

入れ子型複合量子ゲートの忠実度と入れ子の順序

坂東 将光*

市川 翼†

Fidelity and nesting of concatenated composite pulses

Masamitsu BANDO

Tsubasa ICHIKAWA

Abstract: In quantum information theory, composite quantum gates are important techniques to tackle systematic and random errors in simple quantum gates. In this paper, we describe a simple prescription to design a concatenated composite pulse (CCCP) that is robust against two types of systematic errors simultaneously and discuss fidelity and nesting of the CCCP.

keyword quantum information, composite gate, precise quantum controlling

1. 緒言

量子状態の制御 (量子制御) を精確に行うことは、量子コンピュータの実現はもとより、化学や医学の分野で用いられる核磁気共鳴 (NMR) や磁気共鳴画像法 (MRI) などにおいても重要である。量子情報処理とは、従来の情報処理 (古典情報処理) と異なる、量子回路に基づく情報処理である。量子情報処理を用いたコンピュータである量子コンピュータは、従来のコンピュータでは現実的な時間で実行不可能な計算を短時間で実行できるため、近年注目されている [1]。量子コンピュータにおける情報の最小単位は、従来のコンピュータにおけるビットとは異なり、量子ビットと呼ばれる量子力学的な 2 準位状態であり、その基本操作は量子ビットへのユニタリ操作となる。量子状態は、従来のコンピュータのビットのような古典的な状態とは異なり、外界からの望まない影響を受けやすい。そのため、量子制御をいかに精確に行うかが量子コンピュータを実現するにあたっての課題となる。また、NMR や MRI においては、人体や物質中の核スピンを制御し、その応答を観測することによって情報を得ることができる [2]。核スピンの状態は量子状態であるため、高い精度の測定を行うためには、高い精度の量子制御が必要となる。

昔から NMR では、この問題を解決するために複合パルスという手法が用いられてきた [3, 4, 5, 6]。これは、複数の単純な操作 (パルス) を組み合わせて量子制御を

行うというもので、1979 年に Levitt と Freeman によって最初の複合パルスである $90x-180y-90x$ パルス [7] が設計されて以来、様々な複合パルスが化学の分野で設計されてきた。量子コンピュータのハードウェアとして NMR が利用できることが知られてからは、複合パルスの技術は複合量子ゲートとして、量子情報処理の分野でより一層の発展を遂げ [8, 9]、複合量子ゲートの発展である入れ子型複合量子ゲートが設計されたことで、従来では不可能だった 2 種類のエラーに対応できるようになった [10, 11, 12]。

本論文では、1 量子ビットゲートのみに着目し、NMR 量子コンピュータにおける入れ子型複合量子ゲートの原理を簡単に解説すると共に、代表的な 1 量子ビットゲートである NOT ゲートを例に、入れ子の順序が忠実度に大きな役割を果たすことをシミュレーションにより示す。

2. 量子ビットと量子ゲート

量子ビットとは、量子力学的な 2 準位状態であり、古典量子情報におけるビットに対応するものである。古典情報処理における “0” と “1” の 2 つの状態は、量子情報処理においては 2 次元複素ベクトルであり、一般に

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

と表される。NMR 量子コンピュータにおいては、 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の 2 つの状態はそれぞれ上向きと下向きのスピンの対応付けられる。

*近畿大学工業高等専門学校
総合システム工学科 情報コミュニケーションコース
†学習院大学 理学部

量子ゲートとは、量子ビットへのユニタリ操作であり、古典情報処理における否定 (NOT) などのゲートに対応する複素行列である。本論文では1量子ビットゲートのみ扱うため、以下ではこれを単に量子ゲートと呼ぶ。NMRで量子ビットを制御するための、時間に依存しないハミルトニアン

$$H = \frac{\xi}{2} \mathbf{n}(\phi) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2)$$

を考える。ここで、 ξ はNMRにおける制御磁場 (パルス) の強さ、 $\mathbf{n}(\phi) = (\cos \phi, \sin \phi, 0)$ は制御磁場の方向を表す大きさ1のベクトル、 ϕ はその方位角、 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ であり、 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ はそれぞれ

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

である。NMRでは装置の制限から制御磁場の方向は x - y 平面に限定されるため、 $\mathbf{n}(\phi)$ の z 成分は0である。ここで、 $\hbar = 1$ の自然単位系を用いると、このハミルトニアンによる時刻 $t = 0$ から $t = T$ までの時間発展演算子は

$$R(\theta, \phi) = e^{-iHT} = \exp \left(-i \frac{\theta}{2} \mathbf{n}(\phi) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right), \quad (4)$$

となる。ここで、 $\theta = \xi T$ は量子ビットの状態の回転角を表しており、制御磁場の方向 $\mathbf{n}(\phi)$ が回転の軸となっている。ある回転角 θ と回転軸 (の方位角) ϕ で記述される量子ゲートが量子状態に作用することは、量子状態を表すベクトルに量子ゲートを表す行列を左から作用させることに相当する。例えば、 $|0\rangle$ に対する y 軸周りの $\pi/2$ 回転であれば、

$$R(\pi/2, \pi/2) |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle), \quad (5)$$

となり、上向き状態である $|0\rangle$ の状態は、 σ_x の+1の固有状態となるので、 x 軸に沿った横向きの状態となる。この状態は $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の重ね合わせ状態と呼ばれるものであり、 z 軸に沿って観測することによって $|0\rangle$ か $|1\rangle$ かのどちらかの状態へ収束する。代表的な1量子ビットゲートであるNOTゲートは $R(\pi, 0)$ と表すことができる。

3. 量子ゲートと2種類のエラー

ここまでは理想的な量子ゲートを考えてきたが、実際の実験では量子ゲートは外界からの望まない影響を受け、回転角及び回転の軸が理想的な状態からずれることになる。そしてそのような量子ゲートの作用を受

けた量子状態も、期待される状態からずれたものになってしまう。この“ずれ”が量子コンピュータの実現を困難にし、NMRおよびMRIの精度を低下させる大きな原因の一つである。このずれには、エラーと呼ばれる影響が系統的なものと、ノイズと呼ばれる時間に依存するものの2種類があるが、本論文ではエラーのみを扱うことにする。

量子ゲートにかかるエラーには2種類のものがあり、回転角のエラーはパルス長エラー (pulse length error, PLE)、回転軸のエラーはオフレゾナンスエラー (off-resonance error, ORE) と呼ばれる。

3.1 パルス長エラー

パルス長エラーは、制御磁場の大きさのエラーであり、回転角に系統的なエラーがかかることで量子ゲートは

$$R'_\epsilon(\theta, \phi) = R(\theta(1 + \epsilon), \phi) = \exp \left(-i \frac{\theta}{2} (1 + \epsilon) \mathbf{n}(\phi) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right), \quad (6)$$

のようになる。ここで、 $|\epsilon| \ll 1$ は未知の定数であり、パルス長エラーの大きさを表す。式(6)で表されるパルス長エラーの影響下での量子ゲートは、エラーの1次の項まででマクローリン展開すると

$$R'_\epsilon(\theta, \phi) \simeq R(\theta, \phi) - i\epsilon \frac{\theta}{2} \mathbf{n}(\phi) \cdot \boldsymbol{\sigma} R(\theta, \phi), \quad (7)$$

となる。

3.2 オフレゾナンスエラー

オフレゾナンスエラーは、NMRの共鳴周波数のずれによるエラーであり、回転軸に系統的なエラーがかかることで量子ゲートは

$$R'_f(\theta, \phi) = \exp \left(-i \frac{\theta}{2} (\mathbf{n}(\phi) \cdot \boldsymbol{\sigma} + f \sigma_z) \right), \quad (8)$$

のようになる。ここで、 $|f| \ll 1$ は未知の定数であり、オフレゾナンスエラーの大きさを表す。式(8)で表されるオフレゾナンスエラーの影響下での量子ゲートは、エラーの1次の項まででマクローリン展開すると

$$R'_f(\theta, \phi) \simeq R(\theta, \phi) - if \sin \frac{\theta}{2} \sigma_z, \quad (9)$$

となる。実際の量子ゲートはパルス長エラーとオフレゾナンスエラーの両方の影響を受け、

$$R'(\theta, \phi) \simeq R(\theta, \phi) - i\epsilon \frac{\theta}{2} \mathbf{n}(\phi) \cdot \boldsymbol{\sigma} R(\theta, \phi) - if \sin \frac{\theta}{2} \sigma_z, \quad (10)$$

となる。

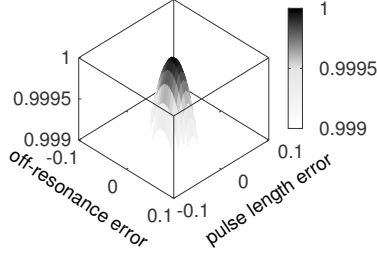


図 1: パルス長エラーとオフレゾナンスエラーに対する単純な量子ゲートの忠実度。パルス長エラーおよびオフレゾナンスエラーがあると、忠実度は急激に低下する。

3.3 量子ゲートの忠実度

これら 2 種類のエラーの影響を定量的に見るため、以下に示す量子ゲートの忠実度 F を用いる。

$$F = |\text{tr}(U^\dagger U')|/2. \quad (11)$$

ここで U^\dagger は理想的な量子ゲートをエルミート転置したものであり、 U' はエラーのある量子ゲートである。忠実度 F は 0 から 1 までの値を取り、1 に近いほどエラーの影響が小さいことを表す。図 1 は、パルス長エラーとオフレゾナンスエラーに対する NOT ゲート $R(\pi, 0)$ の忠実度のシミュレーションを 3 次元の密度プロットで示したものである。両エラーがない場合は忠実度が 1 であるが、エラーが少しでもあると、忠実度は急激に低下することがわかる。

4. 複合量子ゲート

パルス長エラーやオフレゾナンスエラーの 1 次の項を消すために、NMR では 3 つ以上のパルス (量子ゲート) を組み合わせて 1 つのパルスを作成するという手法が開発された。これが複合パルスであり、量子情報の分野では NMR のパルスを量子ゲートとして利用できるため、複合量子ゲートと呼ばれている。これ以降、エラーの 1 次の項をもたないことを、そのエラーに耐性があると表現する。

複合量子ゲートは 3 つ以上の量子ゲートからなるが、エラーがない場合は目的の量子ゲートと同じ結果にならなくてはならない。つまり、複合量子ゲートを構成する量子ゲートを $R(\theta_i, \phi_i)$ ($i = 1, 2, 3$) とすると、

$$R(\theta, \phi) = R(\theta_3, \phi_3)R(\theta_2, \phi_2)R(\theta_1, \phi_1), \quad (12)$$

の関係を満たす必要がある。これは 3 個以上の量子ゲートから構成される複合量子ゲートであっても同様であ

る。以下では分かり易さのために $R(\theta_i, \phi_i)$ を R_i と表す。

パルス長エラーに耐性をもつ複合量子ゲートとして、SCROFULOUS [13]、symmetric-BB1 [14] や SK1 [15] と呼ばれるものがある。SCROFULOUS と SK1 は 3 つの、symmetric-BB1 は 5 つの量子ゲートから構成される複合量子ゲートであり、SCROFULOUS は

$$\begin{aligned} \theta_1 = \theta_3 &= \text{arcsinc}[2 \cos(\theta/2)/\pi], \quad \theta_2 = \pi, \\ \phi_1 = \phi_3 &= \arccos\left[-\frac{\pi \cos \theta_1}{2\theta_1 \sin(\theta/2)}\right], \\ \phi_2 &= \phi_1 - \arccos[-\pi/(2\theta_1)], \end{aligned} \quad (13)$$

symmetric-BB1 は

$$\begin{aligned} \theta_1 = \theta_5 &= \theta/2, \quad \theta_2 = \theta_4 = \pi, \quad \theta_3 = 2\pi, \\ \phi_1 = \phi_5 &= \phi, \quad \phi_2 = \phi_4 = \phi + \arccos[-\theta/(4\pi)], \\ \phi_3 &= 3\phi_2 - 2\phi, \end{aligned} \quad (14)$$

SK1 は

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \theta, \quad \theta_2 = \theta_3 = 2\pi, \quad \phi_1 = \phi, \\ \phi_2 &= \phi - \arccos[-\theta/(4\pi)], \\ \phi_3 &= \phi + \arccos[-\theta/(4\pi)], \end{aligned} \quad (15)$$

である。図 2 は、これら 3 つの複合量子ゲートで作成した NOT ゲートの忠実度である。

オフレゾナンスエラーに耐性をもつ複合量子ゲートで知られているものでは、3 つの量子ゲートから成る CORPSE と呼ばれるものがある [13]。CORPSE を構成する各量子ゲートは

$$\begin{aligned} \theta_1 &= 2n_1\pi + \theta/2 - k, \quad \theta_2 = 2n_2\pi - 2k, \\ \theta_3 &= 2n_3\pi + \theta/2 - k, \\ \phi_1 &= \phi_2 - \pi = \phi_3 = \phi, \end{aligned} \quad (16)$$

であり、ここで $k = \arcsin[\sin(\theta/2)/2]$ 、 n_1 および n_3 は 0 以上の整数、 n_2 は 1 以上の整数である。 n_1, n_2, n_3 の取り方によって様々なものがあるが、通常 $n_1 = n_2 = 1$ かつ $n_3 = 0$ のものを単に CORPSE、 $n_1 = n_3 = 0$ かつ $n_2 = 1$ のものを short CORPSE と呼ぶ。

これらの複合量子ゲートは、エラーがないときターゲットの量子ゲートと同じになり、エラーがあるときエラーの 1 次の項を消すという条件の元で計算することで得られる。しかし、パラメータである θ_i, ϕ_i の個数は、構成する量子ゲート数の 2 倍の数だけ存在するため、解析的に求めることは困難である。そこで、適当な条件を付加して解を求めるという方法が採られる。以下は、3 つの量子ゲートで構成される複合量子ゲ

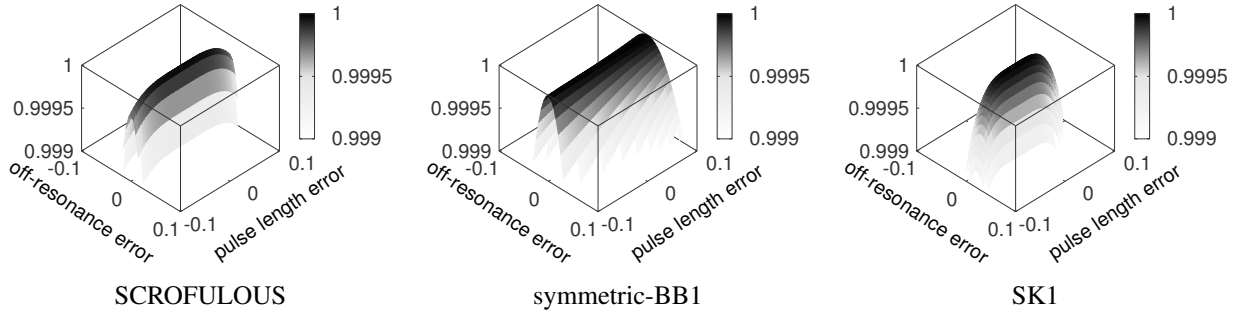


図 2: パルス長エラーとオフレゾナンスエラーに対する複合量子ゲート (SCROFULOUS、symmetric-BB1、SK1) の忠実度。これらの複合量子ゲートはパルス長エラーに対しては耐性を持つが、オフレゾナンスエラーに対しては耐性を持たない。

トで、 $R_3 = R_1$ となる対称性を持つという条件のもと、我々が作成したオフレゾナンスエラーに耐性をもつ複合量子ゲートのパラメータである。

$$\begin{aligned}\theta_1 &= \theta_3 = 2\pi - \arcsin[\tan(\theta_2/2)], \\ \theta_2 &= 2 \arcsin\left[\sin(\theta/2)/\sqrt{2}\right], \\ \phi_1 &= \phi_3 = \phi_2 + \pi/2, \quad \phi_2 = \phi + \pi/4.\end{aligned}\quad (17)$$

この複合量子ゲートは便宜上 NEW と表記する。図 3 は、CORPSE、short CORPSE および NEW の複合量子ゲートで作成した NOT ゲートの忠実度である。

5. 入れ子型複合量子ゲート

これまで紹介した複合量子ゲートでは、パルス長エラーかオフレゾナンスエラーのどちらか一方にしか耐性を持たせることができない。入れ子型複合量子 (Con-Catenated Composite Pulse, CCCP) は、これらの複合量子ゲートを図 4 のように入れ子状にすることで両方のエラーに耐性をもたせることを可能にしたものである [10, 12]。入れ子型複合量子ゲート以外にも、パルス長エラーとオフレゾナンスエラーの両方に耐性をもつ複合量子ゲートは存在するが [16, 17]、どれも回転角や回転軸に制限をもつものばかりである。

複合量子ゲートを入れ子にするには、まず入れ子の外側の複合量子ゲートと、内側の複合量子ゲートを決める必要がある。これらは一方がパルス長エラーに、他方がオフレゾナンスエラーに耐性をもつものを選ぶ必要がある。その後、ターゲットの量子ゲートを外側の複合量子ゲートで置き換え、さらにその複合量子ゲートを構成する各量子ゲートを、内側の複合量子ゲートで置き換える。

内側の複合量子ゲートは、residual error preserving (REP) と呼ばれる性質をもっている必要がある。これは、自身の耐性のない方のエラーの 1 次の形を保存す

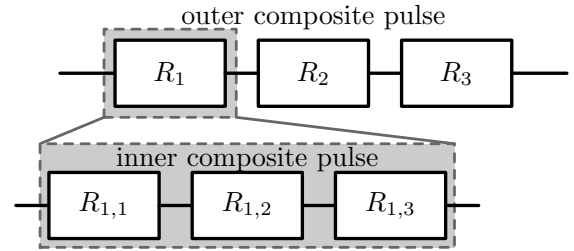


図 4: 入れ子型複合量子ゲートの概念図。外側の複合量子ゲートを構成する各量子ゲートを、別の複合量子ゲートで置き換える。

る、というものである。例えば任意の 1 量子ビットゲートをパルス長エラーやオフレゾナンスエラーに耐性のある複合量子ゲートに置き換えることで、そのエラーの 1 次の項は消えるが、もう一方のエラーの 1 次の項は消えずに残る。このとき、残ったエラーの 1 次の項の形を 1 量子ビットゲートにかかるエラー (式 (7) または (9) の右辺第 2 項) と同じ形に保つ事を、REP をもつと言う。一般的に残ったエラーの 1 次の項は変わるため、全ての複合量子ゲートが REP をもつわけではなく、例えば symmetric-BB1、SK1 や CORPSE は REP をもつが、SCROFULOUS や short CORPSE は REP をもたない。

ここでは、入れ子型複合量子ゲートの名称として、内側の複合量子ゲート/外側の複合量子ゲートの順で記載する。例えば CORPSE を内側、SCROFULOUS を外側の複合量子ゲートとした場合は CORPSE/SCROFULOUS である。図 6 は、CORPSE/SCROFULOUS および symmetric-BB1/NEW の入れ子型複合量子ゲートの忠実度である。パルス長エラーとオフレゾナンスエラーの両方に対して耐性をもっていることが確認できる。

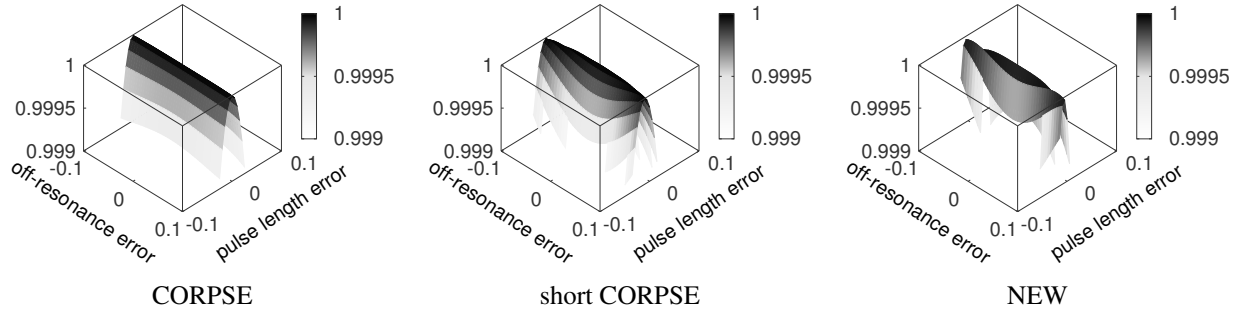


図 3: パルス長エラーとオフレゾナンスエラーに対する複合量子ゲート (CORPSE、short CORPSE) の忠実度。これらの複合量子ゲートはオフレゾナンスエラーに対しては耐性を持つが、パルス長エラーに対しては耐性を持たない。

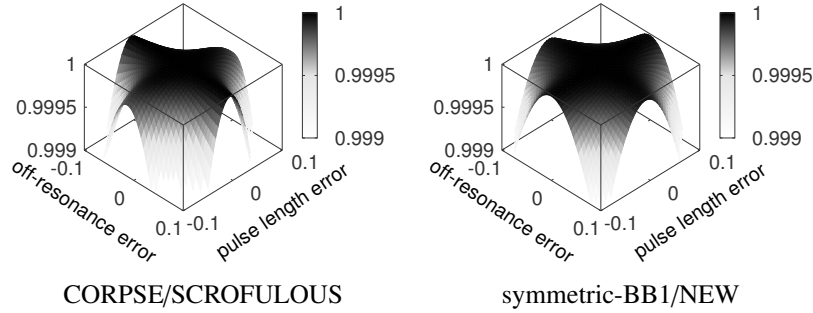


図 5: パルス長エラーとオフレゾナンスエラーに対する、CORPSE、symmetric-BB1 および SK1 を用いた入れ子型複合量子ゲートの忠実度。これらの複合量子ゲートは両エラーに対して耐性をもつ。

6. 入れ子型複合量子ゲートと入れ子の順序

入れ子型複合量子ゲートに使用する 2 つの複合量子ゲートとして、共に REP をもつものを選んだ場合、どちらを入れ子の内側 / 外側にしても良いことになる。ここでは、symmetric-BB1 と CORPSE を選んだ場合と、SK1 と CORPSE を選んだ場合の 2 つの場合について、入れ子の順序と忠実度の関係を調べる。

図 6 は CORPSE/symmetric-BB1 と CORPSE/SK1 について、入れ子の順序を逆にしたものと忠実度を比較したものである。CORPSE/symmetric-BB1 に関しては、入れ子の順序を入れ替えても忠実度に大きな変化は見られないが、CORPSE/SK1 については入れ子の順序を入れ替えると広い範囲で忠実度が大きく下がることが確認できる。この違いに関しては内側の複合量子ゲートが大きく影響していると考えられる。内側の複合量子ゲートは REP によって、外側の複合量子ゲートが消すべきエラーの 1 次の項は保存するが、高次の項は保存しない。一般にこの高次の項は、内側の複合量子ゲートによって元のものより大きくなり、さらにそれが外側の複合量子ゲートによって大きくなる。これが忠実度の低下を招くが、CORPSE については図 3 を見ても明らかなように、他の 2 つと違ってパルス長エラーに対する忠実度の低下が、オフレゾナンスエラーの大き

さにあまり依存しない。入れ子の順序を変えてもオフレゾナンスエラーについては大きな変化がなく、忠実度が高いままであることはこれが原因であると考えられる。また、symmetric-BB1 も、図 2 を見るとわかるように、元々オフレゾナンスエラーに対しての忠実度が、他のパルス長エラーに耐性をもつものより高い。これは symmetric-BB1 の 2 つ目から 4 つ目の量子ゲートに起因するものであり、この影響で CORPSE の場合と同様に入れ子の順序にあまり依存しない忠実度の高さを実現していると推察される。

この入れ子にする際の忠実度の低下は、外側の複合量子ゲートを構成する各量子ゲートを、なるべく内側の複合量子ゲートで入れ替えないように工夫する事で対処可能である。このような工夫をした入れ子型複合量子ゲートは、構成ゲート数を減らした入れ子型複合量子ゲート (reduced CCCP) として既に我々が以前に設計している [12]。図 7 は構成ゲート数を減らした SK1/CORPSE の忠実度である。構成ゲート数が減少に伴って忠実度の高い領域が増加しており、上の推察の正しさを裏付けている。

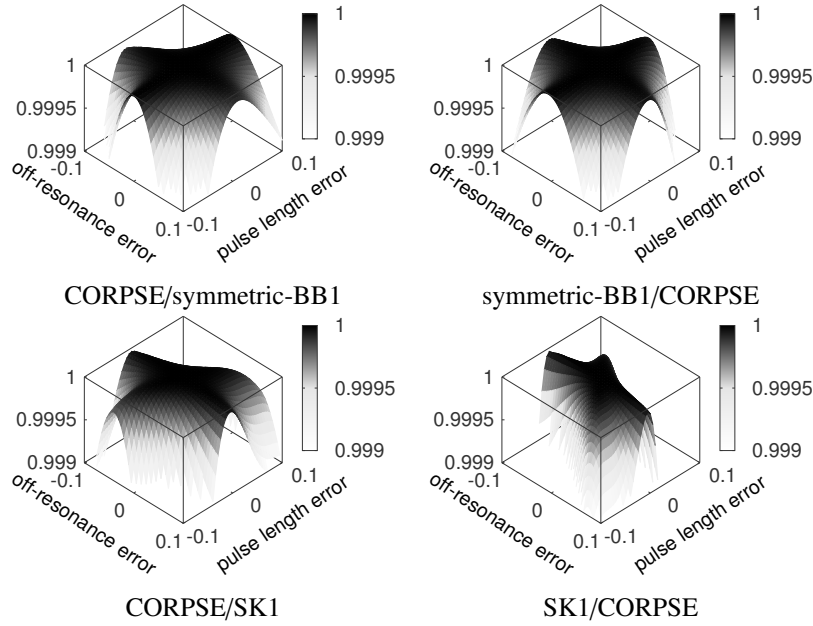


図 6: パルス長エラーとオフレゾナンスエラーに対する、CORPSE、symmetric-BB1 および SK1 を用いた入れ子型複合量子ゲートの忠実度。これらの複合量子ゲートは両エラーに対して耐性をもつ。

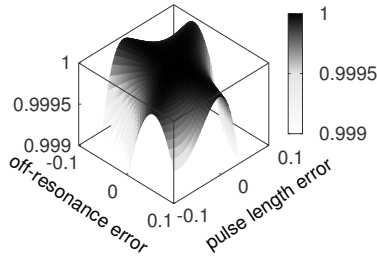


図 7: パルス長エラーとオフレゾナンスエラーに対する、構成ゲート数を減らした SK1/CORPSE の忠実度。

7. 結言

量子情報処理の基本的な要素である量子ビットや量子ゲート、そしてエラーの影響をハードウェアではなくソフトウェア面から抑えるための手法である複合量子ゲートとその発展形である入れ子型複合量子ゲートについて簡単に解説した。また、入れ子型複合量子ゲートの入れ子の順序が忠実度に大きな影響を与えることをシミュレーションを通して示した。図 7 のように、入れ子型複合量子ゲートの構成ゲート数を減らすことにより忠実度を高くすることができる。元々これら reduced CCCP は、入れ子型複合量子ゲートの構成ゲート数が多いというデメリットを解消するために開発されたものであったが、忠実度の向上にも繋がっているため、量子コンピュータのみならず、NMR などでの測定精度向上のためにより積極的に使用されることを期待したい。

参考文献

- [1] M. A. Nielsen, and I. C. Chuang, *Quantum Information and Quantum Computation* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [2] T. D. W. Claridge, *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry* (Elsevier, Oxford, 1999).
- [3] M. H. Levitt, “Composite pulses” in *Encyclopedia of nuclear magnetic resonance*, Eds. D. M. Grant and R. K. Harris (Wiley, 1996).
- [4] C. Counsell, M. H. Levitt, and R. R. Ernst, *J. Magn. Reson.* **63**, 133 (1985).
- [5] R. Tycko R, A. Pines, and J. Guckenheimer, *J. Chem. Phys.* **83**, 2775 (1985).
- [6] M. H. Levitt, *Prog. NMR Spectrosc.* **18**, 61 (1986).
- [7] M. H. Levitt, R. Freeman, *J. Magn. Reson.* **33**, 473 (1979).
- [8] M. Nakahara, and T. Ohmi, *Quantum Computing: From Linear Algebra to Physical Realizations* (Taylor and Francis, Boca Raton, 2008).
- [9] J. A. Jones, *Prog. NMR Spectrosc.* **59**, 91 (2011).
- [10] T. Ichikawa, M. Bando, Y. Kondo, and M. Nakahara, *Phys. Rev. A* **84**, 062311 (2011).
- [11] T. Ichikawa, M. Bando, Y. Kondo and M. Nakahara, *Phil. Trans. R. Soc. A* **370**, 4671 (2012).
- [12] M. Bando, T. Ichikawa, Y. Kondo and M. Nakahara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 014004 (2013).
- [13] H. K. Cummins, G. Llewellyn, and J. A. Jones, *Phys. Rev. A* **67**, 042308 (2003).
- [14] S. Wimpey, *J. Magn. Reson. A* **109**, 221 (1994).
- [15] K. R. Brown, A. W. Harrow, and I. L. Chuang, *Phys. Rev. A* **70**, 052318 (2004); K. R. Brown, A. W. Harrow, and I. L. Chuang, *Phys. Rev. A* **72**, 039905(E) (2005).
- [16] W. G. Alway, and J. A. Jones, *J. Magn. Reson.* **189**, 114 (2007).
- [17] C. A. Ryan, J. S. Hodges, and D. G. Cory, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 200402 (2010).