

有限回ショットの拡張ベル測定による 期待値評価と量子状態トモグラフィの精度の検討

近藤 瑠歩^{1,a)} 佐藤 勇気¹ 小出 智士¹ 梶田 晴司¹

概要: 任意の複素行列 $A \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$ に対して、測定によって期待値 $\langle \psi | A | \psi \rangle$ の評価や量子状態トモグラフィを効率的に行う方法（拡張ベル測定）を提案した。従来法（古典シャドウ法）では任意の A に対する期待値評価のために $O(n^2 / \log(n))$ 個の CNOT ゲートを用いるが、拡張ベル測定では最大で $n-1$ 個の CNOT ゲートしか使わないため、量子コンピュータ実機のノイズの影響を受けにくいという特徴がある。また、期待値評価の分散上限は、 A のバンド幅が $O(n^c)$ かつ非ゼロ要素がバンド内に密に詰まっているときに古典シャドウ法よりも低い。本報では、拡張ベル測定による期待値評価や量子状態トモグラフィを、量子コンピュータ実機のノイズを考慮しないシミュレータを用いて実験し、有限回ショットによる精度を古典シャドウ法と比較した。その結果、 A が $O(1)$ のバンド幅を持つ場合に、古典シャドウ法よりも精度よく期待値 $\langle \psi | A | \psi \rangle$ の評価を行えることが実験的に示された。また、 A が $O(1)$ のバンド幅を持つ場合に所望の精度で期待値 $\langle \psi | A | \psi \rangle$ を評価するのに必要なショット数は $O(n^2)$ であることが示された。さらに、量子状態トモグラフィでは古典シャドウ法よりも拡張ベル測定の方がわずかに精度が悪いが、スケーラビリティは同程度であることがわかった。

キーワード: 拡張ベル測定、期待値、量子状態トモグラフィ

Finite Shot Accuracy of Extended Bell Measurement on Expectation Evaluation and Quantum State Tomography

Abstract: We proposed an efficient measurement-based method to evaluate $\langle \psi | A | \psi \rangle$ for arbitrary $A \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$, which we refer to as extended Bell measurement (XBM). The number of CNOT gates required for the XBM is at most $n-1$, which is less than that for the classical shadow with random Clifford measurement ($O(n^2 / \log(n))$) and thus, appropriate for the noisy intermediate-scale quantum devices. The upper bound of the variance of the expectation evaluation of the XBM is lower than that of the classical shadow when A has $O(n^c)$ bandwidth and the non-zero elements densely fill the band. In this report, we show experimental results for the comparison of the finite shot accuracy between the XBM and the classical shadow on the expectation evaluation and the quantum tomography using noiseless quantum computer simulator. The results show that the XBM can evaluate $\langle \psi | A | \psi \rangle$ more accurately than the classical shadow when the bandwidth of A is $k = O(1)$. In addition, we found that the number of shots required to evaluate $\langle \psi | A | \psi \rangle$ is $O(n^2)$ for $k = O(1)$. The finite shot accuracy of the quantum state tomography of the XBM is slightly worse than that of the classical shadow but the scalability on the state size is comparable.

Keywords: Extended Bell Measurement, Expectation, Quantum State Tomography

1. はじめに

$\langle \psi | A | \psi \rangle$ の形式をした期待値評価は量子-古典ハイブリッド

ドアルゴリズムなどの重要なサブルーチンであり、この評価をいかに効率よく行うかが全体のアルゴリズムの計算コストに直結する。ここで $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^{2^n}$ は n 量子ビットの量子状態、 $A \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$ は任意の複素行列である。期待値評価の最も基本的な手法はパウリ測定であるが、パウリ測定は A が比較的少数のパウリ列で表現されていることが前提で

¹ 株式会社豊田中央研究所
Toyota Central R&D Labs., Inc., 41-1, Yokomichi, Nagakute,
Aichi 480-1192, Japan

^{a)} r-kondo@mosk.tytlabs.co.jp

あり、それ以外の行列、例えば帯行列などでは非常に多くの測定が必要となる。同じ量子回路で評価が可能なのはできるだけまとめることで計算コストを下げる方法も多く提案されているが [1-7]、量子回路数を最小にするためには最小クリーク被覆問題といった NP 困難な問題を解く必要があるためこの問題の解法に時間がかかってしまうという問題がある。また、近年では量子コンピュータの応用は量子化学計算にとどまらず、例えば古典的な数値計算にも応用され始めており [8,9]、そのような応用例では必ずしも A はパウリ基底で効率的に展開できないため、任意の A に対する効率的な期待値評価の需要が高まっている。特に、有限要素法をはじめとする古典数値シミュレーションでは A が帯行列の場合の期待値計算が重要なサブルーチンとなっている。

任意の A に対する既存の期待値評価手法としてランダムクリフォード測定による古典シャドウ法 (classical shadow) [10] が挙げられるが、ランダムクリフォード回路は $O(n^2/\log(n))$ 個の CNOT 回路を含むため、NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) [11] デバイスには適さないことが知られている。

本報ではたかだか $n-1$ 個の CNOT を含む測定演算子による期待値評価方法、拡張ベル測定 (XBM) [12] を用いて、 $\langle \psi | A | \psi \rangle$ を効率的に評価する方法について報告する。また、ノイズなし量子コンピュータのシミュレータを用いて XBM と古典シャドウ法による期待値評価と量子状態トモグラフィの実験を行い、ショット数が有限回の場合の精度比較を示す。

2. 拡張ベル測定

本節では文献 [12] で提案された拡張ベル測定 (XBM) の概要について述べる。詳細な式導出は文献 [12] を参照されたい。

2.1 期待値

$\langle \psi | A | \psi \rangle$ は以下のように表現できる。

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{l \in \mathcal{S}(A)} \sum_{s \in \{\text{Re}, \text{Im}\}} \sum_{b=0}^{2^n-1} a(l, s, b) p(l, s, b) \quad (1)$$

ここで

$$\mathcal{S}(A) = \{b \oplus c | A_{bc} \neq 0\} \quad (2)$$

であり、 $a(l, s, b)$ および $p(l, s, b)$ は次式で表される。

$$a(l, s, b) = \begin{cases} \frac{A_{bb}}{p(l, s)} & l = 0^n \\ \frac{(-1)^w A_{(b'c')}}{p(l, s)} & l \neq 0^n, s = \text{Re} \\ \frac{i(-1)^w A_{[b'c']}}{p(l, s)} & l \neq 0^n, s = \text{Im} \end{cases} \quad (3)$$

$$p(l, s, b) = p(l, s) |\langle b | M_s^{(l)} | \psi \rangle|^2 \quad (4)$$

$A_{(bc)} = (A_{bc} + A_{cb})/2$ および $A_{[bc]} = (A_{bc} - A_{cb})/2$ はそれぞれ A の対称部分および反対称部分である。整数インデックス b' および c' と整数値 w は次式で定義される。

$$(b', c', w) = \begin{cases} (b, b \oplus l, 0) & b < b \oplus l \\ (b \oplus 2^{j_0^{(l)}}, b \oplus l \oplus 2^{j_0^{(l)}}, 1) & b > b \oplus l \end{cases} \quad (5)$$

ここで \oplus はビットごとの XOR である。 $M_s^{(l)}$ はインデックス l および s で特徴づけられる測定演算子であり、次式で表される。

$$M_{\text{Re}}^{(l)} = H(j_0^{(l)}) \prod_{k \in \mathcal{T}^{(l)}} \text{CNOT}(j_0^{(l)}, k) \quad (6)$$

$$M_{\text{Im}}^{(l)} = H(j_0^{(l)}) \prod_{k \in \mathcal{T}^{(l)}} \text{CNOT}(j_0^{(l)}, k) S^\dagger(j_0^{(l)}) \quad (7)$$

$$M_s^{(0^n)} = I \quad (8)$$

ここで $H(j)$ および $S(j)$ は j 番目の量子ビットに作用するアダマールゲートおよび位相ゲート、 $\text{CNOT}(j, k)$ は j 番目の量子ビットをコントロール、 k 番目の量子ビットをターゲットとした CNOT ゲートであり、 $j_0^{(l)}$ および $\mathcal{T}^{(l)}$ は次式で定義される。

$$j_0^{(l)} = \max\{j | l_j = 1\} \quad (9)$$

$$\mathcal{T}^{(l)} = \{j | l_j = 1\} \setminus \{j_0^{(l)}\} \quad (10)$$

$p(l, s)$ は測定演算子を選択する確率分布であり、自由に設計できるものである。後述するように、 $p(l, s)$ を適切に設計することで期待値評価の分散上限を減らすことができる。測定演算子がベル測定の演算子と類似しており、CNOT 数を複数用いている点が異なるため、上記の期待値評価方法は拡張ベル測定 (extended Bell measurement; XBM) と呼ばれる。

XBM では以下の手順で期待値を評価する。

- i $l, s \sim p(l, s)$ をサンプリング。
- ii 式 (6)、(7)、(8) にしたがって測定演算子 $M_s^{(l)}$ を構築。
- iii 量子状態 $M_s^{(l)} | \psi \rangle$ を観測することでビット列 $b \sim |\langle b | M_s^{(l)} | \psi \rangle|^2$ をサンプリング。
- iv 式 (3) より、整数のタプル (l, s, b) から結果 $a(l, s, b)$ を得る。
- v i-iv を N 回繰り返して、 a_1, \dots, a_N を得る。得られた数列の算術平均や Median-of-means などを計算して $\langle \psi | A | \psi \rangle$ の評価値とする。

2.2 量子回路の個数

XBM で必要となる量子回路の個数は異なる $M_s^{(l)}$ の個数に等しく、 $l \in \mathcal{S}(A)$ および $s \in \{\text{Re}, \text{Im}\}$ であるため、結局必要な量子回路の個数は

$$m = |\mathcal{S}(A) \times \{\text{Re}, \text{Im}\}| \quad (11)$$

である。式 (2) より $\mathcal{S}(A)$ は A の非ゼロ要素の場所のみによって決まるため、XBM における量子回路の必要個数は A の非ゼロ要素の位置で決まるといえる。

A の非ゼロ要素がある特定の場所に集中している場合は量子回路の個数の上限を計算することができる。バンド幅 k の行列 A の期待値評価に必要な量子回路の個数の上限は

$$\bar{m} = 2((n - \lceil \log_2 k \rceil)k) + 2^{\lceil \log_2 k \rceil} \quad (12)$$

と書ける。バンド幅が量子ビット数の多項式オーダーである場合、つまり $k = O(n^c)$ の場合、

$$\bar{m} = O(n^{c+1}) \quad \text{for} \quad k = O(n^c) \quad (13)$$

となる。

2.3 分散上限

式 (1) は確率 $p(l, s, b)$ と結果 $a(l, s, b)$ の積和の形となっており、いわゆる離散確率変数の期待値の定義と同じ形式となっている。そのため分散の評価は容易に行えて、 $\langle \psi | A | \psi \rangle = \mathbb{E}[\hat{a}]$ であるような確率変数を \hat{a} と書けば分散上限を次式のように書ける。

$$\begin{aligned} \text{Var}[\hat{a}] &= \mathbb{E}[|\hat{a}|^2] - |\mathbb{E}[\hat{a}]|^2 \\ &\leq \mathbb{E}[|\hat{a}|^2] \\ &= \sum_{l, s, b} |a(l, s, b)|^2 p(l, s, b) \end{aligned} \quad (14)$$

式 (3) および式 (14) より、本手法による分散上限は $p(l, s)$ のモデルに依存することがわかる。例えば $p(l, s)$ を一様分布、すなわち

$$p(l, s) = \frac{1}{m} \quad (15)$$

とすれば、分散上限は

$$\text{Var}[\hat{a}] \leq m^2 \max_{b, c} \{|A_{(bc)}|^2, |A_{[bc]}|^2\} \quad (16)$$

となる。これは A の非ゼロ成分の場所のみの情報から $p(l, s)$ をモデル化する例であり、計算は容易だが分散上限はやや大きい。 A の非ゼロ成分の値まで考慮して

$$p(l, s) = \begin{cases} \frac{\max_b |A_{bb}|}{Z} & l = 0^n \\ \frac{\max_b |A_{(b'c')}|}{Z} & l \neq 0^n, s = \text{Re} \\ \frac{\max_b |A_{[b'c']}|}{Z} & l \neq 0^n, s = \text{Im} \end{cases} \quad (17)$$

$$Z = \max_b |A_{bb}| + \sum_{l \in \mathcal{S}(A) \setminus \{0^n\}} \left(\max_b |A_{(b'c')}| + \max_b |A_{[b'c']}| \right) \quad (18)$$

とすれば、分散上限は

$$\text{Var}[\hat{a}] \leq |Z|^2 \quad (19)$$

と書け、この上限は式 (16) よりも小さい。

2.4 量子回路構築コスト

式 (6)-(8) で示すように、XBM における測定演算子は $j_0^{(l)}$ と $\mathcal{T}^{(l)}$ が分かれば直ちに構築できる。ゲートの数は最大で 1 個のアダマールゲート、1 個の位相ゲート、 $n-1$ 個の CNOT ゲートであるため、ゲートカウントは最大で $n+1$ である。また、 $j_0^{(l)}$ と $\mathcal{T}^{(l)}$ も式 (9) および (10) に示すように l の値と単純なビット演算によって得られる。すなわち、XBM では最小クリーク被覆問題のような NP 困難な問題を解く必要はなく、回路構築コストは非常に低い。

2.5 XBM による古典スナップショット

古典シャドウ法 [10] では古典スナップショットという量が導入されており、ランダムパウリ測定とランダムクリフォード測定による古典スナップショットの計算方法が述べられている。ランダムパウリ測定では測定演算子にパウリ測定と同じ量子回路を用いており、ランダムクリフォード測定ではクリフォード回路を用いている。古典スナップショットはその期待値が密度行列になるような量であり、オブザーバブルの期待値やターゲット状態との忠実度 (fidelity) など、様々な量を計算するもとなる。

ランダムパウリ測定とランダムクリフォード測定に続き、XBM を用いた古典スナップショットを定義することができる。XBM による古典スナップショットは次式のように書ける。

$$\hat{\rho}(l, s, b) = \begin{cases} \frac{|b\rangle\langle b|}{p(l=0^n)} & l = 0^n \\ (-1)^w \frac{|c'\rangle\langle b'| + |b'\rangle\langle c'|}{2p(l, s = \text{Re})} & l \neq 0^n, s = \text{Re} \\ i(-1)^w \frac{|c'\rangle\langle b'| - |b'\rangle\langle c'|}{2p(l, s = \text{Im})} & l \neq 0^n, s = \text{Im} \end{cases} \quad (20)$$

この古典スナップショットを古典メモリに格納する際に必要な情報は、1 つの古典スナップショットあたり 3 つの整

数値のタプル (l, s, b) および 1 つの実数値 $p(l, s)$ である。

3. 実験結果

本節では XBM による $\langle \psi | A | \psi \rangle$ の評価と量子状態トモグラフィの実験結果について述べる。実験はすべて Qiskit [13] のシミュレータを用いた。

3.1 期待値評価の精度

はじめに、 $\langle \psi | A | \psi \rangle$ を有限回のショットで評価した場合の精度を XBM と古典シャドウ法で比較する。

$|\psi\rangle \in \mathbb{C}^{2^n}$ は Haar ランダムな状態とし、 $A \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$ は $\text{Re}(A_{bc}) \sim \mathcal{N}(10, 1)$ および $\text{Im}(A_{bc}) \sim \mathcal{N}(10, 1)$ であるようなバンド幅 $k = 5$ の行列とした。すべての実験でショット数は 100 として $\langle \psi | A | \psi \rangle$ を評価した。それぞれの $1 \leq n \leq 11$ について 100 個の A と $|\psi\rangle$ をランダムに生成し、 $\langle \psi | A | \psi \rangle$ の相対誤差を求めた。相対誤差は次式で定義した。

$$\epsilon = \frac{|\langle \psi | A | \psi \rangle_{\text{eval}} - \langle \psi | A | \psi \rangle_{\text{true}}|}{|\langle \psi | A | \psi \rangle_{\text{true}}|} \quad (21)$$

ここで $(\bullet)_{\text{eval}}$ および $(\bullet)_{\text{true}}$ はそれぞれ (\bullet) のショット評価値および状態ベクトルシミュレータから得られる真値である。

図 1 は XBM とランダムクリフォード測定 (RCM) による古典シャドウ法の比較である。図 1(a) は分散上限の比較であり、XBM における分散上限 (式 (19)) と RCM を用いた古典シャドウ法における分散上限

$$\overline{\text{Var}[\hat{a}]_{\text{RCM}}} = \sqrt{9 + \frac{6}{2^n} \text{tr}(A^2)} \quad (22)$$

の比、

$$\mathcal{R} = \frac{\overline{\text{Var}[\hat{a}]_{\text{XBM}}}}{\overline{\text{Var}[\hat{a}]_{\text{RCM}}}} = \frac{|Z|^2}{\sqrt{9 + \frac{6}{2^n} \text{tr}(A^2)}} \quad (23)$$

をプロットした。図より、いずれの量子ビット数においても $\mathcal{R} < 1$ となっており、XBM の分散上限の方が低いことがわかる。一方、図 1(b) はショット数 100 における相対誤差の比較である。図より、 $n \leq 5$ では両手法による $\langle \psi | A | \psi \rangle$ の評価精度に大きな違いは見られないが、 $n \geq 6$ では XBM の方が相対誤差が小さく、古典シャドウ法よりも XBM の方が精度よく $\langle \psi | A | \psi \rangle$ を評価できていることがわかる。これらの結果は A のバンド幅が $k = O(n^c)$ のときに古典シャドウ法よりも XBM の方が分散上限が小さくなるという理論式 [12] と一致する。

3.2 期待値評価に必要なショット数の下限

次に、 A のバンド幅が $k = O(n^c)$ のとき、XBM を用いて所望の精度で期待値評価を行うために必要なショット数を考える。Chebyshev の不等式より、相対誤差が ϵ 以上になる確率を δ 以下にするためには (以下、精度 (ϵ, δ) と呼ぶ)、

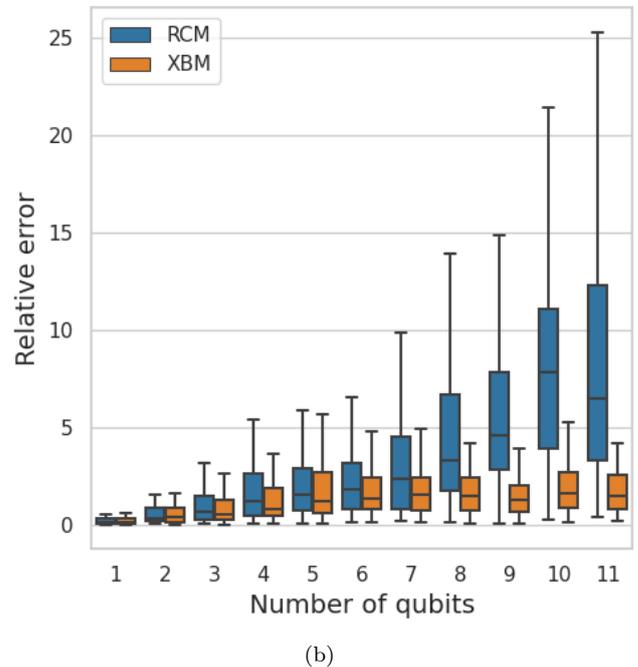
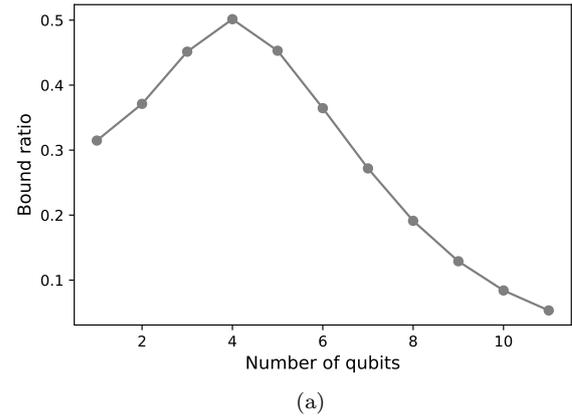


図 1 XBM と古典シャドウ法 (ランダムクリフォード測定; RCM) による $\langle \psi | A | \psi \rangle$ の評価精度比較。 $A \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$ はバンド幅 $k = 5$ のランダム行列、 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^{2^n}$ は Haar ランダムな状態； (a) 1 ショット評価における分散上限の比 (XBM/RCM)； (b) ノイズなしショットシミュレータによる 100 ショット評価の相対誤差。ボックスの上下端は第 1 四分位点 ($Q_{1/4}$) および第 3 四分位点 ($Q_{3/4}$)、ひげの上下端は外れ値を除いた最大・最小値で、 $[Q_{1/4} - 1.5\text{IQR}, Q_{1/4} + 1.5\text{IQR}]$ ($\text{IQR} := Q_{3/4} - Q_{1/4}$) の範囲外を外れ値とした。

分散は $\text{Var}[\hat{a}] \leq \delta \epsilon^2 |\mathbb{E}[\hat{a}]|^2$ とする必要がある。1 ショットの分散上限は式 (19) で表されるのと、 S 個のサンプルの算術平均で期待値評価を行う場合は分散が $1/S$ になることを合わせると、XBM で精度 (ϵ, δ) の期待値評価を行うにはショット数は

$$S \geq \frac{\text{Var}[\hat{a}]}{\delta \epsilon^2 |\mathbb{E}[\hat{a}]|^2} = \frac{|Z|^2 - |\langle \psi | A | \psi \rangle|^2}{\delta \epsilon^2 |\langle \psi | A | \psi \rangle|^2} \quad (24)$$

を満たさなければならない。ここで、

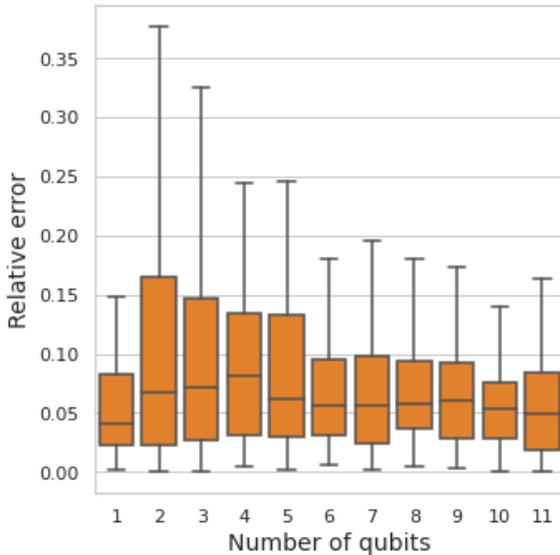


図 2 XBM によるショット数 $1000n^2$ の $\langle \psi | A | \psi \rangle$ の評価精度。 $A \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$ はバンド幅 $k = 5$ のオブザーバブル、 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^{2^n}$ は Haar ランダムな状態。ボックスの上下端は第 1 四分位点 ($Q_{1/4}$) および第 3 四分位点 ($Q_{3/4}$)、ひげの上下端は外れ値を除いた最大・最小値で、 $[Q_{1/4} - 1.5\text{IQR}, Q_{1/4} + 1.5\text{IQR}]$ ($\text{IQR} := Q_{3/4} - Q_{1/4}$) の範囲を外れ値とした。

$$|Z| = O(m|A|_{\max}) \quad (25)$$

$$|\langle \psi | A | \psi \rangle| = O(|A|_{\max}) \quad (26)$$

と仮定すると、精度 (ϵ, δ) に必要なショット数は

$$S = O\left(\frac{m^2}{\delta\epsilon^2}\right) \quad (27)$$

と書ける。式 (13) より $k = O(n^c)$ ならば $m = O(n^{c+1})$ なので、

$$S = O\left(\frac{n^{2c+2}}{\delta\epsilon^2}\right) \quad (28)$$

となる。つまり、式 (25) および (26) の仮定が成り立つ場合かつ A が量子ビット数 n に対して多項式オーダーのバンド幅を持つとき、必要なショット数は n の多項式オーダーに抑えられるといえる。

Z の定義式 (18) より式 (25) の仮定は成り立つ場合が多いが、求めたい期待値そのものの仮定である式 (26) が成り立つかが事前にわかっていることは少なく、実験的に確認するしかない。そこで $c = 0$ の場合、つまり $k = O(1)$ の場合を考え、ショットシミュレータによる実験を行った。 A のバンド幅は $k = 5$ とし、ショット数は $1000n^2$ とした。式 (28) が正しければ、 $k = O(1)$ の場合は $S = O(n^2)$ とすることで精度 (ϵ, δ) が達成できるため、 $S = 1000n^2$ とすれば量子ビット数 n に依らず同じ精度が達成できるはずである。

図 2 は各量子ビット数 n に大して 100 回の期待値評価を行い、その相対誤差をプロットしたものである。図より、量子ビット数を増やしても相対誤差が増えないため、少なく

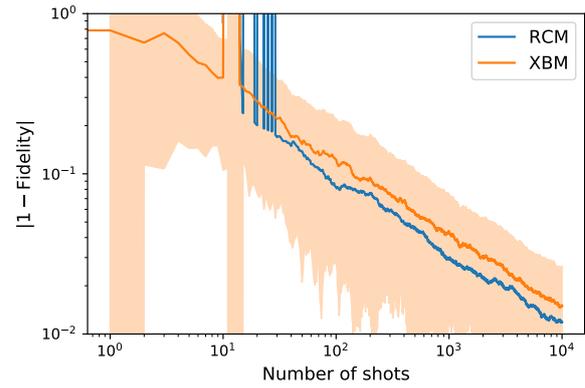


図 3 XBM と古典シャドウ法 (ランダムクリフォード測定; RCM) による $n = 5$ 量子ビットの Haar ランダムな状態の量子状態トモグラフィ精度の比較。

とも定数オーダーのバンド幅を持つ A に関しては、XBM を用いることで $O(n^2)$ のショット数で所望の精度の $\langle \psi | A | \psi \rangle$ 評価が行えるといえる。

3.3 量子状態トモグラフィ

最後に、有限回数のショットによる量子状態トモグラフィ精度を XBM と古典シャドウ法で比較する。Haar ランダムな状態 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^{2^n}$ から作られる密度行列 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ に対して、XBM およびランダムクリフォード測定を用いた量子状態トモグラフィを行う。ある一つの密度行列に対して、両手法による古典スナップショット (式 (20) および文献 [10] を参照) をショットシミュレータによって 10000 個計算し、 $S (1 \leq S \leq 10000)$ 個の古典スナップショットの算術平均を密度行列の推定値とする。得られた密度行列の推定値 ρ_{eval} と状態ベクトルシミュレータによって得られた真の密度行列 ρ_{true} との忠実度 $F = |\text{tr} \sqrt{\sqrt{\rho_{\text{eval}}} \rho_{\text{true}}} \sqrt{\rho_{\text{eval}}}|^2$ を計算する。異なる 100 個の密度行列に対して上記の操作を行い、平均と標準偏差を求めた。

図 3 の実線はショット数を増やしていった時の $|1 - F|$ の平均、網掛け領域は標準偏差である。完璧な量子状態トモグラフィが達成できたときに $F = 1$ となるため、 $|1 - F|$ が小さいほど精度よく量子状態トモグラフィができているといえる。ここで、密度行列はその定義から半正定値かつトレースが 1 とならなければならないが、有限回ショットの量子状態トモグラフィによって得られる行列はその性質を必ずしも満たしていない。したがって、ここでは必ずしも $F \in [0, 1]$ とはならないことに注意されたい。図より、XBM による量子状態トモグラフィはランダムクリフォード測定によるものよりわずかに精度が低いことがわかる。しかしながら、ショット数に対するスケールは両手法でほぼ同程度である。ランダムクリフォード測定では $O(n^2 / \log(n))$ 個の CNOT を使用するのに対して、XBM では多くても $n - 1$ 個の CNOT しか使わないため、実機

エラーまで考慮すると NISQ では XBM の方が精度よく量子状態トモグラフィが行えると考えられる。

4. おわりに

本報では効率的に期待値評価や量子状態トモグラフィを行うことのできる拡張ベル測定 (XBM) の有限回ショットによる精度の評価をノイズなしショットシミュレータで行った。その結果、 A のバンド幅が $k = O(1)$ の場合に古典シャドウ法よりも高精度に期待値 $\langle \psi | A | \psi \rangle$ の評価が行えることが分かった。また、 $k = O(1)$ の期待値 $\langle \psi | A | \psi \rangle$ の評価は $O(n^2)$ のショットで所望の精度で行えることが分かった。量子状態トモグラフィは拡張ベル測定よりも古典シャドウ法の方がわずかに精度が良かったが、量子状態のサイズに対するスケーラビリティは同程度であった。拡張ベル測定は古典シャドウ法よりも必要とする CNOT 数が少ないことも考慮に入れると、ノイズあり量子コンピュータ実機における帯行列の期待値評価と量子状態トモグラフィでは、拡張ベル測定は古典シャドウ法に対して優位であるといえる。

謝辞 本研究は、UTokyo Quantum Initiative の支援を受けたものである。

参考文献

- [1] Jena, A., Genin, S. and Mosca, M.: Pauli partitioning with respect to gate sets, *arXiv preprint arXiv:1907.07859*, (online), DOI: 10.48550/arXiv.1907.07859 (2019).
- [2] Verteletskyi, V., Yen, T.-C. and Izmaylov, A. F.: Measurement optimization in the variational quantum eigensolver using a minimum clique cover, *The Journal of chemical physics*, Vol. 152, No. 12, p. 124114 (online), DOI: 10.1063/1.5141458 (2020).
- [3] Izmaylov, A. F., Yen, T.-C., Lang, R. A. and Verteletskyi, V.: Unitary partitioning approach to the measurement problem in the variational quantum eigensolver method, *Journal of chemical theory and computation*, Vol. 16, No. 1, pp. 190–195 (online), DOI: 10.1021/acs.jctc.9b00791 (2020).
- [4] Zhao, A., Tranter, A., Kirby, W. M., Ung, S. F., Miyake, A. and Love, P. J.: Measurement reduction in variational quantum algorithms, *Physical Review A*, Vol. 101, No. 6, p. 062322 (online), DOI: 10.1103/PhysRevA.101.062322 (2020).
- [5] Gokhale, P., Angiuli, O., Ding, Y., Gui, K., Tomesh, T., Suchara, M., Martonosi, M. and Chong, F. T.: $O(N^3)$ Measurement Cost for Variational Quantum Eigensolver on Molecular Hamiltonians, *IEEE Transactions on Quantum Engineering*, Vol. 1, pp. 1–24 (online), DOI: 10.1109/tqe.2020.3035814 (2020).
- [6] Crawford, O., van Straaten, B., Wang, D., Parks, T., Campbell, E. and Brierley, S.: Efficient quantum measurement of Pauli operators in the presence of finite sampling error, *Quantum*, Vol. 5, p. 385 (online), DOI: 10.22331/q-2021-01-20-385 (2021).
- [7] Hamamura, I. and Imamichi, T.: Efficient evaluation of quantum observables using entangled measurements, *npj Quantum Information*, Vol. 6, No. 1, pp. 1–8 (online), DOI: 10.1038/s41534-020-0284-2 (2020).
- [8] Liu, H.-L., Wu, Y.-S., Wan, L.-C., Pan, S.-J., Qin, S.-J., Gao, F. and Wen, Q.-Y.: Variational quantum algorithm for the Poisson equation, *Physical Review A*, Vol. 104, No. 2, p. 022418 (online), DOI: 10.1103/physreva.104.022418 (2021).
- [9] Sato, Y., Kondo, R., Koide, S., Takamatsu, H. and Imoto, N.: Variational quantum algorithm based on the minimum potential energy for solving the Poisson equation, *Physical Review A*, Vol. 104, No. 5, p. 052409 (online), DOI: 10.1103/physreva.104.052409 (2021).
- [10] Huang, H.-Y., Kueng, R. and Preskill, J.: Predicting many properties of a quantum system from very few measurements, *Nature Physics*, Vol. 16, No. 10, pp. 1050–1057 (online), DOI: 10.1038/s41567-020-0932-7 (2020).
- [11] Preskill, J.: Quantum computing in the NISQ era and beyond, *Quantum*, Vol. 2, p. 79 (online), DOI: 10.22331/q-2018-08-06-79 (2018).
- [12] Kondo, R., Sato, Y., Koide, S., Kajita, S. and Takamatsu, H.: Computationally Efficient Quantum Expectation with Extended Bell Measurements, *Quantum*, Vol. 6, p. 688 (online), DOI: 10.22331/q-2022-04-13-688 (2022).
- [13] Abraham, H. et al.: Qiskit: An Open-source Framework for Quantum Computing (2019).