

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 21 日現在

機関番号：13904

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2015

課題番号：25871052

研究課題名(和文)多倍長精度密度行列繰込群による量子エラーモデルの再考

研究課題名(英文)Reconsideration of a quantum error model by using multiprecision DMRG

研究代表者

齋藤 暁(SaiToh, Akira)

豊橋技術科学大学・工学(系)研究科(研究院)・助教

研究者番号：70513068

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文):量子ゲート操作での時間発展を支配するハミルトニアンに機器の較正エラーに相当する誤差が入るモデルを考え、その下で、いくつかの量子アルゴリズムを時間依存行列積状態法(TDMPS)で多倍長精度でシミュレートし、終状態における誤差について予備的な結果を得た。

計算ライブラリの開発は進捗が大きく、バックエンドライブラリのエルミート行列対角化ルーチンが、著名なPARIライブラリのそれよりも高速になった他、Liouville空間上のTDMPSの安定動作が可能になった。副次的な成果として、量子エラーを積極的に利用する量子DA変換アルゴリズムを開発した。

研究成果の概要(英文): Calibration error has been modeled by introducing appropriate deviations in the Hamiltonian terms that govern quantum gate operations. With this modeling, several quantum algorithms have been analyzed by the time-dependent matrix-product-state method with multiprecision computing, which has achieved preliminary results on the deviation in their output states.

Besides to this, there has been an improvement in our simulation library: The back-end library now diagonalizes an Hermitian matrix faster than the well-known Pari library. In addition, stability of our library for Liouville-space time evolution has been rather improved.

The research has also derived a quantum algorithm for digital-to-analog conversion that actively uses quantum errors although this achievement is not directly related to the main topic.

研究分野：量子情報

キーワード：量子エラー 量子計算機 密度行列繰込群 行列積状態 数値シミュレーション 多倍長精度計算

1. 研究開始当初の背景

(1) 量子エラーモデルについて

現代の古典計算機においては、実際のエラー訂正と符号理論との間に齟齬はないといっても過言ではない。それは個々の素子の挙動が十分安定しているのみならず、素子間でのエラーの伝搬とエラーの相関が正確にモデル化されているためである。一方、量子計算機の実験的研究では、現状では個々の機器の較正(キャリブレーション)に膨大な手間が費やされ、実験系の規模拡大を阻害している。規模が小さいがためにエラー訂正ができないのであって、ある程度大規模な量子回路を構成できるようになればエラー訂正ができるようになるからさらなる大規模化は容易になるという見方もある。しかし既存の量子エラー訂正理論[1]では量子ビット毎に無相関なゲートエラーか、あるいは同時かつ同種のゲートエラーが発生する場合を想定することがほとんどであり、はたして、実際の較正誤差の下で大規模化が可能か否かは明らかになっていない。

機器の較正誤差は、非同期的に相関を持ったゲートエラーあるいは測定エラーを発生させる：一つの場合として、ある測定装置に較正誤差があり、測定基底と計算基底が一致しない場合を考える。複数の量子ビットの測定にこの測定装置を使用すると、それら間に相関を持ったエラーが継続的に生じる。別の場合として、各量子ビット毎に別々に較正された測定装置を使う場合を考える。この場合でも、論理量子ビットを使っていると、測定結果に基づいて複数量子ビットに同時に操作が入るので、その都度量子ビット間に相関を持ったエラーが生じる。

もっとも、相関を持ったエラーに関しても、一般的に、エラーが部分系の距離についてある多項式で十分早く減衰するものであれば、量子エラー訂正符号で十分訂正可能である、という定理が知られている[2]。しかし、上述のエラーは、較正誤差が位置関係に関わらず一定であるのでこの定理の範疇ではない。

(2) 量子エラーの数値シミュレーションについて

量子回路モデルでの量子エラーの数値解析にはいくつかの手法がある。(i) 高速な古典シミュレーションが可能であると分かっている、安定化群符号化法の符号化と、Pauli エラー、そして復号化だけをシミュレートする手法[3]があるが、これではアルゴリズムやプロトコルを符号語を使って走らせた場合のエラー伝播が解析できない。(ii) 愚直にノイズ下の量子状態の時間発展をそのままシミュレートする方法[4]もよく使われるが、有意義な量子情報処理の高精度のエラー解析には膨大な計算資源が要求される。(iii) 時間依存行列積状態(TDMPS、あるいは時間依存密度行列繰込群)[5]を使うと、状態の Schmidt ランクの 3 乗のオーダーの時間で

シミュレーションが可能になる。符号化していると Schmidt ランクが比較的大きくなっているが、それでも愚直なシミュレーションよりは経験上はるかに高速である。

ただしいずれにしても、浮動小数点演算がたかだか倍精度(仮数部 53 ビット)で行われている限りは数値的な丸め誤差の蓄積の影響があり、最終的な計算結果が、本来見たかった量子エラーによる誤差と量子エラー訂正による回復を反映しているのか、数値誤差の影響の方が大きいのか、疑念が生じるところである。

<引用文献>

- [1] J. Gruska, Quantum Computing (McGraw-Hill, Berkshire, UK, 1999)
- [2] J. Preskill, Sufficient condition on noise correlations for scalable quantum computing, Quantum Inf. Comput. 13, 181-194 (2013)
- [3] E. Knill, Quantum computing with very noisy devices, Nature 434, 39-44 (2005)
- [4] J. Niwa, K. Matsumoto, and H. Imai, General-purpose parallel simulator for quantum computing, Phys. Rev. A 66, 062317 (2002)
- [5] G. Vidal, Efficient classical simulation of slightly entangled quantum computations, Phys. Rev. Lett. 91, 147902 (2003)

2. 研究の目的

規模が拡大可能な量子計算機の実現のためには、全ての起こりうるエラーについて多項式資源でエラー訂正可能である必要がある。本研究はこの観点での数値的および理論的研究であり、その目的は概して以下のとおりであった。(i) 機器の較正誤差に起因して相関を持ったエラーが発生する場合に相当する、現実的なエラーモデルを導入する。(ii) そして、そのモデルの下で量子アルゴリズム / プロトコルの挙動を多倍長精度の TDMPS 法によって高解像度で観察し、量子エラー訂正理論を再評価したい。

なお、当初は、較正誤差に起因するエラーの訂正問題がどの計算量クラスに属するか、という計算量理論の問題の解決も研究目標に掲げていた。残念ながら、研究を進める上で、計算量理論的な考察にまで到達できなかった。

副次的な目的として、使いやすい多倍長精度の行列計算ライブラリおよび TDMPS ライブラリの開発の進行、特に安定して動作するスピン Liouville 空間用の TDMPS ライブラリの実装も掲げていた。

3. 研究の方法

較正エラーを考慮すると量子エラー訂正が困難になるような、量子回路構造とエラー発生状況の組み合わせの例(インスタンス)

がある可能性があり、それらを見つけ出す発見的方法を模索した。すなわち、まず、理論的に妥当な較正エラーを定式化する。次に、実際的な量子アルゴリズム・プロトコルの量子回路において、較正エラーがあった場合の失敗確率やエラー伝播を数値解析する。数値解析では数値計算自体の誤差が混入しないように多倍長精度の TDMPs ライブラリを使用する。

研究開始時点で、すでにライブラリはある程度開発が進んでおり、本研究の数値解析には十分な種類の関数を実装していたが、計算速度が不十分であったのと、Liouville 空間上での安定動作ができていなかったため、改善の余地が多分にあった。

量子エラーシミュレーションの過程では、状態は必然的に混合状態になるため、混合状態を安定的に扱えるようにライブラリを改良する必要があった。また、研究開始時点では、スピン Liouville 空間上で TDMPs を使うべきか、Purification を使って Hilbert 空間上ですべて計算を完了させるべきか、判断に迷っていた。

4. 研究成果

(1) 計算ライブラリ自体の改善

本研究で使用している数値計算ライブラリ ZKCM_QC は、オープンソースで公開しており、多倍長精度で TDMPs の計算を行える。このライブラリのバックエンドライブラリはやはり以前からオープンソースで開発してきた多倍長精度の行列計算用の C++ライブラリ ZKCM である。TDMPs では、各ステップでエルミート行列である縮約密度行列の対角化が頻繁に発生する。そのため、エルミート行列の対角化の速度が計算全体の速度に大きく影響する。ZKCM のエルミート行列対角化ルーチンはハウスホルダー QR 法と逆反復法を使った標準的な構造になっておりルーチン自体に手を入れる余地はほとんどなかったが、多倍長精度の各基本演算の速度を考慮した純粋に技術的な細々した改善を施して高速化に取り組んだ。下の引用文献[1]で示したように、著名な多倍長精度計算用 C ライブラリである PARI (ver.2.5.3) に対して、ZKCM (ver.0.3.6) は、100 x 100 のランダムエルミート行列の対角化において各浮動小数点精度で上回る速度を達成した。

この改善を踏まえて、量子計算では標準的なアルゴリズムである Deutsch-Jozsa アルゴリズム、Grover アルゴリズム、量子フーリエ変換(QFT)ベースの算術演算、Shor のアルゴリズム(ただし QFT ベース)について、ZKCM_QC ライブラリを使った場合の高速なシミュレーションの可能性について総論的に論じた[1]。

また、当初は、ZKCM_QC ライブラリのスピン Liouville 空間向けのサブライブラリは数値的に不安定で未完成であったが、やはり技術的な改良を重ねて、安定して動作するよう

にした。(サブライブラリは ZKCM_QC の GIT レポジトリで公開している。“ホームページ等”-(1)を参照。)

(2) 較正誤差の下での量子アルゴリズムのスピン Liouville 空間上での TDMPs 数値解析

Hilbert 空間上およびスピン Liouville 空間上での TDMPs によって表題の数値解析を実施した[2]。具体的には以下のようにした。量子ゲートの実装誤りとして、そのゲートを実現するためのハミルトニアンのパラメータおよび時間幅に、平均ゼロのガウス分布をするエラーが入るモデルを導入した。そのモデルの下で、量子フーリエ変換とそれをベースとする算術回路、および Deutsch-Jozsa アルゴリズムをシミュレーションし、エラーの標準偏差と終状態における誤差の関係を見た。(終状態における誤差としては理想的な場合のそれとの Trace Distance を採用した。) が小さい範囲では概ね多項式の関係であり想定通りの結果となった。なお、100 量子ビット程度の幅の回路の場合、誤差を正しくシミュレーションするには浮動小数点演算精度が 200 ビット精度以上必要であった。倍精度程度では、精度不足による数値誤差が支配的であった。

また、当初は平均的に小さな計算資源でシミュレートできると想定していた DQC1 モデル(単一の擬似純粋状態ビットと最大限混合状態レジスタを入力とするモデル)においても数値シミュレーションに取り組んでいた[3]が、これについては、平均的にも計算資源が大量に必要であることを示唆する結果となった[4]。

(3) 量子エラーを積極的に利用する量子 DA 変換アルゴリズム

本研究で妥当な量子エラーモデルの定式化を検討していた際に、量子エラーを有用な演算として積極的に利用する発想に到り、新しい量子 DA 変換アルゴリズムを構築することができた。これに関する結果は下の引用文献[5]にまとめた。本研究の主題からは外れるが副次的な成果と言えよう。

この論文ではまず、量子レジスタに並列格納されたデジタルデータを並列的にアナログ振幅に変換する、並列 DA 変換問題を定義し、そして、この問題が計算量的に難しい問題であることを証明した。すなわち、それが多項式サイズ量子回路で解けてしまうと、計算量クラス NP が計算量クラス BQP に含まれてしまうことを証明した。よって、この問題は通常の量子計算モデルでは簡単には解けないことが予想される。

続いて、指数的に大きな計算資源として分子アンサンブルを利用するバルクアンサンブルモデルにおいて、並列 DA 変換問題を線形時間で解くアルゴリズムを提示した。(なお、指数資源を要しているので妥当な結果である。) このアルゴリズムでは、通常の量子

ゲートに加えて Dephasing 写像と Depolarization 写像を使っており、個々のデジタルデータの DA 変換が同時に行われるように構成されている。

<引用文献>

[1] A. SaiToh, Fast and accurate simulation of quantum computing by multi-precision MPS: recent development, in the Proceedings of the Summer Workshop on ``Physics, Mathematics, And All That Quantum Jazz'', S. Tanaka et al. Eds, (World Scientific, Singapore, 2014), pp.49-67.

[2] A. SaiToh, Highly accurate numerical evaluation of quantum errors in the circuit model, presented at International Iran Conference on Quantum Information 2014, 6-10 Sep. 2014, Isfahan, Iran.

[3] A. SaiToh, Practical difficulty and techniques in matrix-product-state simulation of quantum computing in Hilbert space and Liouville space, presented at the 21st Conference on Applications of Computer Algebra (ACA 2015), 20-23 Jul. 2015, Kalamata, Greece.

[4] 齋藤暁, DQC1 アルゴリズムの MPS シミュレーションコストについて, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19 日-22 日, 仙台.

[5] A. SaiToh, Quantum digital-to-analog conversion algorithm using decoherence, Quantum Inf. Process. 14, 2729-2748 (2015)

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 2 件)

1. Akira SaiToh, Quantum digital-to-analog conversion algorithm using decoherence, Quantum Information Processing, vol.14, pp.2729-2748 (2015), 査読有り, DOI: 10.1007/s11128-015-1033-x

2. Akira SaiToh, Fast and accurate simulation of quantum computing by multi-precision MPS: recent development, in the Proceedings of the Summer Workshop on ``Physics, Mathematics, And All That Quantum Jazz'', S. Tanaka et al. Eds, (World Scientific, Singapore, 2014), pp.49-67, 査読無し, DOI: 10.1142/9789814602372_0004

[学会発表](計 16 件)

1. 齋藤暁, DQC1 アルゴリズムの MPS シミュレーションコストについて, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19 日-22 日, 東北学院大学 (宮城県・仙台市)

2. Akira SaiToh, MPS simulation of a DQC1 quantum algorithm, The 75th Okazaki Conference ``Tensor Network States: Algorithms and Applications 2016'', 2016 年 1 月 11 日-14 日, 岡崎コンファレンスセンター (愛知県・岡崎市)

3. Akihide Miyazaki, Shinri Yamada, Akira SaiToh, Shinji Hamada, and Hideo Sekino, Error Control of Quantum Walk, Workshop of Quantum Simulation and Quantum Walks 2015, 2015 年 11 月 16 日-18 日, 横浜国立大学 (神奈川県・横浜市)

4. Akira SaiToh, Practical difficulty and techniques in matrix-product-state simulation of quantum computing in Hilbert space and Liouville space, 21st Conference on Applications of Computer Algebra (ACA 2015), 2015 年 7 月 20 日-23 日, Kalamata (Greece)

5. 山田真理, 齋藤暁, 濱田信次, 関野秀男, GPU を用いた量子ウォークのエラー抑制シミュレーション, 電子情報通信学会 2015 年総合大会, 2015 年 3 月 10 日-13 日, 立命館大学 (滋賀県・草津市)

6. 齋藤暁, アンサンブル量子 DA 変換における量子相関, 第 4 回 QUATUO 研究会, 2015 年 1 月 11 日-12 日, 高知工科大学 (高知県・香美市)

7. Akira SaiToh, Recent progress in a multiprecision MPS simulation library for quantum information science, 4th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics - Toward post-K computers, 2014 年 11 月 23 日-24 日, 東京大学 (東京都・文京区)

8. Akira SaiToh, Highly accurate numerical evaluation of quantum errors in the circuit model, International Iran Conference on Quantum Information 2014, 2014 年 9 月 6 日-10 日, Isfahan University of Technology, Isfahan (Iran)

9. 齋藤暁, 量子緩和を利用した量子 DA 変換アルゴリズム, コンピューテーション研究会 (信学技報 vol.114, no.199, COMP2014-21, pp.43-49), 2014 年 9 月 2 日, 豊橋技術科学大学 (愛知県・豊橋市)

10. Akira SaiToh, Proposal of a quantum digital-to-analog converter for bulk-ensemble machines, Physics of Quantum Information Processing (Satellite

Workshop of AQIS 2014), 2014年8月25日-26日, 大阪大学 (大阪府・豊中市)

11. 齋藤 暁, 時間依存密度行列繰返群による量子計算機のシミュレーションの実際, 基礎物理学研究所研究会 量子情報の新展開-複雑性の極限における普遍的物理の探求-, 2014年3月23日-25日, 京都大学 (京都府・京都市)

12. Akira SaiToh, Development of multi-precision time-dependent matrix product state library for simulating quantum computation, 7th Beyond Simulation Forum, 2014年2月5日, 豊橋技術科学大学 (愛知県・豊橋市)

13. 齋藤 暁, 多倍長精度のオペレータ空間時間依存行列積ライブラリの開発状況と展望, 第3回 QUATUO 研究会, 2014年1月11日-12日, 高知工科大学 (高知県・香美市)

14. 齋藤 暁, アニール機械の現実的な計算能力について, 日本物理学会 2013年秋大会, 2013年9月25日-28日, 徳島大学 (徳島県・徳島市)

15. Akira SaiToh, Fast and accurate simulation of quantum computing by multi-precision MPS: recent development, Summer Workshop on ``Physics, Mathematics, And All That Quantum Jazz'', 2013年8月7日-9日, 近畿大学 (大阪府・東大阪市)

16. Akira SaiToh, On the hardness of practical instances for time-dependent MPS simulation of typical quantum algorithms, The 12th Asia Pacific Physics Conference (APPC12), 2013年7月14日-19日, 幕張メッセ (千葉県・千葉市)

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕
出願状況 (計0件)

取得状況 (計0件)

〔その他〕

ホームページ等

(1) ZKCM Library & ZKCM_QC Library, URL:
<http://zkcm.sf.net/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

齋藤 暁 (SAITOH, Akira)

豊橋技術科学大学・情報・知能工学系・助教
研究者番号: 70513068