qubit

エラー訂正：できない



今後 (～2026年)

量子ビット数：1万～10万 qubit

エラー訂正：できるかも？

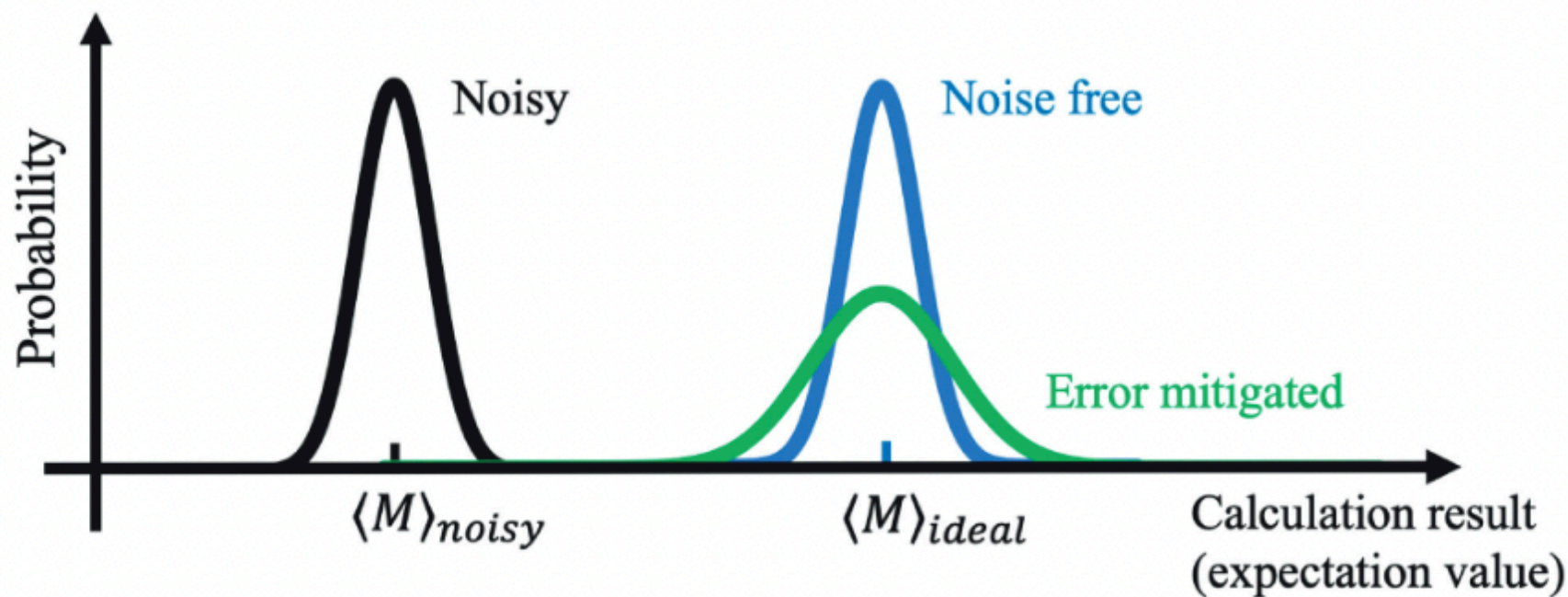
現状の量子コンピューターは NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum Computer) と呼ばれ、オブザーバブルの期待値を用いて量子機械学習や量子化学計算などのアプリケーション開発が進められている。しかし、エラー訂正はできないため、NISQでも実行可能な量子誤り抑制が注目を集めている。

1.研究背景



量子誤り抑制

量子計算の出力となる統計量(オブザーバブルの期待値など)を統計的な後処理を用いて、エラーを抑制する手法。現在までにZero-Noise ExtrapolationやProbabilistic Error Cancellationなど様々な手法が提案されている。エラー抑制するにあたり、バイアス(理想的な値とのズレ)と分散にはトレードオフの関係がある。



特に、バイアスを量子状態のコピー数に対して指数関数的に抑制できるVirtual Distillationが注目を集めている。

1. 研究背景

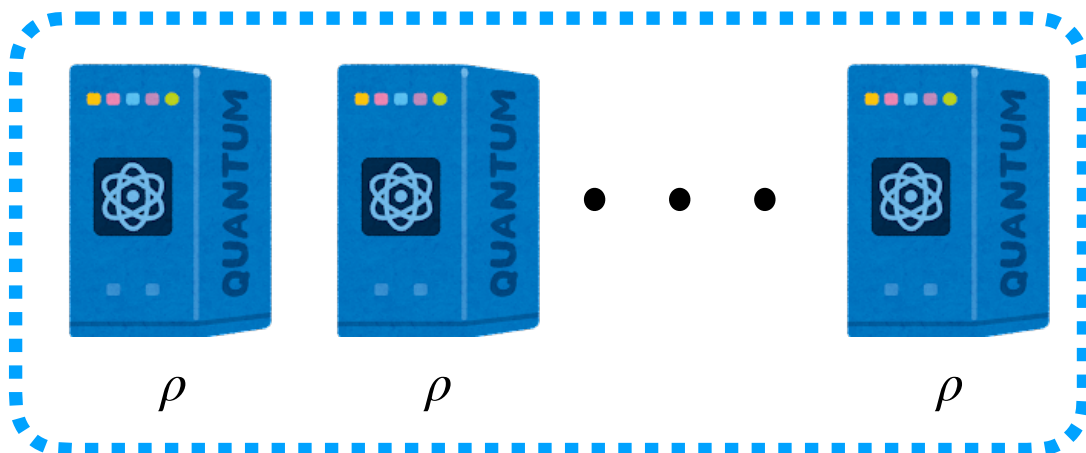


Virtual Distillation [1,2]

複数の量子状態のコピーを用いて期待値のバイアスを指数関数的に抑制する手法。

条件：密度行列 ρ の最大固有値ベクトル $|\lambda_1\rangle$ がノイズレスな状態 $|\psi_{\text{ideal}}\rangle$ に近いとする $|\psi_{\text{ideal}}\rangle \doteq |\lambda_1\rangle$

量子状態 ρ の m 個のコピー



m に対して指数関数的に
バイアスが抑制された
期待値 $\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m}$ を計算できる

- 最大固有値ベクトルが理想的な状態に近いという条件が必要
 - m 個のコピーを同時に用意するため、 m 倍の量子計算機が必要
- デメリット
- derangementのノイズが大きい
 - m の増加に対して、蒸留した期待値の分散も指数関数的に増加

[1] Huggins, W. J. et.al : Virtual Distillation for Quantum Error Mitigation, Phys. Rev. X 11, 041036 (2021)

[2] Koczor, B.: Exponential Error Suppression for Near-Term Quantum Devices, Phys. Rev. X 11, 031057 (2021)

1.研究背景



Virtual Distillationにおける期待値のバイアスが抑制される理由の説明 [1,2]

Virtual Distillationにおける蒸留された量子状態 ρ_{VD} を次のように定義する。

$$\rho_{\text{VD}} = \rho_{\text{noisy}}^m / \text{Tr}[\rho_{\text{noisy}}^m]$$

m は量子状態のコピー数で、 ρ_{VD} は m の増加に対して理想的な状態に漸近する。

この、 ρ_{VD} を用いてバイアスが抑制された期待値 $\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m}$ は

$$\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m} \equiv \text{Tr}[\rho_{\text{noisy}}^m \hat{O}] / \text{Tr}[\rho_{\text{noisy}}^m]$$

のように計算でき、 $\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m}$ は m の増加に対してバイアスが小さくなる。

[1] Huggins, W. J. et.al : Virtual Distillation for Quantum Error Mitigation, Phys. Rev. X 11, 041036 (2021)

[2] Koczor, B.: Exponential Error Suppression for Near-Term Quantum Devices, Phys. Rev. X 11, 031057 (2021)

1.研究背景



Virtual Distillationの量子計算機上での実装方法[1,2]

量子計算において、 ρ_{noisy} を m 乗して規格化するようなユニタリー操作が存在しないため、

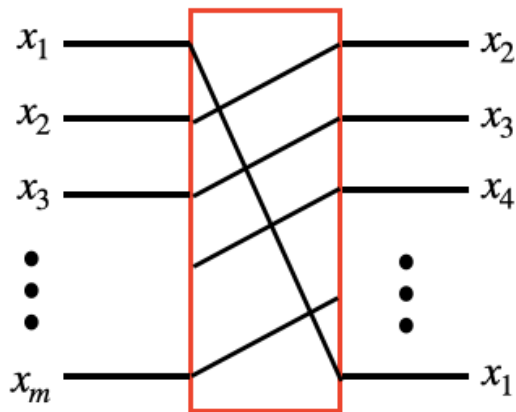
$\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m}$ を量子回路上で直接計算することができない。

代わりに、derangement演算子 Λ を用いて計算する。

derangement演算子 Λ

$$\Lambda|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle = |x_2, \dots, x_m, x_1\rangle$$

$$\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m} \equiv \frac{\text{Tr}[\rho_{\text{noisy}}^m \hat{O}]}{\text{Tr}[\rho_{\text{noisy}}^m]} = \frac{\text{Tr}[(\hat{O} \otimes I^{\otimes(m-1)}) \rho_{\text{noisy}}^{\otimes m} \Lambda]}{\text{Tr}[\rho_{\text{noisy}}^{\otimes m} \Lambda]}$$



デメリット

- 最大固有値ベクトルが理想的な状態に近いという条件が必要
- m 個のコピーを同時に用意するため、 m 倍の量子計算機が必要
- derangementのノイズが大きい
- m の増加に対して、蒸留した期待値の分散も指数関数的に増加

[1] Huggins, W. J. et.al : Virtual Distillation for Quantum Error Mitigation, Phys. Rev. X 11, 041036 (2021)

[2] Koczor, B.: Exponential Error Suppression for Near-Term Quantum Devices, Phys. Rev. X 11, 031057 (2021)

2. 研究手法



2. 研究手法



従来手法の問題と本提案手法で解決したポイント

従来のVirtual Distillation

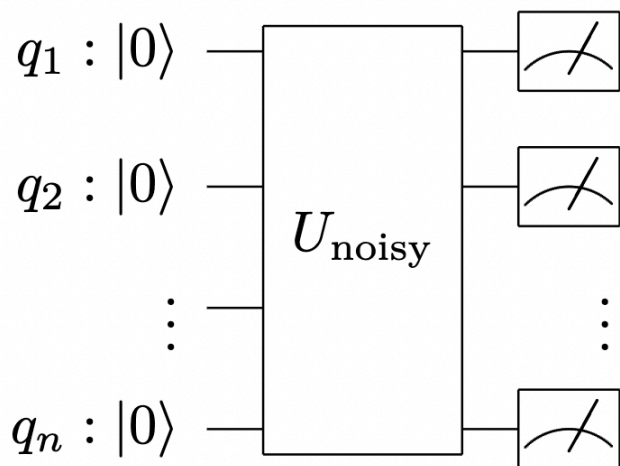
- 量子状態のコピー数 m の増加に対して、期待値 $\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m}$ の分散も増加
- 最大固有値ベクトル $|\lambda_1\rangle$ が理想的な量子状態 $|\psi_{\text{ideal}}\rangle$ に近いという条件が必要
- 量子状態のコピーを用意するために m 個の量子計算機が必要
- 量子状態のコピー数 m に対して、 $m - 1$ 個のderangement演算子が必要でかつ、ノイズが大きい

提案手法：Neural Quantum StateによるVirtual Distillation

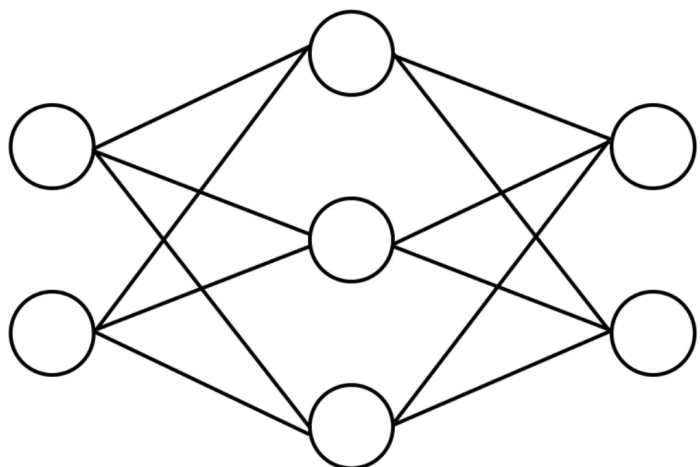
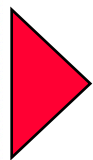
- 量子状態のコピー数 m の増加に対して、期待値 $\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m}$ の分散も増加
- 最大固有値ベクトル $|\lambda_1\rangle$ が理想的な量子状態 $|\psi_{\text{ideal}}\rangle$ に近いという条件が必要
- 物性などで興味のある量子状態は小規模なNQSで学習が可能
- 学習済みNQSへの m 倍のサンプリングで m 個の量子状態のコピーを再現
- derangement演算のような追加の量子操作は不要

■ : 共通部分 ■ : 従来手法のデメリット ■ : 提案手法のメリット

2. 研究手法

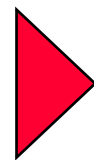


NISQ上の量子回路の各qubitに対して
Pauli測定し、学習データを生成



量子状態 $\rho(\theta)$

制限ボルツマンマシンによる
Neural Quantum State (NQS)の学習



$$\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m} = \frac{\text{Tr} \left[\left(\hat{O} \otimes I^{\otimes m-1} \right) \Lambda \rho^m \right]}{\text{Tr} \left[\Lambda \rho^m \right]}$$

NQSへのサンプリング操作で
Virtual Distillationを実行

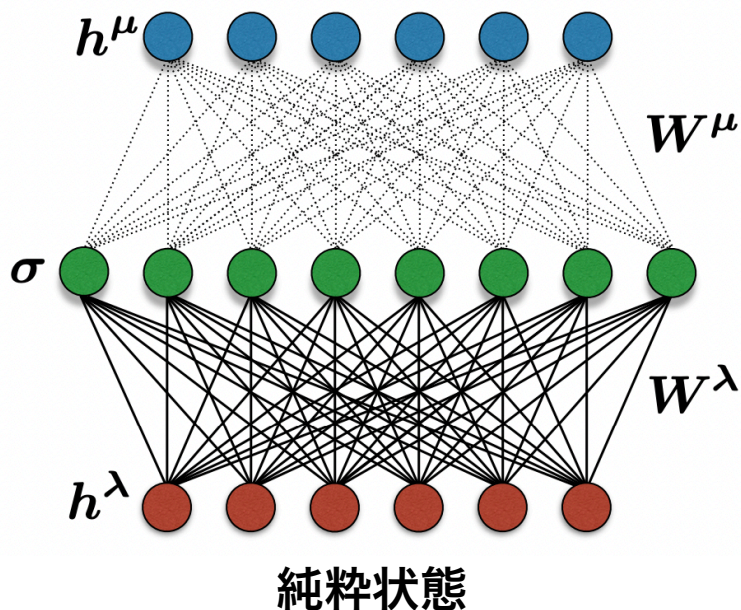
2. 研究手法



Neural Quantum State [3,4]

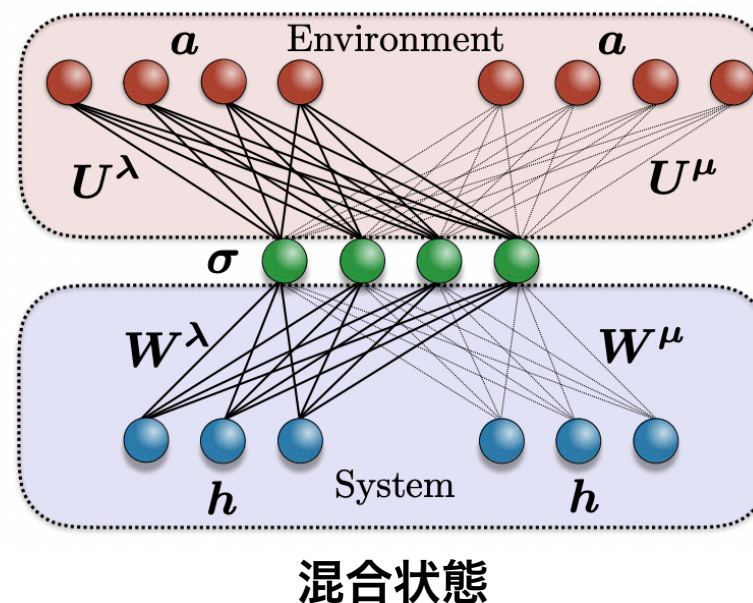
ニューラルネットワークを用いて、量子系の純粋状態や混合状態を学習する機械学習モデルであり、量子開放系の定常状態表現や量子多体系の有限温度計算などの応用がある。

本研究ではqubit系を制限ボルツマンマシン (RBM) による混合状態を表現したモデルを用いる。



確率 $p(i|\theta)$ でサンプル列 i を取得

添え字 i に対応する複素振幅を取得



確率 ρ_{ii} でサンプル列 i を取得

添え字 i, j に対応する行列要素を取得

[3] Torlai, G. et.al.: Neural network quantum state tomography, Nature Physics 14, 447–450 (2018)

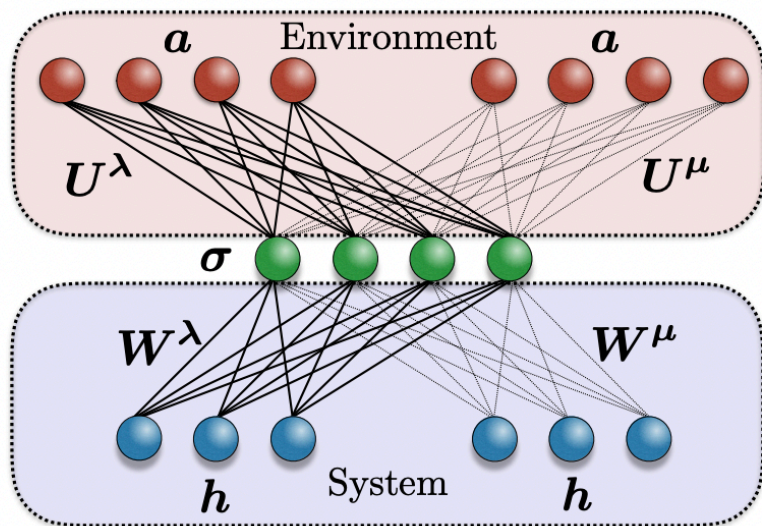
[4] Torlai, G. et.al.: Latent Space Purification via Neural Density Operators, Phys. Rev. Lett. 120, 240503 (2018)

2. 研究手法



Neural Quantum Stateによる期待値計算 (既知)

混合状態を学習したNQSに対するサンプリング操作により、オブザーバブルの期待値を計算できる。

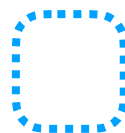


混合状態

確率 ρ_{ii} でサンプル列 i を取得

添え字 i, j に対応する行列要素を取得

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\text{Tr}[\hat{O}\rho]}{\text{Tr}[\rho]} = \mathbb{E}_{i \sim \{p_i\}} \left[\sum_j \frac{\rho_{j,i}}{\rho_{i,i}} O_{i,j} \right] = \mathbb{E}_{i \sim \{p_i\}} \left[\sum_j \frac{\rho_{j,i}}{\rho_{i,i}} O_{i,j} \right]$$



RBMからのサンプリングで効率的に可能



RBMからの行列要素の計算で可能



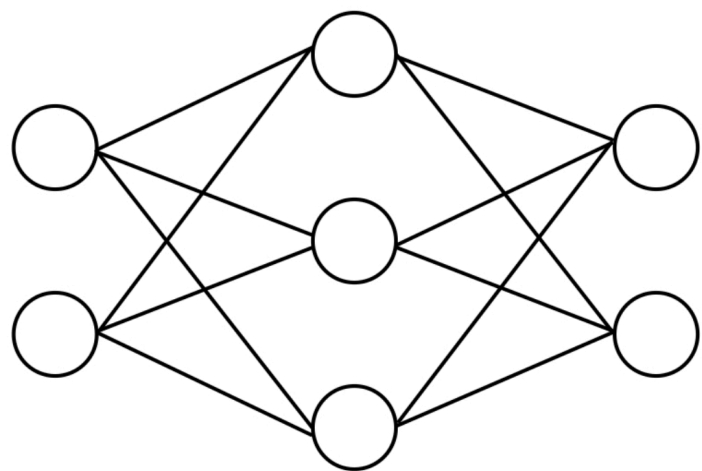
疎行列であるため、 j に関する総和を効率的に計算可能

2. 研究手法

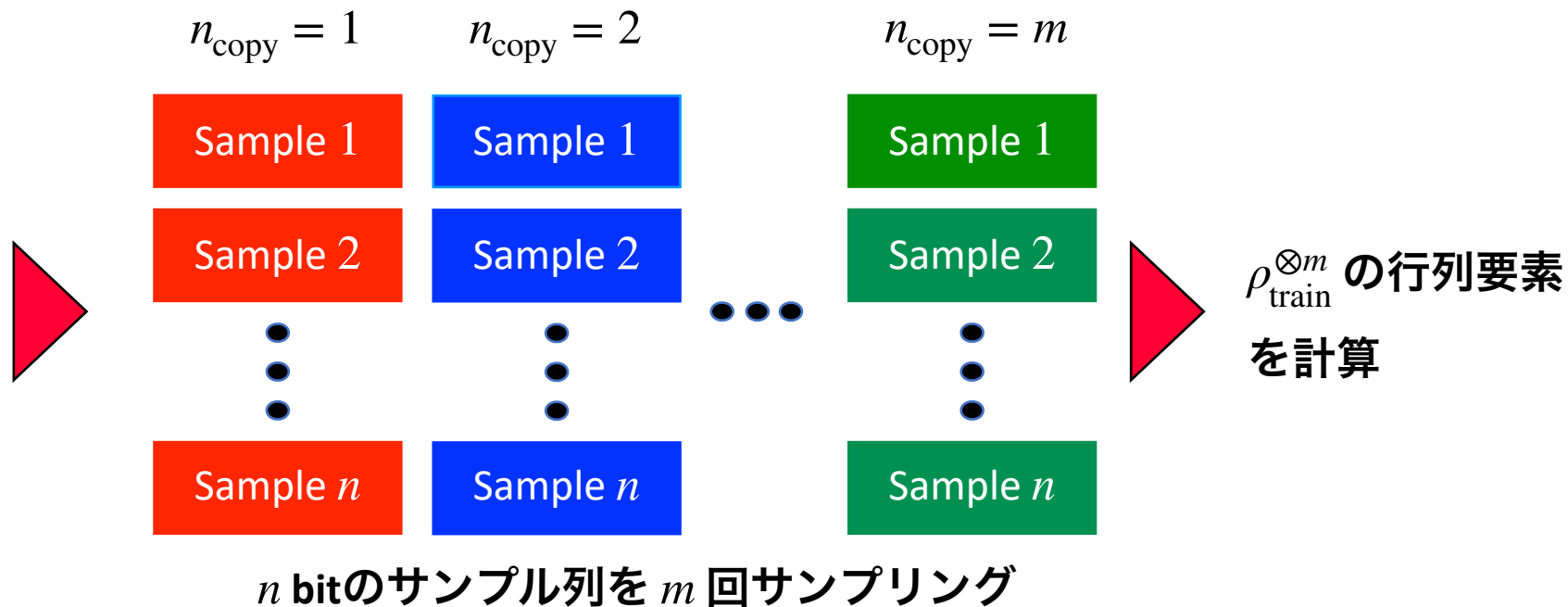


サンプリングによるVirtual Distillation

混合状態を学習したNQSに対するサンプリング操作により、オブザーバブルの期待値を計算できる。



学習済みの混合状態 ρ_{train}



$$\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m} = \mathbb{E}_{i \sim p(\sigma|h,\theta)} \left[\sum_j \frac{(\rho_{\text{train}}^{\otimes m})_{j,i}}{(\rho_{\text{train}}^{\otimes m})_{i,i}} \hat{O}'_{i,j} \right] \mathbb{E}_{i \sim p(\sigma|h,\theta)} \left[\sum_j \frac{(\rho_{\text{train}}^{\otimes m})_{j,i}}{(\rho_{\text{train}}^{\otimes m})_{i,i}} \Lambda_{i,j} \right] \left(\hat{O}' = (\hat{O} \otimes I^{\otimes m-1}) \Lambda \right)$$

$\rho^{\otimes m}$ に対する $\Lambda(\hat{O} \otimes I^{\otimes(m-1)})$ の評価 $\rho^{\otimes m}$ に対する Λ の評価

3. 数值計算結果

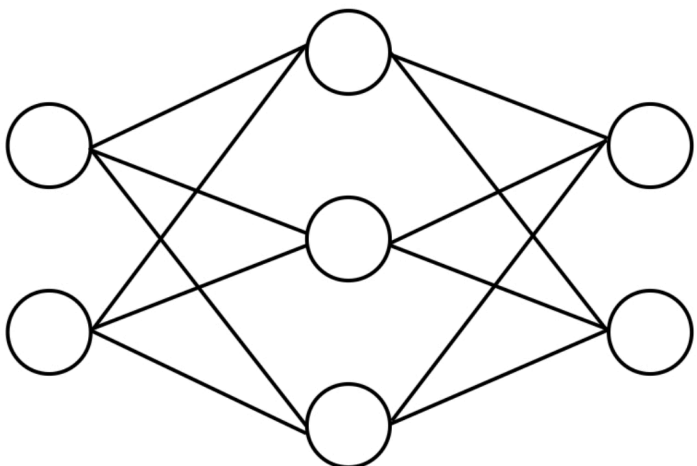
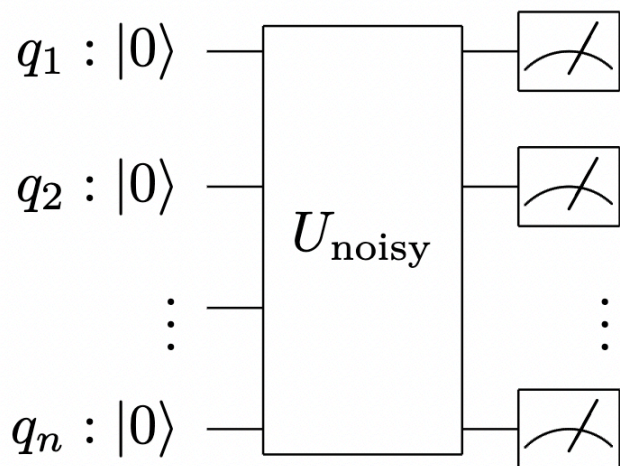


5. 数値計算結果

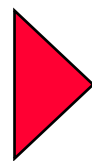


実験の目的

提案手法：サンプリングによる古典Virtual Distillation



量子状態 $\rho(\theta)$



$$\langle \hat{O} \rangle_{\text{VD},m} = \frac{\text{Tr} \left[\left(\hat{O} \otimes I^{\otimes m-1} \right) \Lambda \rho^m \right]}{\text{Tr} \left[\Lambda \rho^m \right]}$$

NISQ上の量子回路の各qubitに対して
Pauli測定し、学習データを生成

制限ボルツマンマシンによる
Neural Quantum State (NQS)の学習

NQSへのサンプリング操作で
Virtual Distillationを実行

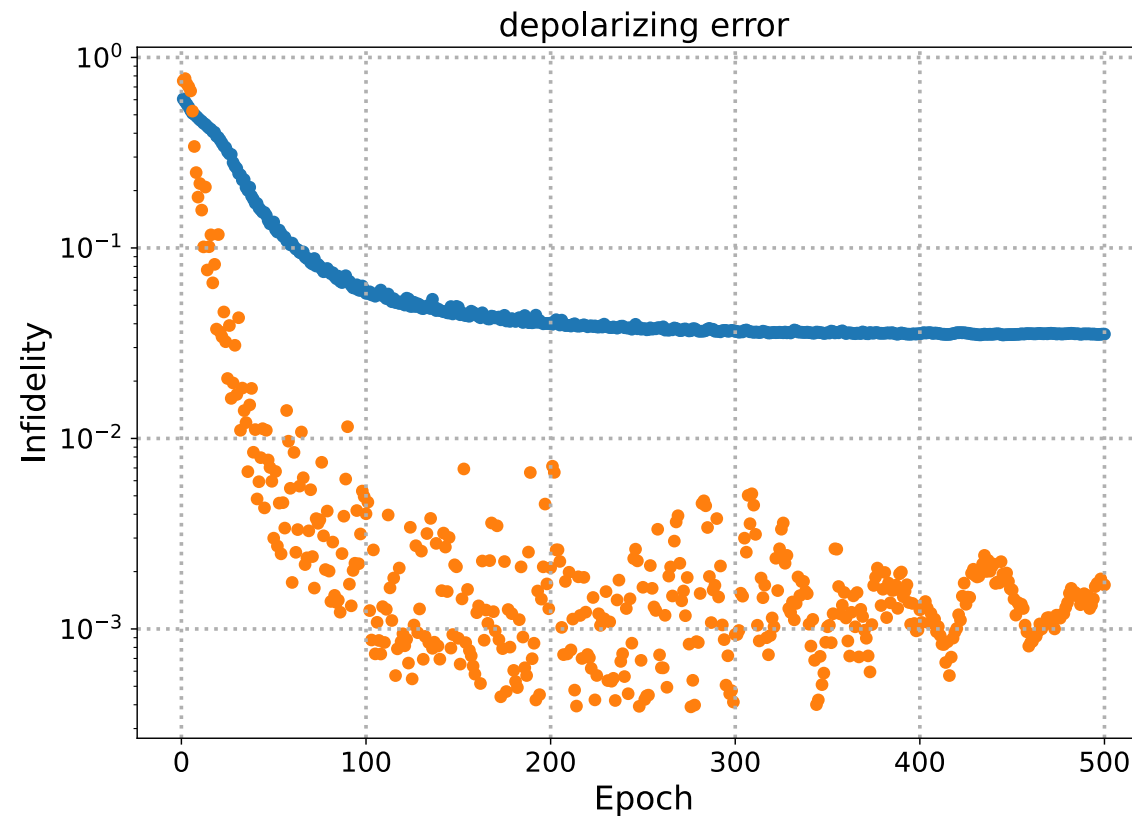
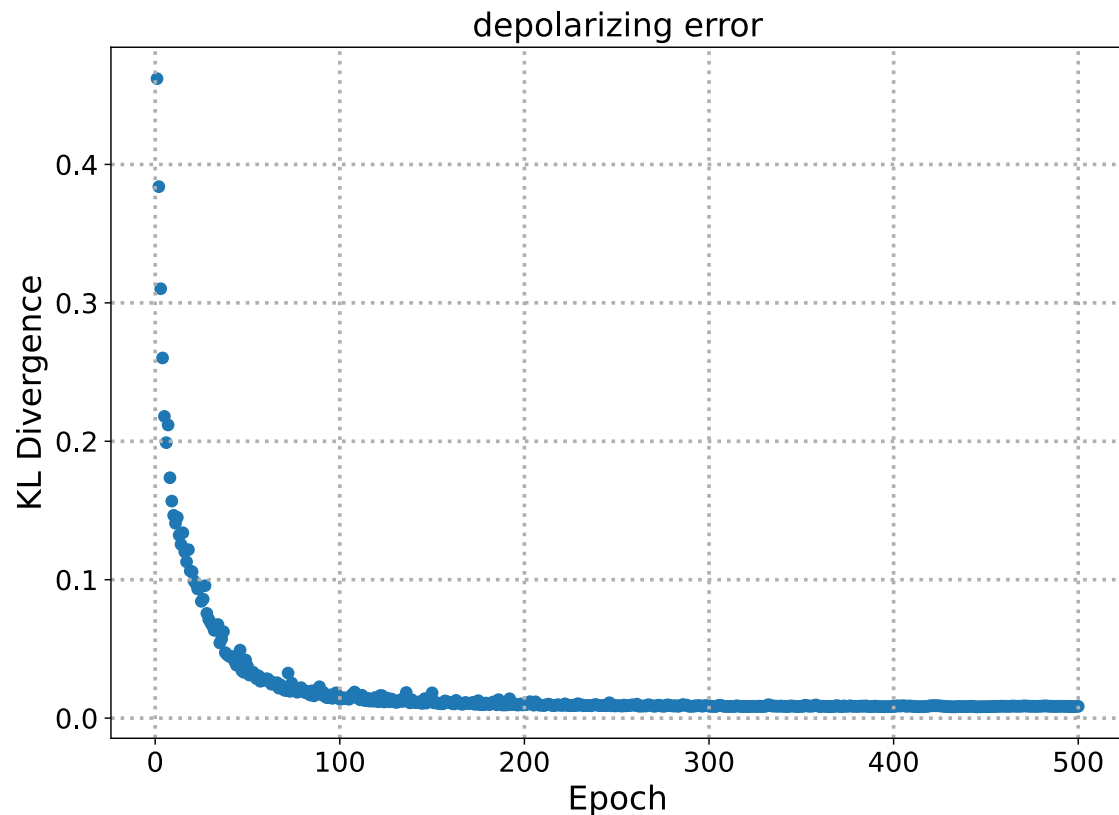
- 最大固有値ベクトルが理想的な量子状態に近いか？
- 従来のVirtual Distillationと同様の挙動をするか？
- 最適なコピー数における推定精度の検証

5. 数値計算結果



適用例：Bell状態に対する $\hat{O} = X \otimes X$ の期待値推定 (エラー率 $p = 1\%$)

各EpochにおけるInfidelityの推移 青線：再構成した密度行列 ρ_{train} オレンジ線：最大固有値ベクトル $|\lambda_1\rangle$



NQSにより再構成した最大固有値ベクトルが理想的な状態近いことが確認できた
他のエラーについても同様の学習結果が得られる

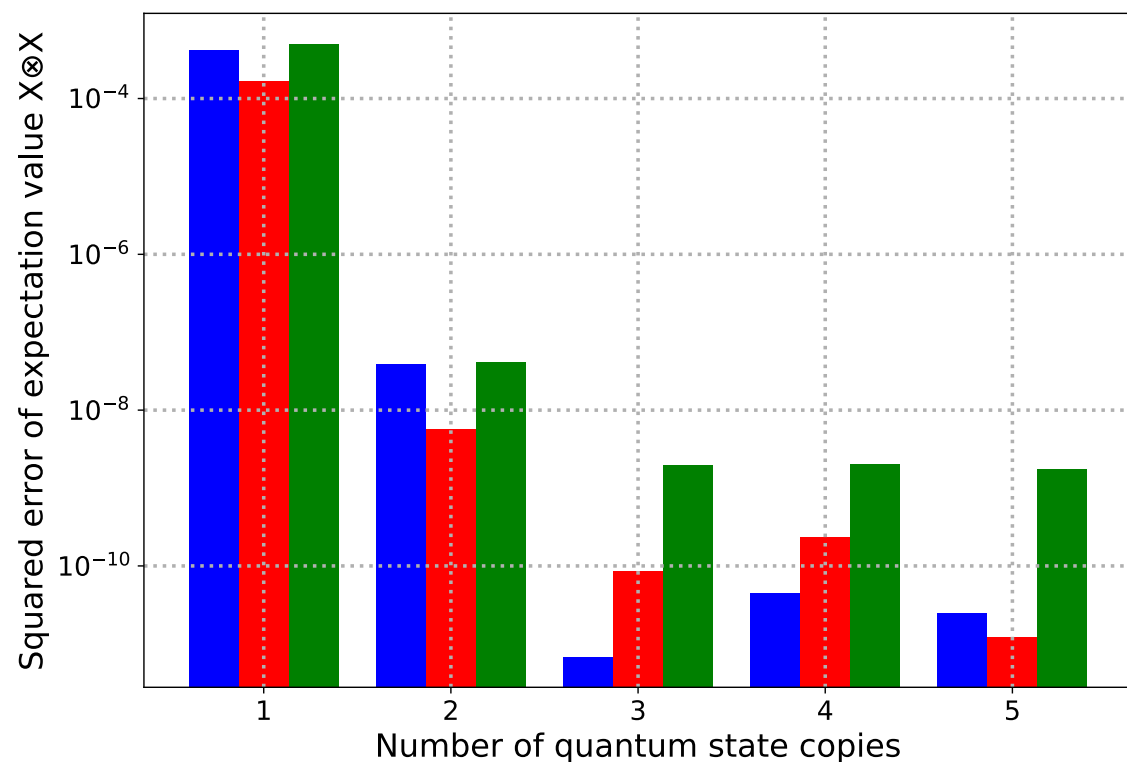
5. 数値計算結果



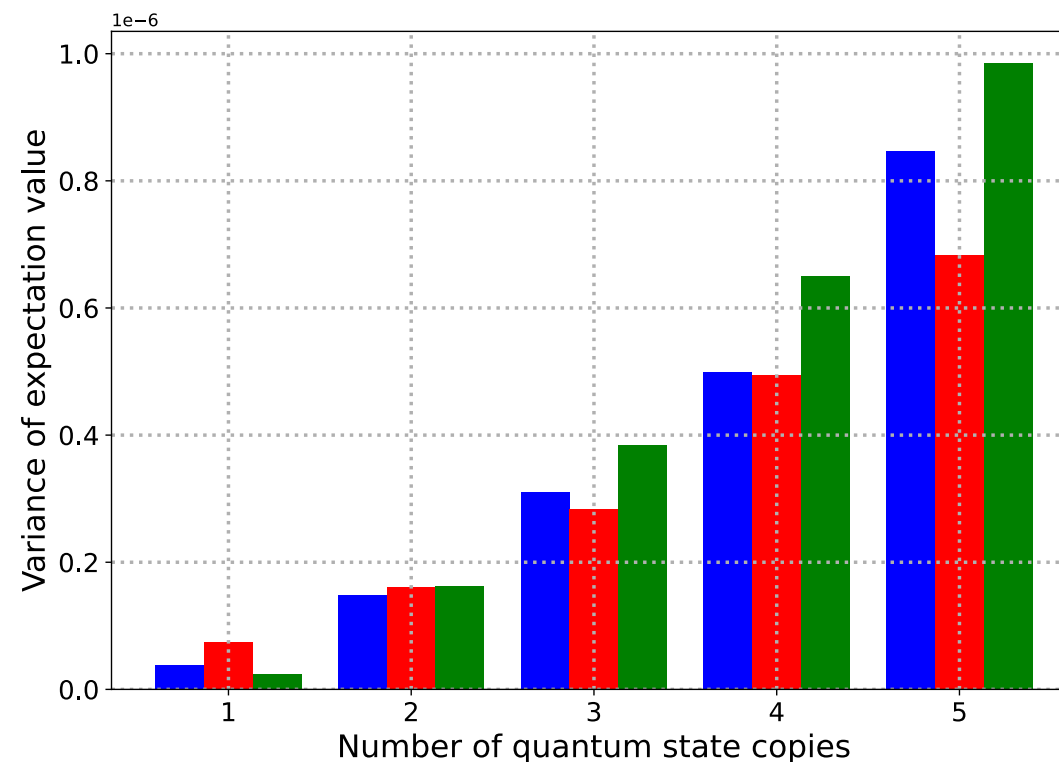
適用例：Bell状態に対する $\hat{O} = X \otimes X$ の期待値推定 (エラー率 $p = 1\%$)

サンプリングによる古典Virtual Distillationの挙動 青線：脱分極エラー 赤線：ユニタリーエラー 緑線：両方

バイアスの抑制



分散の増加



従来のVirtual Distillationと同様の挙動を確認

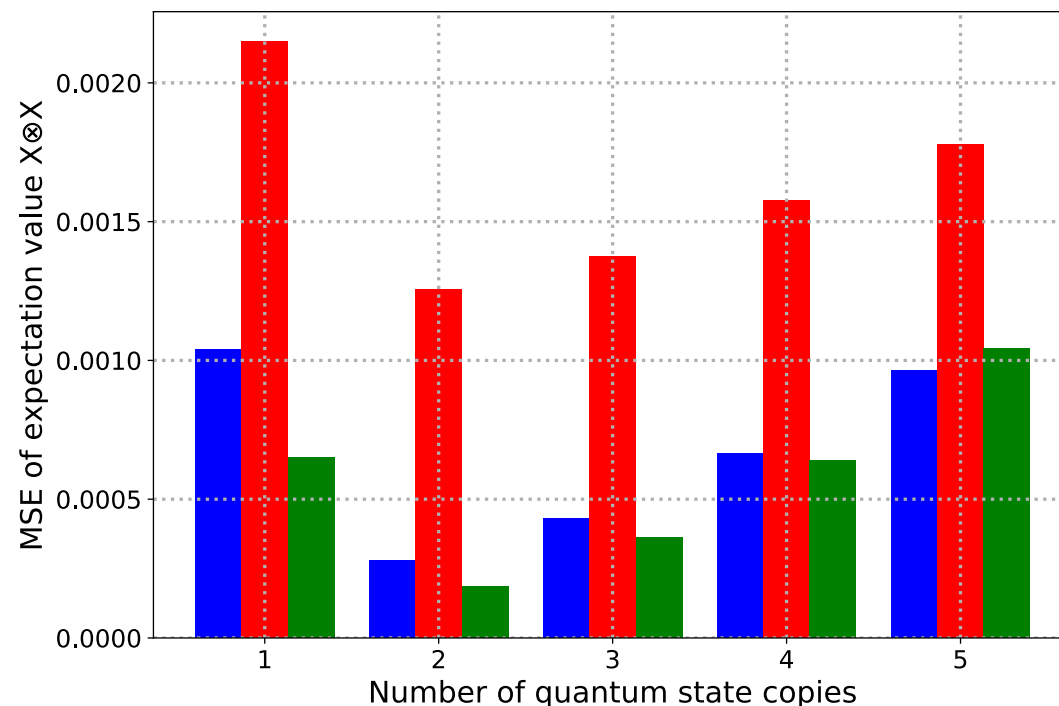
5. 数値計算結果



適用例：Bell状態に対する $\hat{O} = X \otimes X$ の期待値推定 (エラー率 $p = 1\%$)

最適な量子状態のコピー数の探索 青線：脱分極エラー 赤線：ユニタリーエラー 緑線：両方

理想的な期待値との平均二乗誤差



平均二乗誤差 (= 最大固有ベクトルの理想状態との誤差 + NQSの学習誤差 + バイアス + 期待値の分散)

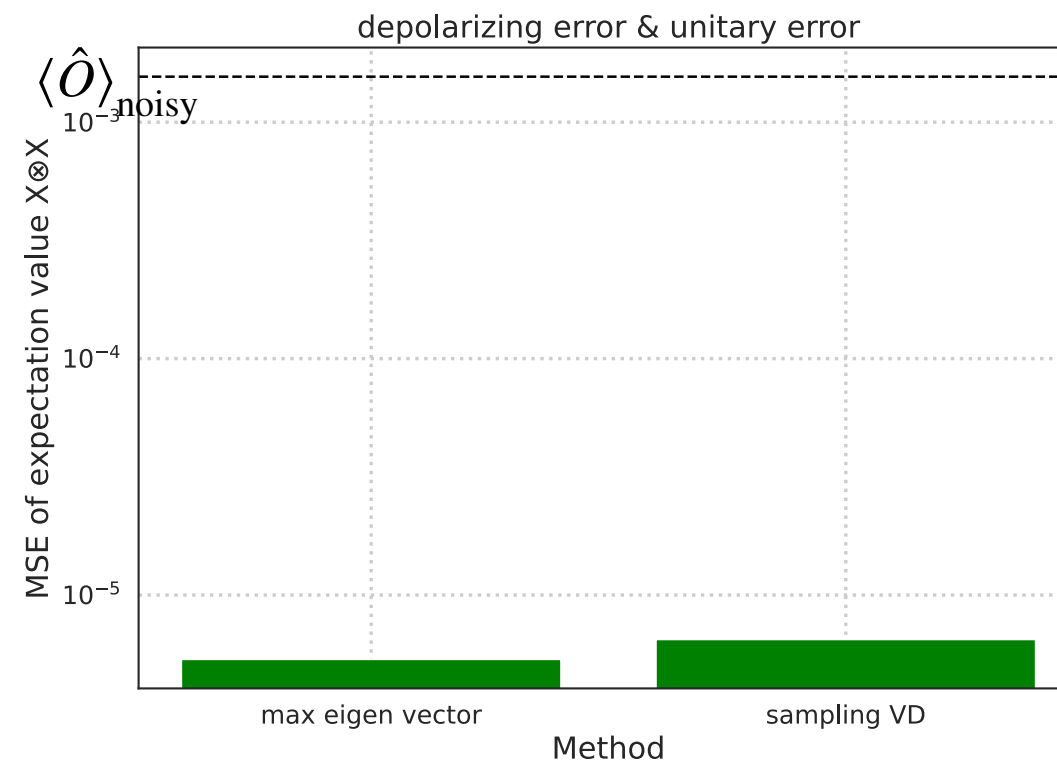
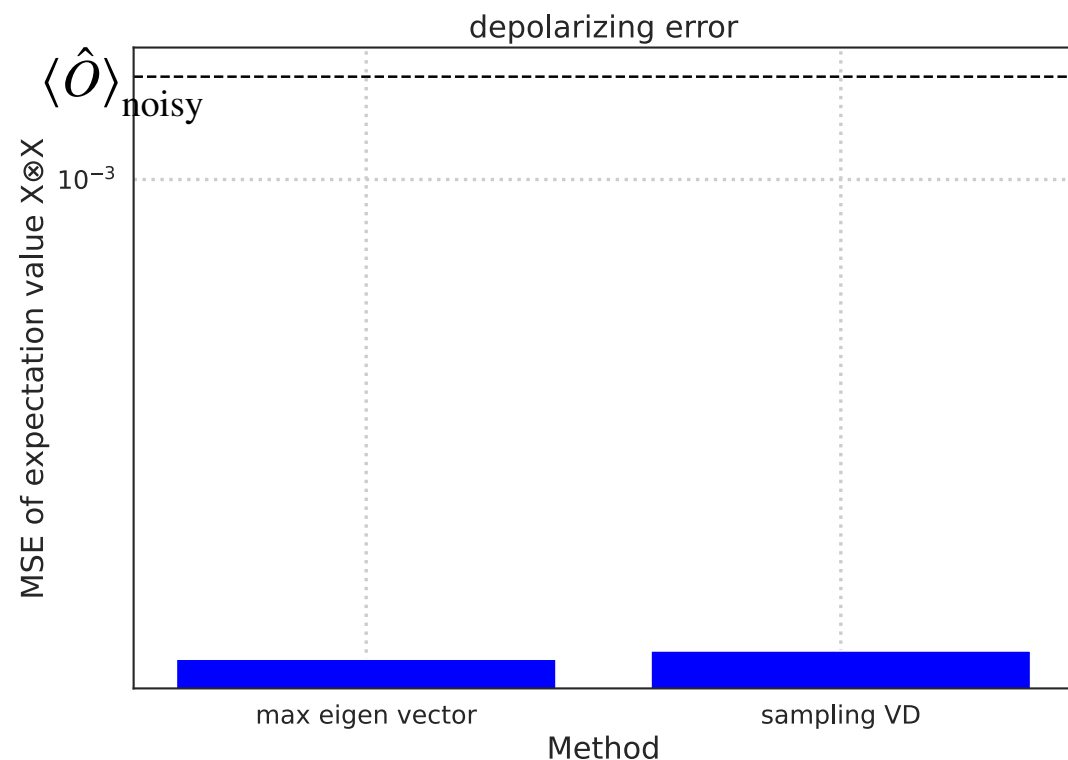
最適なコピー数は $m = 2$ となる

5. 数値計算結果



適用例：Bell状態に対する $\hat{O} = X \otimes X$ の期待値推定 (エラー率 $p = 1\%$, $m = 2$)

最適なコピー数における推定精度の検証



サンプリングによるVirtual Distillationが計算コストと推定精度の両面で効果的であることを確認

4. まとめと今後の展望



6. まとめと今後の展望



まとめ

- ・本研究では、NQSを用いたVirtual Distillationを提案した。
- ・提案手法においても従来のVirtual Distillationと同様の性能を確認できた。
- ・従来のVirtual Distillationの問題点である複数の量子状態の準備と量子操作におけるノイズを回避し、効率良く期待値の推定を行うことができた。

今後の展望

qubit数・量子回路depthの拡張

- 3 ～ 10数qubitのGHZ状態
- ランダム量子回路
- イジング模型

一般化部分空間展開法への適用

- NQSの適用性の確認
- ユニタリーノイズへの有効性の確認
- 同様の量子系への拡張